

Contribution à la modélisation des écoulements turbulent réactifs partiellement prémélangés

Vincent Robin

▶ **To cite this version:**

Vincent Robin. Contribution à la modélisation des écoulements turbulent réactifs partiellement prémélangés. Energie électrique. Université de Poitiers; ENSMA, 2007. Français. NNT : . tel-00258526

HAL Id: tel-00258526
https://theses.hal.science/tel-00258526

Submitted on 22 Feb 2008

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.

THÈSE

pour l'obtention du Grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE POITIERS

Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique
Faculté des Sciences Fondamentales et Appliquées

(Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006)

Ecole Doctorale : Sciences Pour l'Ingénieur
Secteur de Recherche : Energétique, Thermique, Combustion

Présentée par :

Vincent ROBIN

****

Contribution à la Modélisation des Ecoulements Turbulents Réactifs Partiellement Prémélangés

****

Directeurs de thèse : **Michel CHAMPION** et **Arnaud MURA**

****

Soutenue le 14 décembre 2007 devant la commission d'examen

****

- Jury -

M.	J. BOREE	Professeur des Universités, LEA, Poitiers	Président
M.	M. CHAMPION	Directeur de Recherche au CNRS, LCD, Poitiers	
Mme.	P. DOMINGO	Chargée de Recherche au CNRS, CORIA, Rouen	Rapporteur
M.	A. MURA	Chargé de Recherche au CNRS, LCD, Poitiers	
M.	P. PLION	Ingénieur de Recherche, EDF, Chatou	
M.	B. RENOU	Maître de conférence, CORIA, Rouen	
M.	D. VEYNANTE	Directeur de Recherche au CNRS, EM2C, Paris	Rapporteur

Remerciements

Cette thèse s'inscrit dans la continuité des travaux de recherche sur la combustion turbulente réalisés pendant mon stage de DEA. Ce stage a été effectué dans le département de Mécanique des Fluides, Energie et Environnement du groupe EDF et au Laboratoire de Combustion et Détonique de Poitiers du CNRS. Je remercie très chaleureusement Pierre Plion et Michel Champion, tous deux responsables de ce stage, de m'avoir fait confiance et de m'avoir permis de continuer à travailler avec eux pendant cette thèse.

Je tiens à remercier les directeurs successifs du LCD (UPR 9028) Michel Champion et Henri-Noël Presles de m'avoir accueilli au sein de ce laboratoire.

J'exprime ma profonde reconnaissance à mes directeurs de thèse Michel Champion et Arnaud Mura pour leurs conseils, leur soutien et leur encadrement qui ont été remarquables tout au long de ce travail. Je remercie également Pierre Plion pour l'intérêt et le suivi qu'il a portés à ce travail et son soutien constant pendant ces trois années.

Je tiens à remercier Jacques Borrée qui a présidé la soutenance de cette thèse, Pascale Domingo et Denis Veynante qui ont accepté de juger ce travail et d'en être rapporteur.

Je remercie également très sincèrement Bruno Renou d'avoir accepté dans l'urgence de faire partie du jury de cette thèse ; je le remercie également pour ses conseils et son aide précieuse lors de notre travail commun avec l'équipe du CORIA.

Je tiens à remercier particulièrement le professeur Hasegawa de l'Université de Nagoya qui m'a accueilli dans son laboratoire pendant un mois et qui nous a fourni des données essentielles pour avancer dans nos travaux.

Je remercie Cécile Losier pour sa participation active à ces travaux.

Enfin, je remercie tous les doctorants, stagiaires et personnels du LCD de leur sympathie, de leur soutien et de leur amitié : Camille Strozzi, Fabien Chassagne, Olivier Esnault,

Bernado Martinez, Nicolas Leboucher, Laurence Pagnanini, Jean-François Izard, Ignace Befeno, Kazuya Tsuboy, John Grondin, Rui Rego, Vianey Guilly et tous les autres...

Un grand merci aussi à ma femme qui m'a supporté et soutenu pendant ces trois années.

Ce travail a été financé par le CNRS et par le département de Mécanique des Fluides, Energie et Environnement du groupe EDF.

Table des matières

Remerciements iii

Table des matières vii

Nomenclature xiii

Table des figures xix

Liste des tableaux xxv

Introduction 1

I Combustion Turbulente : Analyse et Modélisation 5

1 Phénomènes Physiques et Formulations Mathématiques 7

1.1 Combustion et Flammes 8

1.1.1 Notion de Cinétique Chimique 8

1.1.2 Les Différents Types de Flammes 10

1.1.3 Equations Usuelles 13

1.1.4 Approximation de Schvab-Zeldovitch 15

1.2 Turbulence 18

1.2.1 Caractéristiques des Ecoulements Turbulents 18

1.2.2 Equations Moyennes et Problèmes de Fermeture 21

1.3 Modélisation de la Turbulence 25

1.3.1 Modèle $k - \epsilon$ 25

1.3.2 Modèle $R_{ij} - \epsilon$ . . . 28
1.4 Interaction entre Combustion et Turbulence . . . 32
1.4.1 Flammes Turbulentes de Prémélange . . . 32
1.4.2 Flammes Turbulentes Partiellement Prémélangées . . . 36
1.5 Conclusions . . . 38

2 Modélisation de la Combustion Turbulente 41
2.1 Approches de Modélisation . . . 41
2.2 Prémélange Parfait et Chimie Infiniment Rapide . . . 45
2.2.1 Modèle "Eddy Break-Up" . . . 45
2.2.2 Modèle Bray-Moss-Libby . . . 46
2.2.3 Modèles à une Equation de Transport . . . 48
2.3 Prémélange Parfait et Temps Chimique Fini . . . 49
2.3.1 PDF Calculée . . . 49
2.3.2 PDF Présumée . . . 50
2.4 Prémélange Partiel . . . 51
2.5 Les Modèle Libby-Williams et LW-P . . . 52
2.6 Conclusions . . . 54

3 Transports Turbulents Scalaires 57
3.1 Transports Gradient et Contre-Gradient . . . 57
3.2 Flammes Turbulentes de Prémélange . . . 60
3.3 Flammes Turbulentes Partiellement Prémélangées . . . 62
3.4 Modélisation des Fluctuations de Pression . . . 64
3.5 Conclusions . . . 67

II Le Modèle LW-P 69

4 Description du Modèle LW-P 71
4.1 Cinétique Chimique . . . 72
4.2 Espace des Compositions . . . 73
4.3 Paramètres de la PDF . . . 74

4.3.1 Premier Ordre . . . 75
4.3.2 Second Ordre . . . 78
4.4 Comportement de la PDF . . . 80
4.5 Conclusions . . . 82

5 Présentation des Modèles de Fermeture des Equations de Transport 83
5.1 Equations Scalaires . . . 83
5.1.1 Termes dus à la Réaction Chimique . . . 83
5.1.2 Termes de Diffusion . . . 84
5.1.3 Termes de Dissipation . . . 85
5.2 Equations des Flux Turbulents . . . 85
5.2.1 Terme dû à la Réaction Chimique . . . 85
5.2.2 Terme de Diffusion . . . 85
5.2.3 Terme de Dissipation . . . 86
5.2.4 Termes de Corrélation Scalaire-Pression . . . 87
5.3 Equations pour les Tensions de Reynolds . . . 88
5.3.1 Terme de Dissipation . . . 88
5.3.2 Terme de Corrélation Vitesse-Pression . . . 89
5.4 Conclusions . . . 90

6 Dissipations Scalaires 91
6.1 Prémélange Parfait . . . 92
6.2 Prémélange Partiel . . . 93
6.2.1 Expressions des Seconds Moments . . . 94
6.2.2 Facteur de Ségrégation S_Y . . . 96
6.3 Conclusions . . . 97

7 Modélisation des Effets des Fluctuations de Pression 99
7.1 Utilisation de la PDF . . . 100
7.2 Gradients de Pression Moyenne Conditionnés . . . 101
7.3 Les Effets d'Isotropisation . . . 103
7.4 Caractéristiques des Bases de Données DNS . . . 104

7.5 Validation du Modèle en Prémélange Parfait 106
7.6 Conclusions 109

III Résultats des Simulations Numériques 111

8 Simulation du Premier Ordre de la Configuration ORACLES 113
8.1 Description de la Configuration ORACLES 114
8.2 Conditions aux Limites et Ecoulements Non Réactifs 117
8.3 Simulation d'un Ecoulement Réactif Parfaitement Prémélangé 121
8.4 Ecoulements Réactifs Partiellement Prémélangés 126
8.5 Conclusions 128

9 Simulation d'une Combustion dans un Ecoulement Turbulent Stratifié 133
9.1 Dispositif Expérimental et Diagnostics Optiques 134
9.2 Conditions des Simulations Numériques 139
9.2.1 Domaine de Calcul et Conditions aux Limites 139
9.2.2 Temps Caractéristique Chimique du Méthane 143
9.3 Simulations Numériques des Ecoulements Réactifs 145
9.3.1 Comparaison des Simulations avec les Données Expérimentales . . . 147
9.3.2 Analyse d'une Flamme Turbulente Stratifiée 152
9.4 Conclusions 159

10 Simulation du Second Ordre de la Configuration ORACLES 161
10.1 Production de Turbulence par la Flamme 162
10.2 Importance des Zones de Diffusion Gradient et Contre-Gradient 167
10.3 Conclusions 169

Conclusions et Perspectives 171

Bibliographie 177

Annexes 187

A La Limite du Régime de Flammelettes 189

A.1 Equation de Transport pour $(Y_{\max} - Y)(Y - Y_{\min})$ 190

A.2 Prémélange Parfait à la Limite du Régime de Flammelettes 193

A.2.1 Expression de la Dissipation Scalaire 193

A.2.2 Valeur de la Variance 193

A.2.3 Equation de Transport de la Variance 194

A.3 Prémélange Partiel à la Limite du Régime de Flammelettes 195

A.3.1 Expression des Dissipations Scalaires 195

A.3.2 Valeurs de la Variance et de la Covariance 196

A.3.3 Equation de Transport de la Variance 197

A.3.4 Equation de Transport de la Covariance 202

B Le Modèle LW-P dans *Code-Saturne* 205

B.1 Caractéristiques Principales de *Code-Saturne* 205

B.2 Implantation du Modèle LW-P 206

C Publications Associées 209

C.1 A Multi Dirac Presumed PDF Model for Turbulent Reactive Flows with Variable Equivalence Ratio 209

C.2 Modeling of Scalar Dissipation in Partially Premixed Turbulent Flames . . 209

Nomenclature

A	:	coefficient directeur de la droite d'équilibre dans l'espace (ξ,Y)
B, K	:	coefficient pré-exponentiel
C_μ	:	constante de modélisation $C_\mu = 0.09$
$C_?$	:	constante de modélisation
$C_{p,i}$	:	chaleur massique de l'espèce i
$C_{p,m}$	:	chaleur massique du mélange
d	:	coefficient directeur de la droite des fluctuations dans l'espace (ξ,Y)
D	:	diffusivité moléculaire des espèces chimiques
Da	:	nombre de Damkhöler
E_a	:	énergie d'activation
h	:	enthalpie massique
	:	coefficient pré-exponentiel
Ka	:	nombre de Karlovitz
Le	:	nombre de Lewis
l_T	:	échelle intégralle de turbulence
M_i	:	masse molaire des espèces i
M_m	:	masse molaire du mélange
P	:	PDF au sens de Reynolds
$\widetilde{P}$	:	PDF au sens de Favre

p	:	pression
R	:	constante des gaz parfait
R_Y	:	rapport des échelles de temps scalaire et turbulent $R_Y = \tau_{Y_f}/\tau_T$
R_ξ	:	rapport des échelles de temps scalaire et turbulent $R_\xi = \tau_\xi/\tau_T$
$R_{Y\xi}$	:	rapport des échelles de temps scalaire et turbulent $R_{Y\xi} = \tau_{Y\xi}/\tau_T$
Re_T	:	nombre de Reynolds turbulent $Re_T = u' l_T/\nu$
S_Y	:	ségrégation du scalaire Y
S_L	:	vitesse de propagation d'une flamme prémélangée laminaire plane
t	:	temps
T	:	température
T_a	:	température d'activation
T_0	:	température dans les conditions standards ($T_0 = 298$ K)
T^*	:	rapport de la température sur la masse molaire T^*=T / W
u_k	:	composantes de la vitesse
x, y, z	:	coordonnées cartésiennes de référence
Y	:	fraction massique des espèces chimiques

Lettres grecques

α, β, γ	:	paramètres de forme de PDF
δ_L	:	épaisseur d'une flamme prémélangée laminaire plane non étirée
δ_R	:	épaisseur de la zone réactive dans la flamme prémélangée laminaire plane
ϵ	:	taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente k
ϵ_Y	:	taux de dissipation de Y
ϵ_ξ	:	taux de dissipation de ξ
$\epsilon_{Y\xi}$	:	taux de dissipation
λ	:	conductivité thermique
ν	:	viscosité moléculaire
ξ	:	fraction de mélange
ρ	:	masse volumique du mélange
σ_T	:	nombre de Schmidt turbulent ($\sigma_T = 0.7$)
τ_T	:	échelle intégrale du temps turbulent $\tau_T = k/\epsilon$
τ_Y	:	échelle intégrale du temps scalaire $\tau_Y = \widetilde{Y''^2}/\widetilde{\epsilon}_Y$
τ_ξ	:	échelle intégrale du temps scalaire $\tau_\xi = \widetilde{\xi''^2}/\widetilde{\epsilon}_\xi$
$\tau_{Y\xi}$	:	échelle intégrale du temps scalaire $\tau_{Y\xi} = \widetilde{Y''\xi''}/\widetilde{\epsilon}_{Y\xi}$
τ_c	:	échelle du temps chimique
Φ	:	richesse du mélange
ω	:	taux de production chimique

Indices

$comb$	:	fait référence au combustible
L	:	fait référence à la flamme laminaire
ox	:	fait référence à l'oxydant
p	:	fait référence aux gaz brûlés
NR	:	contribution réactive (ou flammelette)
R	:	contribution non reactive (non flammelette)
r	:	fait référence aux gaz frais
rod	:	valeur au niveau du fil chaud
st	:	conditions stœchiométriques
T	:	fait référence à une échelle intégrale de turbulence

Exposants

$'$	:	fluctuations au sens de Reynolds
$''$	:	fluctuations au sens de Favre
max	:	valeur maximum
min	:	valeur minimum

Abréviations et acronymes

ADL	:	Anémometrie Doppler Laser
BML	:	Bray Moss Libby (modèle)
CFD	:	Computational Fluid Dynamics
DNS	:	Direct Numerical Simulation
EBU	:	Eddy Break Up (modèle)
GRI	:	Gas Research Institute
ICCD	:	Intensified Charge-Coupled Device
LES	:	Large Eddy Simulation
LW	:	Libby Williams (modèle)
LW-P	:	Libby Williams - Poitiers (modèle)
PDF	:	Probability Density Function
PIV	:	Particle Imaging Velocimetry
PLIF	:	Planar Laser Induced Fluorescence
RANS	:	Reynols Averaged Numerical Simulation
URANS	:	Unsteady Reynols Averaged Numerical Simulation

Autres

$\mid q \mid$	:	norme du vecteur q
$\overline{q}$	:	moyenne de Reynolds de la quantité q
$\widetilde{q}$	:	moyenne de Favre de la quantité q
$< \overrightarrow{n}.\overrightarrow{x_i} >$	:	cosinus de l'angle entre les vecteurs unitaires $\overrightarrow{n}$ et $\overrightarrow{x_i}$

Table des figures

1.1 Structure d'une flamme de diffusion laminaire 10
1.2 Structure du front de flamme de prémélange laminaire 12
1.3 Domaine d'existence des couples (ξ,Y) 17
1.4 Allure du spectre des fluctuations de vitesse en turbulence homogène isotrope 20
1.5 Les différents types de flammes turbulentes de prémélanges (diagramme de Borghi) 33
1.6 Formation de poches dans une flamme turbulente 34

2.1 Trois types d'analyses des flammes turbulentes prémélangées ou non prémélangées, d'après Veynante et Vervisch 42
2.2 Postions des pics de Dirac dans l'espace des compositions 54

3.1 Représentation d'une flamme turbulente 58

4.1 Domaine d'existence des couples (ξ,Y) 74
4.2 Répartition des pics de Dirac dans le domaine 76
4.3 Comportement de la PDF 81

7.1 Définition du vecteur unité normal à la flammelette 102
7.2 Validation du modèle pour le terme de corrélation scalaire-pression par comparaison avec la base de données DNS : (a)=$-\overline{Y''\partial p/\partial x}=H_i^Y$, (b) = $-\overline{Y''}\partial\overline{p}/\partial x$, (c)=$-\overline{Y''\partial p'/\partial x}$ 107
7.3 Validation du modèle pour le terme de corrélation vitesse-pression par comparaison avec la base de données DNS - C_3=0 : (a)=$-2\overline{u''\partial p/\partial x}=H_{ij}$, (b)=$-2\overline{u''}\partial\overline{p}/\partial x$, (c)=$-2\overline{u''\partial p'/\partial x}$ 108

7.4 Validation du modèle pour le terme de corrélation vitesse-pression par comparaison avec la base de données DNS - C_3=0,9 : (a)=$-2\overline{u''\partial p/\partial x}$=$H_{ij}$, (b)=$-2\overline{u''}\partial\overline{p}/\partial x$, (c)=$-2\overline{u''\partial p'/\partial x}$ 108

8.1 Représentation schématique et dimensions caractéristiques du banc ORACLES115

8.2 Dimensions caractéristiques au niveau de l'élargissement brusque 115

8.3 Maillage utilisé pour les simulations numériques 116

8.4 Visualisation directe des fronts de flammes pour un temps d'exposition de $1/50s$ (gauche) et $1/500s$ (droite) 117

8.5 Représentation schématique de la structure moyenne de l'écoulement . . . 118

8.6 Composantes du champ de vitesse moyenne ($\widetilde{u}$, $\widetilde{v}$) et énergie cinétique turbulente k à x/h_{step}=-5 119

8.7 Composantes du champ de vitesse moyenne ($\widetilde{u}$, $\widetilde{v}$) et énergie cinétique turbulente k à x/h_{step}=0 (courbes du haut), à x/h_{step}=$1,67$ (courbes du centre) et à x/h_{step}=$8,36$ (courbes du bas) 120

8.8 Ecoulement non-réactif : champ de vitesse moyenne (m/s) et ligne de courant120

8.9 Composantes du champ de vitesse moyenne ($\widetilde{u}$, $\widetilde{v}$) et énergie cinétique turbulente k pour $\Phi(1)$=$\Phi(2)$=$0,8$ à x/h_{step}=-5 (courbes du haut) et à x/h_{step}=0 (courbes du bas) 122

8.10 Composantes du champ de vitesse moyenne ($\widetilde{u}$, $\widetilde{v}$) et énergie cinétique turbulente k pour $\Phi(1)$=$\Phi(2)$=$0,8$ à x/h_{step}=$1,67$ (courbes du haut) et à x/h_{step}=$8,36$ (courbes du bas) 122

8.11 Température moyenne à x/h_{step}=$1,67$ et à x/h_{step}=$8,36$ 123

8.12 Taux de réaction moyen (s^{-1}) (relaxation linéaire : haut, fermeture généralisée : bas) et visualisation directe de la flamme (temps de pose 1/50s) . 124

8.13 Fraction massique de combustible moyenne (relaxation linéaire : haut, fermeture généralisée : bas) 125

8.14 Visualisation directe de la flamme (temps de pose 1/50s) avec $\Phi(2)$=0.9 et $\Phi(1)$=0.3 (gauche) et $\Phi(1)$=0.7 (droite) 126

8.15 Taux de réaction moyen (s^{-1}). Iso-ligne $\widetilde{\xi''^2}$=1.10^{-8} (ligne blanche). a_1 : $\Phi(1)$=0,3, $\Phi(2)$=0,9 et relaxations linéaires, a_2 : $\Phi(1)$=0,7, $\Phi(2)$=0,9 et relaxations linéaires, b_1 : $\Phi(1)$=0,3, $\Phi(2)$=0,9 et fermetures généralisées, b_2 : $\Phi(1)$=0,7, $\Phi(2)$=0,9 et fermetures généralisées. 127

8.16 Composantes de la vitesse moyenne ($\widetilde{u}$, $\widetilde{v}$) pour $\Phi(1)$=0,3 et $\Phi(2)$=0,9 à x/h_{step}=1,67 (courbes du haut) et à x/h_{step}=8,36 (2$^{\text{ndes}}$ courbes à partir du haut) et pour $\Phi(1)$=0,7 et $\Phi(2)$=0,9 à x/h_{step}=1,67 (3$^{\text{èmes}}$ courbes) et à x/h_{step}=8,36 (courbes du bas) 130

8.17 Paramètre G obtenu pour $\Phi(1)$=0,3 et $\Phi(2)$=0,9 (haut) et pour $\Phi(1)$=0,7 et $\Phi(2)$=0,9 (bas) 131

8.18 Exemple de pente d de la droite(D) dans l'espace des compositions 131

9.1 Schéma du dispositif expérimental 134

9.2 Richesse moyenne et variance associée obtenues pour un écoulement sans combustion avec la grille B (gauche) et la grille E (droite) à z=42.5 mm du fil chaud (mesure réalisée par PLIF sur acétone) 136

9.3 Dispositif optique utilisé pour les mesures simultanées de PLIF sur acétone et de diffusion Rayleigh 138

9.4 Maillage non structuré utilisé pour les simulations numériques 140

9.5 Décroissance de la turbulence pour les grilles B et E. La dissipation moyenne ϵ à l'entrée du domaine de calcul a été ajustée pour restituer les caractéristiques expérimentales de décroissance de la turbulence. 141

9.6 Richesse à z=42.5 mm (haut) et z=70 mm (bas), dans des conditions non réactives pour les cas SB08-0 (gauche), SB12-0 (centre), SE10-0 (droite). . 142

9.7 Variance de richesse à z=42.5 mm (haut) et z=70 mm (bas), dans des conditions non réactives pour les cas SB08-0 (gauche), SB12-0 (centre), SE10-0 (droite). 142

9.8 Coefficient pré-exponentiel K (gauche) et l'inverse du temps chimique ($1/\tau_c = K\exp(T_a/T_{ad})$) du mélange méthane-air adimensionné par la valeur à la stœchiométrie (droite) en fonction de la richesse 144

9.9 Taux de réaction chimique en fonction de la fraction massique de combustible ω / $\rho = f(Y)$ obtenus avec l'expression (4.1) pour la réaction globale et avec le schéma cinétique détaillé GRI-2.11, Φ=0,7 (gauche), Φ=1,0 (centre) et Φ=1,3 (droite). 144

9.10 ω / $\rho = f(Y)$ pour Φ=1 dans le cas d'une réaction globale en utilisant l'expression (4.1), dans le cas d'une réaction globale en utilisant l'expression (9.1) et dans le cas du schéma cinétique détaillé GRI-2.11, la figure de droite est un agrandissement de la figure de gauche pour de faibles valeurs de Y. 146

9.11 Vitesse moyenne longitudinale (gauche) et transversale (droite) en $m.s^{-1}$ à trois distances différentes du fil chaud z=20.4, 30.6 et 40.1 mm pour des conditions d'un mélange homogène, cas HE06. 148

9.12 Variance de la variable d'avancement à z=42.5 mm (gauche) et 70 mm (droite) pour des conditions d'un mélange homogène, cas HE06. 149

9.13 Variable d'avancement moyenne à z=42.5 mm (gauche) et 70 mm (droite) pour des conditions d'un mélange homogène, cas HE06. 149

9.14 Composante longitudinale de la vitesse moyenne (gauche) et composante transversale (droite) en $m.s^{-1}$ à trois différentes distances du fil chaud z=20.4, 30.6 et 40.1 mm pour des conditions d'un mélange stratifié, cas SE10-0. 150

9.15 Variable d'avancement moyenne (données binarisées) à z=42.5 mm (gauche) et 70 mm (droite) pour des conditions d'un mélange stratifié, cas SE10-0. 151

9.16 Variable d'avancement moyenne (données binarisées) à z=42.5 mm (gauche), 60 mm (centre) et 70 mm (droite) pour des conditions d'un mélange stratifié, cas SB08-0. 152

9.17 Variable d'avancement moyenne (données binarisées) à z=42.5 mm (gauche), 60 mm (centre) et 70 mm (droite) pour des conditions d'un mélange stratifié, cas SB12-0. 152

9.18 Champ de la variable d'avancement moyenne $\overline{c}$ pour des conditions d'un mélange stratifié SB08-0 et SB12-0. La ligne stœchiométrique $\widetilde{\xi}$=ξ_{st} est visualisée. 155

9.19 Champ de variance de la variable d'avancement $\overline{c''^2}$ pour des conditions d'un mélange stratifié SB08-0 et SB12-0. La ligne stœchiométrique $\widetilde{\xi}$=ξ_{st} est visualisée. 155

9.20 Champ de fraction de mélange moyenne $\widetilde{\xi}$ pour des conditions d'un mélange stratifié SB08-0 et SB12-0. 156

9.21 Champ de fraction massique de combustible moyenne $\widetilde{Y}$ pour des conditions d'un mélange stratifié SB08-0 et SB12-0. La ligne stœchiométrique $\widetilde{\xi}$=ξ_{st} est visualisée. 156

9.22 Taux de réaction chimique moyen $\overline{\omega}$ / $\overline{\rho}$ (s^{-1}) pour des conditions d'un mélange stratifiés SB08-0 et SB12-0. La ligne stœchiométrique $\widetilde{\xi}$=ξ_{st} est visualisée. 157

9.23 Champ de covariance $\widetilde{\xi''Y''}$ pour des conditions d'un mélange stratifié SB08-0 et SB12-0. La ligne stœchiométrique $\widetilde{\xi}$=ξ_{st} est visualisée. 157

9.24 Coefficient directeur d de la droite (D) dans le cas SB12-0 (gauche), la ligne stœchiométrique $\widetilde{\xi}$=ξ_{st} (ligne blanche) et les deux iso-lignes ξ_1=ξ_{st} et ξ_2=ξ_{st} (lignes noires) sont également tracées. Exemples de positions de la droite (D) dans les gaz brûlés (droite). 158

10.1 Taux de réaction moyen (s^{-1}) pour $\Phi(1)$=$\Phi(2)$=$0,8$ (LW-P premier ordre et $R_{ij}-\epsilon$ LRR) et visualisation directe de la flamme (temps de pose 1/50s) 163

10.2 Vitesse moyenne longitudinale $\widetilde{u}$ et énergie cinétique turbulente k pour $\Phi(1)$=$\Phi(2)$=$0,8$ à $x/h_{step} = 7,32$ (courbes du haut), à $x/h_{step} = 8,36$ (courbes du milieu) et à $x/h_{step} = 9,70$ (courbes du bas), simulation utilisant le modèle LW-P premier ordre associé au modèle classique $R_{ij}-\epsilon$ LRR. 164

10.3 Energie cinétique turbulente $\widetilde{k}$ ($m^2.s^{-2}$) obtenue pour $\Phi(1)$=$\Phi(2)$=$0,8$ en utilisant le modèle LW-P du premier ordre associé au modèle classique $R_{ij}-\epsilon$ LRR (en haut) et le modèle LW-P du second ordre complet (en bas). 165

10.4 Vitesse moyenne $\widetilde{u}$ et énergie cinétique turbulente k pour $\Phi(1)$=$\Phi(2)$=$0,8$ à $x/h_{step} = 7,32$ (courbes du haut), à $x/h_{step} = 8,36$ (courbes du milieu) et à $x/h_{step} = 9,70$ (courbes du bas), obtenues en utilisant le modèle LW-P du premier ordre associé au modèle classique $R_{ij} - \epsilon$ LRR et le modèle LW-P du second ordre complet. 166

10.5 Composante longitudinale des flux turbulents $\widetilde{u''Y''}$ (2 figures du haut) et composante transversale des flux turbulents $\widetilde{v''Y''}$ (2 figures du bas), en $m.s^{-1}$ obtenues pour $\Phi(1)$=$\Phi(2)$=$0,8$ en utilisant le modèle LW-P du second ordre complet, $(a_1) : D_T\partial\widetilde{Y}/\partial x$, $(b_1) : \widetilde{u''Y''}$, $(a_2) : D_T\partial\widetilde{Y}/\partial y$, $(b_2) : \widetilde{v''Y''}$ 168

10.6 Terme source moyen obtenu pour $\Phi(1)$=$0,9$ et $\Phi(2)$=$0,3$ (gauche) et pour $\Phi(1)$=$0,9$ et $\Phi(2)$=$0,7$ (droite) en utilisant le modèle LW-P du second ordre complet. 169

10.7 Composante transversale des flux turbulents : $D_T\partial\widetilde{Y}/\partial y$ (haut) et $\widetilde{v''Y''}$ (bas), en $m.s^{-1}$ obtenue pour $\Phi(1)$=0.9 et $\Phi(2)$=0.3 (gauche) et pour $\Phi(1)$=0.9 et $\Phi(2)$=0.7 (droite) en utilisant le modèle LW-P du second ordre complet. 169

A.1 Espace des compositions 189

Liste des tableaux

1.1 Constantes du modèle $k-\epsilon$ 28
1.2 Constantes du modèle $R_{ij}-\epsilon$ 31
1.3 Equations à résoudre et termes à modéliser 40

7.1 Caractéristiques des bases de données DNS 105

9.1 Conditions de stratifications en richesse (fraction de mélange) au centre du tube et à la périphérie. Φ_{rod} et Φ_{mini} sont respectivement les valeurs de la richesse au niveau du fil chaud et à la périphérie du tube. 136
9.2 Conditions d'écoulement moyennes dans la zone d'étude (z=0 mm à 110 mm). $\overline{u}$ est la vitesse moyenne et $\sqrt{\overline{u'^2}}$ l'écart type correspondant. 137

Introduction

La combustion est encore aujourd'hui l'un des principaux moyens de production d'énergie, que ce soit pour les transports aériens, spatiaux, routiers ou pour la production d'électricité. La plus grande partie de cette énergie est issue de combustibles fossiles dont les ressources sont limitées. Par ailleurs, la combustion de ces hydrocarbures entraîne la production d'espèces polluantes pour l'environnement, à l'échelle locale mais aussi planétaire (destruction de la couche d'ozone par les oxydes d'azote et réchauffement global par le dioxyde de carbone). Dans ce cadre général les industriels du secteur de l'énergie et des transports cherchent à perfectionner les procédés de combustion dans le but d'une part de réduire leur consommation en combustible et d'autre part de limiter leur production d'espèces polluantes. Ces objectifs, qui représentent des enjeux majeurs pour l'énergétique, nécessitent des recherches sur les aspects fondamentaux et technologiques.

Ces recherches consistent en particulier à étudier les couplages entre les différents phénomènes physiques intervenant dans les chambres de combustion, sachant que dans les moteurs ou les installations industrielles, comme les turbines à gaz ou les turboréacteurs, la combustion est fortement affectée par le caractère turbulent des écoulements. Cette interaction entre combustion et turbulence est étudiée depuis le début du siècle dernier et donne lieu aujourd'hui à de nombreux sujets de recherche sur les trois aspects expérimental, théorique et numérique. Depuis quelques décennies, par le développement des modèles et des techniques de calcul et de la puissance des ordinateurs, les études numériques de la combustion turbulente prennent une place de plus en plus importante. En particulier, de telles études ont conduit la plupart des grands groupes industriels et les organismes de recherche à développer des logiciels permettant la simulation numérique de ces écoulements dans des configurations plus ou moins complexes tant du point de vue

de la géométrie des systèmes envisagés que des processus pris en compte. La simulation numérique de configurations industrielles telles que la combustion dans les turbines à gaz, ne peut se faire aujourd'hui encore qu'en modélisant une partie des phénomènes physiques mis en jeu. Ces travaux de modélisation sont nécessaires du fait de la grande disparité des échelles des différents phénomènes physiques en regard de celles qui caractérisent les configurations considérées. La simulation directe de l'ensemble de ces phénomènes, c'est-à-dire sans modéliser une partie d'entre eux, pour une géométrie de chambre de combustion réelle demanderait un temps de calcul et une quantité de mémoire prohibitifs pour les calculateurs d'aujourd'hui. Les modèles qu'il faut développer pour permettre le calcul des quantités moyennes ou filtrées, doivent néanmoins tenir compte des différents mécanismes physiques qui peuvent se produire aux petites échelles dans ces chambres de combustion et notamment du mécanisme de mélange des gaz en présence. En particulier, les mélanges réactifs combustible-air au sein des chambres de combustion sont rarement homogènes : la richesse des mélanges y est variable en temps et en espace et la combustion conduit à la propagation de flammes dans des prémélanges partiels et non parfaits.

Dans ce contexte les laboratoires de recherche du groupe EDF, un des leaders européens de l'énergie, et du CNRS, collaborent sur ce sujet depuis plusieurs années. En particulier, le travail présenté dans ce mémoire a été effectué dans le cadre d'une collaboration entre le département MFEE à Chatou (Mécanique des Fluides, Energie, Environnement) du groupe EDF et le LCD à Poitiers (Laboratoire de Combustion et Détonique) du CNRS. Cette thèse s'inscrit dans la continuité des travaux de thèse précédents de Bailly [2], Lahjaily [43] et Bigot [8] effectués au LCD dans le cadre d'une collaboration avec le LNH (Laboratoire National d'Hydraulique) du groupe EDF. Les modèles pour la simulation numérique d'écoulements turbulents réactifs partiellement prémélangés développés au cours de cette thèse ont été implantés dans le logiciel généraliste de mécanique des fluides numérique *Code-Saturne* développé par EDF [1]. Les principaux objectifs des travaux présentés dans ce mémoire étaient les suivants :

– Développer un modèle de combustion turbulente capable de traiter aussi bien les écoulements parfaitement que partiellement prémélangés. Ce modèle utilise d'une part une fraction de mélange et d'autre part une variable d'avancement des réactions

chimiques que nous caractérisons dans ce mémoire par la fraction massique de combustible. Nous proposons ici de nouvelles fermetures pour les différents termes qui représentent le mélange aux petites échelles, c'est-à-dire les termes de dissipation des fluctuations des deux quantités scalaires. De plus, une description réaliste des temps caractéristiques chimiques permet de prendre en compte les effets dus aux fortes fluctuations de richesse.

– Adapter ce modèle pour prendre en compte les effets de production de turbulence par les flammes et de transport turbulent non gradient. Pour cela, nous proposons de nouveaux modèles pour fermer les équations pour les tensions de Reynolds et les flux turbulents de masse associés à la variable d'avancement décrivant le processus chimique.

La première partie de ce mémoire est consacrée à l'introduction des bases théoriques et des différentes approches phénoménologiques des mécanismes physiques mis en jeu dans la combustion turbulente d'un prémélange partiel. Comme la combustion est le résultat des interactions entre transport des espèces, transport de la chaleur et réactions chimiques, son étude repose sur des domaines de la physique aussi variés que la mécanique des fluides, la thermodynamique et la cinétique chimique. Par ailleurs, nous avons choisi de prendre en compte le caractère turbulent des écoulements qui nous intéressent en utilisant une approche statistique. Dans ce sens, ce chapitre contient une présentation des modèles maintenant classiques EBU [87] et BML [57]. Nous introduisons aussi le modèle LW-P [52, 75] qui a servi de base à la présente étude. Associés à des modèles de transport turbulent classique, c'est-à-dire reposant sur l'hypothèse de viscosité turbulente, ces modèles du premier ordre ne tiennent compte que des effets de la turbulence sur la flamme mais ne sont pas construits pour représenter les effets inverses de la flamme sur la turbulence ou les effets de transport de masse et d'énergie non-gradient induits par la présence de flammes. Des modèles du second ordre tels que ceux déjà proposés par Bailly et al. [3] et Bigot et al. [9], sont alors nécessaires pour prendre en compte ces effets qui peuvent avoir beaucoup d'importance dans certains écoulements réactifs. Les équations de transport introduites par ces modèles nécessitent des fermetures tenant compte de la présence de flammes dans l'écoulement, comme celles proposées par Domingo et Bray [30]

par exemple.

Dans la seconde partie de ce mémoire le modèle LW-P est décrit précisément et étendu au second ordre. Pour cela les différents termes des équations de transport résolues sont fermés en utilisant une fonction densité de probabilité faite de n distributions de Dirac. Nous décrivons en particulier la méthode de fermeture des termes de dissipation apparaissant dans les équations de transport pour les seconds moments des quantités scalaires, fraction de mélange et variable d'avancement. Ces termes sont très importants car leur évolution est intimement liée à celle du taux de réaction chimique. Les fermetures pour les termes responsables des phénomènes de production de turbulence par la flamme et de transport turbulent à contre-gradient sont également détaillées puis sont testées en utilisant les résultats d'une simulation numérique directe (DNS) 3-D d'une flamme plane turbulente.

La troisième et dernière partie de ce mémoire présente les simulations numériques effectuées en utilisant le modèle LW-P décrit dans la partie précédente et implanté dans *Code-Saturne*. Les résultats des simulations numériques sont comparés aux mesures obtenues sur deux dispositifs expérimentaux différents. Tout d'abord, le modèle LW-P du premier ordre est validé en utilisant la configuration ORACLES qui permet d'étudier un écoulement turbulent réactif partiellement prémélangé stabilisé en aval de l'élargissement brusque symétrique d'un canal 2D qui a déjà donné lieu aux travaux de thèse expérimentaux de Besson [6] et Nguyen [65], au LCD à Poitiers. Dans un deuxième temps le modèle LW-P est testé pour calculer un écoulement où les fluctuations de richesse sont bien plus importantes que celles obtenues dans l'écoulement de la configuration ORACLES. Pour cela nous avons choisi le dispositif expérimental étudié en particulier par O. Degardin au CORIA de Rouen [26] qui permet d'obtenir une flamme en V stabilisée au sein d'un écoulement turbulent de méthane et d'air à richesse stratifiée. Enfin, le modèle LW-P du second ordre est utilisé pour simuler les écoulements de la configuration ORACLES ce qui permet de vérifier sa capacité à prendre en compte la production de turbulence par la flamme et le transport turbulent non-gradient.

Première partie

Combustion Turbulente : Analyse et Modélisation

Chapitre 1

Phénomènes Physiques et Formulations Mathématiques

L'interaction entre un processus chimique de combustion et la "turbulence" joue un rôle très important dans la plupart des systèmes de combustion, pour la propulsion ou la production d'énergie, comme par exemple les chambres de combustion des turboréacteurs ou des turbines à gaz. L'étude de ces écoulements turbulents de gaz réactifs a conduit à l'introduction de différentes grandeurs caractéristiques de ces phénomènes physiques. Ces quantités sont issues de la mécanique des fluides, de la thermodynamique et de la chimie. L'objectif de ce premier chapitre est de rappeler les phénomènes physiques mis en jeu et les équations décrivant l'évolution des grandeurs caractéristiques. La résolution de ces équations qui représentent les différents phénomènes physiques et mécaniques et leurs interactions, doit permettre de prédire la structure et l'évolution des écoulements turbulents réactifs. Compte tenu de la complexité de ces équations et des outils mathématiques dont nous disposons, la résolution analytique de ces équations est limitée à des cas très simples et dans la plupart des cas, des méthodes numériques de résolution approchée sont nécessaires. Cependant, la résolution directe, sans hypothèse simplificatrice, des équations nécessite une puissance de calcul très importante car les phénomènes physiques étudiés font intervenir un nombre important de variables et un large spectre d'échelles caractéristiques, allant des échelles de la géométrie de la chambre de combustion jusqu'à celles associées aux effets de la cinétique chimique. La puissance de calcul des machines ac-

tuelles n'est toujours pas suffisante pour simuler de façon directe des configurations réelles. Une solution à ce problème consiste à filtrer une partie de la dynamique des phénomènes physiques mis en jeu. Les grandeurs caractéristiques que nous sommes en mesure de calculer sont alors des quantités filtrées ou moyennées et l'écriture des équations décrivant leur évolution fait apparaître des termes inconnus qui doivent être modélisés.

1.1 Combustion et Flammes

1.1.1 Notion de Cinétique Chimique

Un processus chimique de combustion est en fait une succession de coupures et de créations de liaisons entre les molécules. Chaque coupure et/ou création de liaison est une réaction élémentaire, l'ensemble des réactions élémentaires constitue le mécanisme cinétique du processus réactionnel. L'état final du processus réactionnel correspond à l'équilibre chimique, la composition du mélange est alors définie par les lois de la thermodynamique. Suivant les conditions de température et de pression de l'état final, des espèces chimiques apparaissent ou disparaissent. Certaines espèces produites, même en très faible proportion, ont une grande importance : c'est le cas de certaines espèces polluantes (oxyde d'azote, monoxyde de carbone ...).

Les étapes élémentaires sont caractérisées par leur taux de réaction Ω_i qui permet de calculer l'effet de la réaction sur chaque espèce. Ω_i traduit la variation de l'espèce i au cours du temps. Le taux de réaction élémentaire est égal au produit d'une constante de vitesse par les concentrations des espèces réactives, élevées chacune à une puissance qui correspond à leur coefficient stœchiométrique. La constante de vitesse dépend de la température et est le plus souvent exprimée par une loi d'Arrhénius :

$$r = BT^{\alpha} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) = BT^{\alpha} \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \tag{1.1}$$

où r est la constante de vitesse, B le coefficient pré-exponentiel, R la constante des gaz parfaits, E_a l'énergie d'activation et $T_a = E_a/R$ la température d'activation. L'énergie d'activation représente la quantité d'énergie à apporter au système considéré pour que les espèces puissent réagir de façon significative.

Dans les systèmes gazeux réactifs qui nous intéressent, le processus réactionnel est composé de réactions élémentaires en chaîne : une première réaction produit des espèces qui vont amorcer la chaîne en réagissant de nouveau avec les réactifs initiaux et en déclenchant de nouvelles réactions élémentaires. Les réactifs initiaux vont être très vite consommés dès qu'une toute petite quantité du produit de la première réaction élémentaire apparaît. Le processus réactionnel d'une combustion peut faire intervenir des centaines d'espèces et des milliers de réactions élémentaires, pour lesquelles il faut connaître les constantes des lois cinétiques dont les valeurs sont déterminées expérimentalement. Des logiciels comme Chemkin [38] utilisent des tabulations très détaillées de ces constantes.

Les milliers de réactions élémentaires qui interviennent dans le processus réactionnel n'agissent pas toutes à la même vitesse, certaines ont des taux beaucoup plus forts que d'autres. Cette disparité de temps caractéristiques permet de bâtir des schémas réactionnels simplifiés. Ces schémas réduits permettent de diminuer le temps de calcul et sont tout à fait pertinents lorsqu'on ne s'intéresse qu'à un petit nombre d'espèces. La façon la plus simple d'écrire un processus réactionnel est d'exprimer le passage d'un état initial à un état final sous la forme d'une réaction globale. Soit, par exemple, pour la combustion d'un hydrocarbure dans l'air à la stœchiométrie :

$$C_nH_m + \left(n + \frac{m}{4}\right)(O_2 + 3.76N_2) \longrightarrow nCO_2 + \frac{m}{2}H_2O + 3.76\left(n + \frac{m}{4}\right)N_2 \qquad (1.2)$$

Le taux de disparition du carburant peut s'exprimer en utilisant une loi d'Arrhénius (empirique), pour la réaction globale, soit :

$$\Omega_Y = Y_{C_nH_m}^a Y_{O_2}^b B T^c \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \qquad (1.3)$$

$Y_{C_nH_m}$ est la fraction massique de l'hydrocarbure, Y_{O_2} la fraction massique d'oxygène, Ω_Y le taux de disparition exprimé en kilogramme d'hydrocarbure par kilogramme de mélange et par seconde. L'utilisation d'une réaction globale ne permet évidement pas de représenter les processus de cinétique chimique réels, formés de réactions bi et trimoléculaires et faisant intervenir de nombreuses espèces intermédiaires.

Dans le cas des flammes, le processus réactionnel de la combustion est globalement exothermique, c'est pour cette raison qu'il peut engendrer une flamme.

1.1.2 Les Différents Types de Flammes

Comme on s'intéresse ici à une réaction chimique se déroulant dans un milieu gazeux, on ne peut pas dissocier ce phénomène de la mécanique des fluides. En effet, la réaction globale, Eq.(1.2), montre que pour qu'il y ait une réaction, il faut d'abord que les espèces réactives (combustible et oxydant) soient en contact et que l'énergie nécessaire à l'activation de la réaction soit apportée. La flamme (zone de réaction) est donc le résultat du transport des espèces, du transport de la chaleur et de la réaction chimique. Dans un écoulement laminaire, compte tenu des différents mécanismes qui permettent l'existence d'un écoulement réactif, il est usuel de distinguer deux types différents de flammes :

- les flammes laminaires de diffusion où le combustible et l'oxydant sont introduits séparément avant l'inflammation ;
- les flammes laminaires de prémélange où le combustible et l'oxydant sont mélangés avant l'inflammation.

Flammes Laminaires de Diffusion

Dans ce type de flammes, les réactions chimiques sont très rapides comparées aux phénomènes de convection et la combustion est contrôlée par la diffusion des espèces et de la chaleur. Les réactifs et la chaleur diffusent les uns vers les autres - c'est ce qui va prendre le plus de temps - avant de pouvoir réagir.

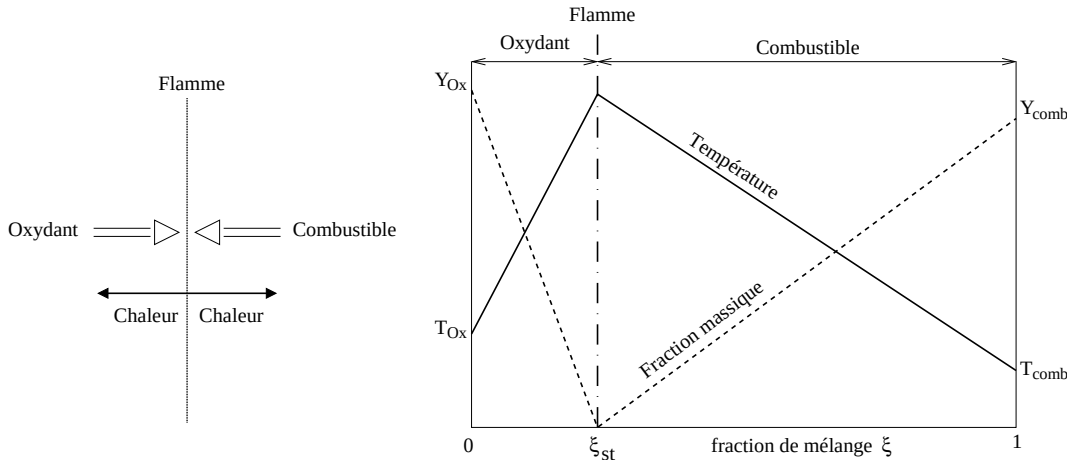


FIG. 1.1 – Structure d'une flamme de diffusion laminaire

Si on considère une seule réaction globale Eq.(1.2) et le cas limite d'un temps chimique infiniment court devant le temps de mélange des espèces, la flamme doit être considérée comme une surface infiniment fine dans l'écoulement. Cette interface sépare le carburant du comburant qui ne peuvent pas coexister. En utilisant ces approximations, introduites par Burke et Schumann [22], on peut définir une variable unique qui permet de caractériser l'état thermochimique du mélange : la fraction de mélange ξ. Cette quantité est un scalaire passif défini de telle façon que sa valeur est nulle dans le comburant pur et égale à l'unité dans le carburant pur. La flamme se positionne alors sur l'iso-surface $\xi = \xi_{st}$, où ξ_{st} est la fraction de mélange correspondant à la stœchiométrie. La structure d'une flamme de diffusion est schématisée sur la figure 1.1. La fraction massique d'oxydant est maximale dans l'oxydant pur et diminue car l'oxydant se mélange aux produits de combustion. Il n'y a plus d'oxydant au niveau de la flamme car la réaction chimique l'a intégralement consommé. L'évolution est la même pour le combustible. La température de flamme T_f est celle des produits de combustion à l'état d'équilibre.

Flammes Laminaires de Prémélange

Lorsqu'on allume un mélange gazeux où le combustible et l'oxydant sont initialement mélangés, un front de flamme, séparant les gaz frais des gaz brûlés, se propage dans tout l'espace à une certaine vitesse. Si les gaz réactifs sont initialement placés dans un tube et qu'on allume le mélange à une extrémité du tube, un certain temps après l'inflammation, une flamme plane se propage à vitesse constante perpendiculairement à l'axe du tube. En réalité, la flamme ne peut pas être exactement plane compte tenu de la présence des parois. De fait, la flamme a une épaisseur finie δ_L et sa vitesse S_L est une caractéristique intrinsèque du mélange et des conditions de pression et de température. La propagation de la flamme est le résultat de l'action de deux phénomènes : tout d'abord les gaz brûlés échauffent par conduction thermique les gaz frais, puis lorsque la température de ces gaz frais est suffisamment élevée ils réagissent en dégageant à leur tour de la chaleur ; cette chaleur va servir à chauffer les gaz frais plus en aval et ainsi de suite. Si l'on considère que les espèces et la température diffusent de la même manière et que les processus sont adiabatiques, la flamme peut être représentée par l'évolution d'une seule variable. Cette

variable représente à la fois l'avancement de la réaction chimique et la température ; on choisit en général une variable d'avancement notée c qui est nulle dans les gaz frais et égale à l'unité dans les gaz brûlés, assimilable à la fraction massique des gaz brûlés ou à la température réduite. Dans le cas simple d'une seule réaction globale, Eq.(1.2), on peut directement utiliser la fraction massique de combustible pour caractériser intégralement la composition du mélange.

La structure de la flamme plane laminaire de prémélange dans un repère lié à la flamme est donnée par la figure 1.2.

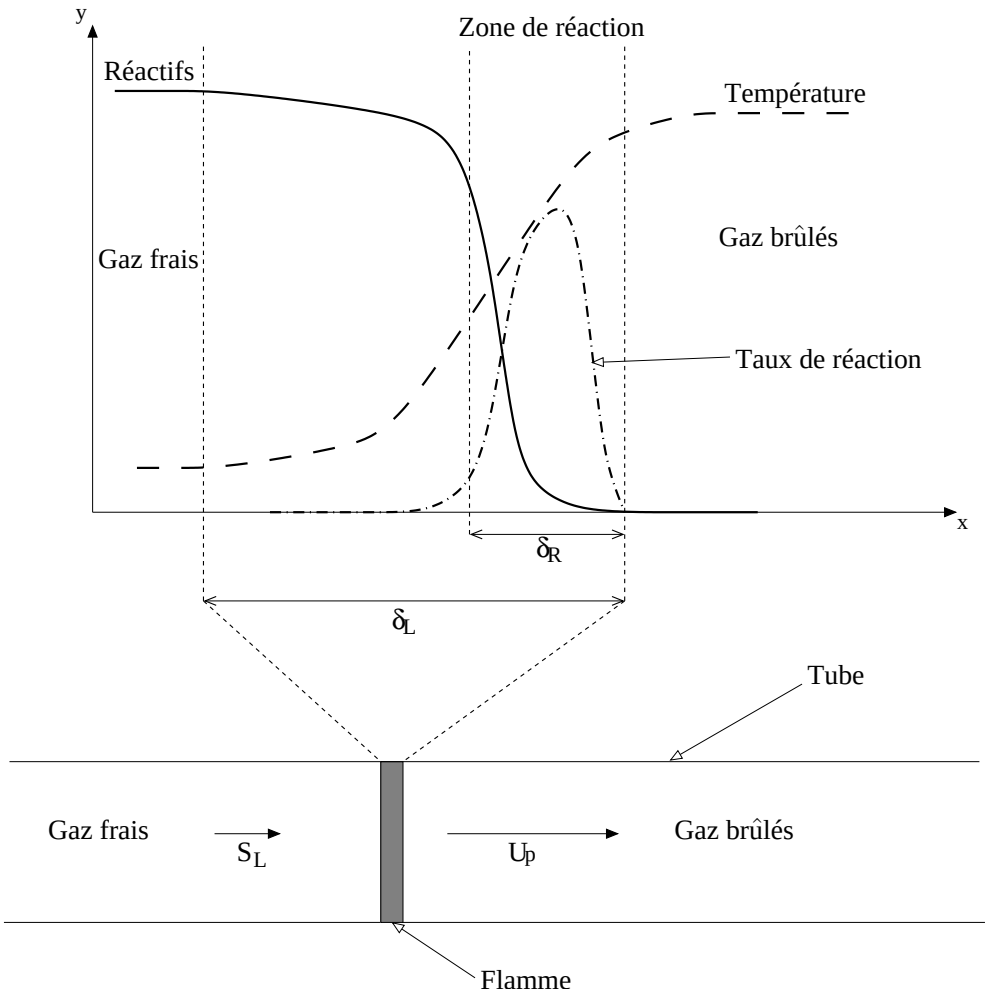


FIG. 1.2 – Structure du front de flamme de prémélange laminaire

Dans l'épaisseur de la flamme δ_L, la température des gaz frais augmente par conduction de la chaleur et la concentration des réactifs diminue par diffusion moléculaire des

gaz brûlés ; les réactions chimiques se produisent uniquement dans une seconde zone d'épaisseur δ_R encore plus fine que la première. On peut démontrer théoriquement cette structure de flamme laminaire de prémélange lorsque les énergies d'activation sont importantes (théorie asymptotique à grande énergie d'activation). Dans ce cas le taux de consommation du combustible exprimé par la loi d'Arrhénius devient négligeable partout (car le facteur exponentiel tend vers zéro) sauf dans une zone de très faible épaisseur δ_R où se concentrent les réactions chimiques. Le rapport entre l'épaisseur de cette zone réactive et l'épaisseur de flamme δ_L est inversement proportionnelle à l'énergie d'activation.

Le dégagement de chaleur engendré par les réactions chimiques a une conséquence autre que celle de la propagation de la flamme. En effet, dans le cas d'un écoulement à petit nombre de Mach dans lequel on peut considérer la pression comme thermodynamiquement constante, l'augmentation de la température s'accompagne d'une diminution de la masse volumique des gaz suivant : $\rho T \approx cte$. La conservation de la masse à la traversée de la flamme conduit ainsi à une accélération des gaz brûlés ($U_p > S_L$) par rapport aux gaz frais :

$$\rho_r S_L = \rho_p U_p \tag{1.4}$$

ρ_r et ρ_p sont respectivement les masses volumiques dans les gaz frais et dans les gaz brûlés. S_L est la vitesse des gaz frais par rapport à la flamme (ou de la flamme par rapport aux gaz frais), U_p est la vitesse des gaz brûlés par rapport à la flamme.

Pour résumer, une flamme de diffusion sépare le combustible de l'oxydant alors qu'une flamme de prémélange sépare les gaz frais des gaz brûlés. Ces deux types de flammes ne sont que des cas limites, des flammes correspondant à un type intermédiaire sont possibles. Il existe, par exemple, des structures de flammes qui peuvent à la fois présenter une structure de prémélange et de diffusion, on parle alors de flammes triples ; elles jouent un rôle important dans le processus de stabilisation des flammes non prémélangées [93].

1.1.3 Equations Usuelles

Dans les problèmes de combustion qui nous intéressent, les effets Dufour, Soret, la baro-diffusion et les forces de volume peuvent être négligés. Les équations issues de la

mécanique des fluides (équations de Navier-Stokes) exprimant la conservation de la masse totale et de la quantité de mouvement s'écrivent de la façon suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} = 0 \tag{1.5}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho u_i\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k u_i\right) = \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k} - \frac{\partial p}{\partial x_i} \tag{1.6}$$

où τ_{ik} est le tenseur des contraintes visqueuses :

$$\tau_{ik} = \rho\nu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\rho\nu\frac{\partial u_l}{\partial x_l}\delta_{ik} \tag{1.7}$$

u_i sont les trois composantes cartésiennes du champ de vitesse ($i = 1, 3$), ρ la masse volumique du mélange et p la pression.

Le bilan des espèces intervenant dans la réaction chimique s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho Y_i\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k Y_i\right) = -\frac{\partial}{\partial x_k}\left(F_i^k\right) + \omega_i \tag{1.8}$$

où $\omega_i = \rho\Omega_i$ est le taux de réaction chimique, Y_i est la fraction massique et F_i^k les flux de diffusion de l'espèce i dans l'espèce majoritaire (l'azote dans notre cas). Les flux de diffusion ont été représentés avec la loi de Fick soit : $F_i^k = -\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_k}$, où D_i est le coefficient de diffusion binaire de l'espèce i. Le bilan des espèces s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho Y_i\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k Y_i\right) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_k}\right) + \omega_i \tag{1.9}$$

Le bilan d'énergie conduit à l'équation pour l'enthalpie massique h :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho h\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k h\right) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x_k}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\sum_i \rho D_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_k}\right) + \frac{\partial p}{\partial t} + u_k\frac{\partial p}{\partial x_k} - \tau_{ik}\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \tag{1.10}$$

λ est la conductivité thermique du gaz, T la température et h_i l'enthalpie massique de l'espèce i.

Les gaz que nous étudions sont considérés comme des mélanges parfaits de gaz parfaits, les lois d'état sont donc :

$$p = \rho\frac{R}{M_m}T \tag{1.11}$$

R est la constante des gaz parfaits et M_m la masse molaire du mélange :

$$\frac{1}{M_m} = \sum_i \frac{Y_i}{M_i} \tag{1.12}$$

L'enthalpie massique du mélange s'écrit :

$$h = \sum_i h_i(T) Y_i \qquad \text{avec} \qquad h_i = \int_{T_0}^{T} C_{p,i} dT + Q^0_{p,i} \tag{1.13}$$

$C_{p,i}$ est la capacité calorifique de l'espèce i à pression constante et $Q^0_{p,i}$ la chaleur de formation de l'espèce i à pression constante et à la température de référence T_0. L'enthalpie massique s'écrit finalement :

$$h = \int_{T_0}^{T} C_{p,m} dT + \sum_i Q^0_{p,i} Y_i \tag{1.14}$$

où $C_{p,m}$ est la capacité calorifique du mélange par unité de masse :

$$C_{p,m} = \sum_i Y_i C_{p,i} \tag{1.15}$$

La résolution de ces équations permet de connaître en tout point et à tout instant la composition, la température et la pression du mélange de gaz réactif quel que soit le type de flamme. Cependant, le grand nombre d'espèces mises en jeu par la combustion ne permet pas la résolution de ces équations sur des configurations pratiques dans un temps raisonnable. Un certain nombre d'hypothèses simplificatrices vont nous permettre de diminuer considérablement le nombre d'équations à résoudre.

1.1.4 Approximation de Schvab-Zeldovitch

Dans le cas des flammes laminaires, le nombre de Mach caractéristique de l'écoulement réactif est suffisamment petit pour que les termes liés à l'énergie cinétique et à la dissipation visqueuse soient négligés dans l'équation pour l'énergie. La pression est donc thermodynamiquement constante et la loi d'état de l'équation (1.11) se simplifie pour s'écrire finalement de la façon suivante :

$$\rho T^* = cte \qquad \text{avec} \qquad T^* = \frac{T}{M_m} \tag{1.16}$$

On suppose ensuite que la combustion est représentée par une réaction globale entre un hydrocarbure et l'air, Eq.(1.2) et que le mélange est composé au maximum de cinq

espèces : C_nH_m, O_2, N_2, CO_2 et H_2O. De plus, on considère que les nombres de Lewis des espèces sont tous égaux à un :

$$Le_i = \frac{\lambda}{\rho C_{p,i} D_i} = 1 \qquad \forall\ i \tag{1.17}$$

Hypothèses qui conduisent à une équation simplifiée pour l'enthalpie :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k h) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x_k}\right) \tag{1.18}$$

où $\partial p/\partial t$ a été négligé.

Cette équation est identique à l'équation de transport d'une espèce i non réactive ($\omega_i = 0$, $D_i = D$), l'azote dans notre cas. Si les parois des systèmes étudiés sont considérés adiabatiques et imperméables aux espèces, alors on peut définir la fraction de mélange, notée ξ, dont l'équation représente à la fois l'évolution de l'enthalpie h et de la fraction massique d'azote Y_{N_2} (ou de n'importe quelle espèce non réactive) :

$$\xi = \frac{Y_{N_2} - Y_{N_2}(1)}{Y_{N_2}(2) - Y_{N_2}(1)} = \frac{h - h(1)}{h(2) - h(1)} \tag{1.19}$$

Les indices (1) et (2) caractérisent respectivement ici l'oxydant et le combustible. Le choix de ces conditions pour les indices (1) et (2) implique que $\xi = 0$ dans l'oxydant pur et $\xi = 1$ dans le combustible pur.

Compte tenu de cette définition, la fraction de mélange ξ est égale à la fraction massique de combustible $Y_{C_nH_m}$ lorsque le mélange n'a pas encore réagi, c'est-à-dire dans les gaz frais. Nous pouvons donc déterminer, à partir de la fraction massique de combustible, notée aussi Y pour simplifier les notations (pour la même raison $\omega_Y{=}\omega$), la quantité de combustible qui a réagi : $\xi - Y$. La réaction globale (1.2) permet finalement de déterminer les fractions massiques de toutes les espèces. La composition, la température et la masse volumique du mélange gazeux sont donc entièrement déterminées à partir de la fraction de mélange ξ et de la fraction massique de combustible Y. Les équations d'évolution de ces variables s'écrivent alors :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \xi) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k \xi) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k}\right) \tag{1.20}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k Y) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_k}\right) + \omega \tag{1.21}$$

Ces deux variables permettent de représenter aussi bien des flammes de diffusion ($0 < \xi < 1$) que de prémélange ($\xi = cte$) et donc toutes les flammes correspondant à un régime intermédiaire : les flammes partiellement prémélangées. Les couples (ξ,Y) qui caractérisent l'état thermochimique local du mélange sont définis dans un domaine limité par trois droites, voir Figure 1.3. La droite de mélange représente les états frais, le combustible et

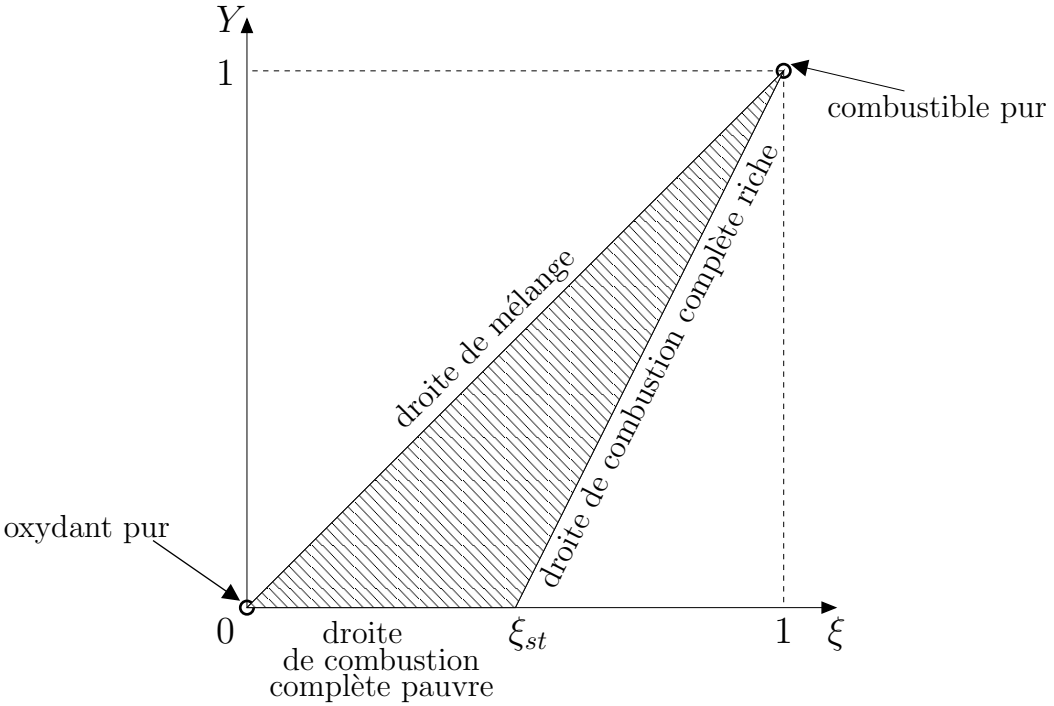


FIG. 1.3 – Domaine d'existence des couples (ξ,Y)

l'oxydant se mélangent sans brûler. Les droites de combustion complète représentent les états entièrement brûlés. Les points situés à l'intérieur du domaine représentent des gaz en train de brûler.

Finalement, les équations que nous proposons de résoudre sont celles issues de la mécanique des fluides (1.5)-(1.6) et celles décrivant l'évolution de ξ et Y (1.20)-(1.21). La résolution de ces équations passe forcément par l'utilisation d'une méthode numérique puisque les outils mathématiques actuels ne permettent pas la résolution analytique de ces équations. La méthode numérique utilisée qui consiste à discrétiser les équations dans l'espace et le temps, fournit une solution plus ou moins précise en fonction de l'ordre du schéma numérique et de la qualité de la discrétisation. La discrétisation de l'espace et du temps se traduit par l'utilisation d'un maillage ; la solution des équations ne permet

d'obtenir que des valeurs moyennes sur des volumes de mailles. Les phénomènes physiques que nous cherchons à représenter ont des échelles caractéristiques spatiales et temporelles qui peuvent être très petites comparées aux dimensions (spatiales et temporelles) des configurations pratiques soit celle d'une chambre de combustion : par exemple, l'épaisseur d'une flamme laminaire est de l'ordre du dixième de millimètre. Pour que la solution soit suffisamment précise, il est raisonnable de choisir une taille de maille environ dix fois plus petite que le plus petit des phénomènes observés. Dans notre cas, il serait donc judicieux de choisir une taille de maille de l'ordre du centième de millimètre. Si on cherche à simuler une chambre de combustion dont les dimensions sont de l'ordre de dix centimètres - ce qui est plutôt petit pour une configuration industrielle - le nombre de mailles à répartir dans l'espace (3D) serait de mille milliards (10000^3). Résoudre les équations précédentes avec un maillage aussi "fin" (comportant beaucoup de mailles), demande une capacité de calcul et de mémoire que les ordinateurs actuels n'ont pas.
Certaines méthodes (Adaptative Mesh Refinement) permettent aujourd'hui d'envisager ce type de résolution en répartissant les mailles de calcul là où elles sont nécessaires. Le nombre de mailles peut ainsi être considérablement diminué. Paxion et al. [69] utilisent ces méthodes pour simuler des flammes laminaires. Cependant, une telle méthode n'est utile que si le phénomène observé, dont l'échelle caractéristique est très petite, est très localisé et stationnaire, par exemple une onde de choc ou une flamme laminaire. Si l'écoulement est turbulent, des phénomènes fortement instationnaires de petites tailles se produisent dans tout le domaine, ce qui rend impossible la simulation directe de configurations pratiques.

1.2 Turbulence

1.2.1 Caractéristiques des Ecoulements Turbulents

La "turbulence" est un phénomène présent dans la plupart des cas pratiques et notamment dans les chambres de combustion. Ce phénomène apparaît lorsque les gradients de vitesse augmentent de telle sorte que la viscosité du fluide ne peut plus dissiper les petites perturbations et maintenir le caractère laminaire de l'écoulement. Le nombre de Reynolds caractérise le régime de l'écoulement, laminaire ou turbulent, en comparant les temps et

longueurs caractéristiques des effets visqueux et de l'inertie du fluide : $Re = U_r L_r/\nu$ où U_r, L_r et ν sont respectivement la vitesse caractéristique, la longueur caractéristique et la viscosité cinématique du fluide.

La turbulence est généralement représentée par des structures tourbillonnaires dont les tailles sont réparties de façon continue sur une plage d'échelles de longueur. Les plus gros tourbillons sont associés à la géométrie de la configuration et les plus petits tourbillons sont dissipés par les forces visqueuses. Les bornes du spectre des échelles de taille des tourbillons sont donc définies par la configuration de l'écoulement d'une part et par la viscosité du fluide d'autre part.

Kolmogorov, en 1941 [42], a développé une théorie pour la turbulence homogène isotrope qui repose sur le mécanisme de cascade d'énergie des gros tourbillons vers les plus petits. Les grosses structures tourbillonnaires, produites par la géométrie et porteuses d'énergie, vont produire d'autres structures de plus en plus petites, à qui elles transmettent leur énergie. Plus les tourbillons sont petits, plus les forces visqueuses dissipent facilement leur énergie cinétique en chaleur.

La géométrie d'un écoulement présente très souvent des directions privilégiées, les grosses structures dépendantes de la géométrie sont donc *a priori* fortement anisotropes. Durant le processus de cascade, les gros tourbillons transmettent leur énergie aux tourbillons plus petits qui peuvent avoir des directions différentes, atténuant ainsi l'anisotropie. Plus les tourbillons sont petits plus ils ont tendance à être isotropes. Ainsi, les plus petites échelles d'un écoulement turbulent peuvent être considérées comme quasiment isotropes.

La théorie de Kolmogorov permet finalement de définir trois zones d'échelles différentes, voir Fig.1.4 :

- la zone des grandes échelles (échelle intégrale), qui est une caractéristique de la géométrie de l'écoulement, est le siège de la production de turbulence ;
- la zone inertielle, qui correspond aux échelles intermédiaires et qui est indépendante de la géométrie de l'écoulement, est le siège du transfert d'énergie des grosses vers les petites structures ;
- la zone des petites échelles (échelle de Kolmogorov) où l'énergie des petites structures tourbillonnaires est dissipée en chaleur.

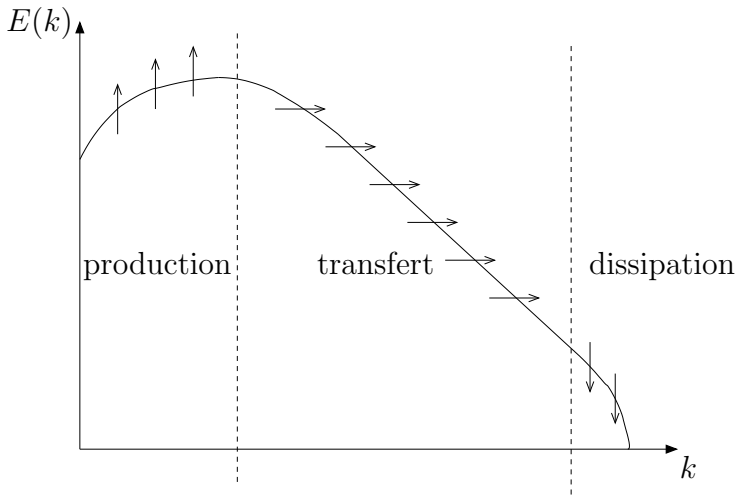


FIG. 1.4 – Allure du spectre des fluctuations de vitesse en turbulence homogène isotrope

Plus le nombre de Reynolds est grand, plus les grandes et les petites échelles sont différentes et donc plus le nombre de mailles à utiliser pour résoudre les équations aux dérivées partielles est important. La résolution directe des équations par simulation de toutes les échelles (DNS) est donc aujourd'hui limitée à des écoulements pour lesquels le nombre de Reynolds est très faible.

La turbulence présente au moins quatre caractéristiques importantes :

- la trajectoire des particules présente des changements brusques dans l'espace et le temps ;
- le mouvement des particules produit un effet de "diffusion" important ;
- l'écoulement est instationnaire ;
- les propriétés de l'écoulement en un point et à un instant ne sont pas reproductibles expérimentalement.

L'expérience a montré que les trajectoires des particules et les caractéristiques locales de l'écoulement ne sont pas reproductibles, par contre, certaines quantités "moyennes" le sont. Les mesures des valeurs moyennes de vitesse, d'énergie ou de concentration montrent qu'elles sont reproductibles. De la même manière, toutes les quantités statistiques qui peuvent être définies, moyennes, variances ou corrélations entre différentes grandeurs, sont reproductibles. De ce fait, les variables caractéristiques de l'écoulement sont représentées par une quantité fluctuant autour d'une quantité moyenne : $\Phi = \overline{\Phi} + \Phi'$ où $\overline{\Phi}$ est la moyenne

de Reynolds et Φ' la partie fluctuante de la variable Φ. Par définition, la moyenne des fluctuations est nulle : $\overline{\Phi'} = 0$. Les moyennes peuvent être assimilées à des moyennes temporelles (si l'écoulement est stationnaire en moyenne) ou spatiales (s'il existe des directions homogènes) mais de façon générale, il s'agit de moyennes statistiques.

A partir des équations d'évolution des variables et de la définition de la moyenne de Reynolds, de nouvelles équations pour les variables moyennes vont pouvoir être écrites. Comme les phénomènes physiques moyens ont, par définition, des échelles caractéristiques plus grandes que les phénomènes physiques réels, le maillage considéré pour la résolution des équations moyennes va pouvoir être beaucoup moins "fin" que celui utilisé pour la résolution directe des équations. On peut dès lors envisager le calcul de configuration pratique de type industriel telle que la chambre de combustion d'une turbine à gaz.

Une telle approche statistique, appelée RANS (Reynolds-Average Navier-Stokes) considère l'agitation turbulente comme un processus purement stochastique. Les variables moyennes sont donc statistiquement stationnaires mais peuvent quand même dépendre du temps par le biais des dérivées temporelles dans les équations moyennes. Cette dépendance au temps est susceptible de permettre de capturer des mouvements cohérents à grandes échelles, on parle alors de simulation URANS (Unsteady RANS). Cette dernière méthode ne permet tout de même pas de simuler le mélange des espèces induit par les effets fortement instationnaires des flammes turbulentes. On devra alors avoir recour à des méthodes complètement instationnaires comme la LES (Large Eddy Simulation).

1.2.2 Equations Moyennes et Problèmes de Fermeture

Une des particularités des écoulements de gaz réactifs est la variation de masse volumique engendrée par le dégagement de chaleur. Le procédé de moyenne, appliqué à ces écoulements, conduit à des équations complexes très différentes des équations moyennes pour les écoulements où la masse volumique est constante. Afin de retrouver les mêmes formes d'équations, on introduit une moyenne pondérée par la masse volumique appelée moyenne de Favre, définie de la façon suivante : $\overline{\rho\Phi} = \overline{\rho}\widetilde{\Phi}$. La fluctuation autour de la moyenne de Favre $\widetilde{\Phi}$ est notée Φ'' : $\Phi = \widetilde{\Phi} + \Phi''$. A la différence de la moyenne de Reynolds, cette moyenne n'est pas centrée, donc $\overline{\Phi''} \neq 0$ mais $\widetilde{\Phi''} = 0$. Pour obtenir les équations

d'évolution des quantités moyennes, on applique l'opérateur de moyenne aux équations exactes (1.5), (1.6), (1.20) et (1.21). On obtient :

– l'équation de continuité

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\right) = 0 \tag{1.22}$$

– l'équation de quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_i\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{u}_i\right) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\tau}_{ik} - \overline{\rho u_i'' u_k''}\right) - \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} \tag{1.23}$$

– l'équation d'évolution de la fraction de mélange moyenne

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\widetilde{\xi}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{\xi}\right) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' \xi''}\right) \tag{1.24}$$

– l'équation d'évolution de la fraction massique moyenne

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\widetilde{Y}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{Y}\right) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' Y''}\right) + \overline{\omega} \tag{1.25}$$

Les quantités transportées sont donc des quantités moyennes au sens de Favre. Lorsque la masse volumique est constante, les moyennes de Favre et de Reynolds sont équivalentes.

Ces équations moyennes sont semblables aux équations initiales sauf qu'un terme supplémentaire apparaît dans chaque équation (mis à part l'équation de continuité). Ces nouveaux termes représentent le mécanisme de transport turbulent des variables :

– $\overline{\rho u_i'' u_k''}$ est le flux turbulent de quantité de mouvement (tenseur de Reynolds) ;
– $\overline{\rho u_k'' \xi''}$ est le flux turbulent de la fraction de mélange ;
– $\overline{\rho u_k'' Y''}$ est le flux turbulent de la fraction massique de combustible.

Pour pouvoir utiliser ces équations moyennes, il faut connaître ces flux turbulent. On peut, à partir des équations de base et du procédé de moyenne, écrire des équations d'évolution de n'importe quelle quantité statistique, et donc celles des flux turbulents :

– équation pour les composantes du tenseur de Reynolds ;

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho u_i'' u_j''}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\widetilde{u}_k \overline{\rho u_i'' u_j''}\right) = D_{ij} + P_{ij} - \overline{\rho}\epsilon_{ij} + H_{ij} \tag{1.26}$$

Avec les termes du second membre suivants :

$$\begin{aligned}
D_{ij} &= -\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho u_k'' u_j'' u_i''} - \overline{u_i'' \tau_{jk}} - \overline{u_j'' \tau_{ik}}\right) \\
P_{ij} &= -\overline{\rho u_k'' u_i''}\frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' u_j''}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_k} \\
\overline{\rho}\epsilon_{ij} &= \overline{\tau_{jk}\frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} + \overline{\tau_{ik}\frac{\partial u_j''}{\partial x_k}} \\
H_{ij} &= -\overline{u_i''\frac{\partial p}{\partial x_j}} - \overline{u_j''\frac{\partial p}{\partial x_i}}
\end{aligned} \tag{1.27}$$

– équation des flux turbulents de fraction de mélange ;

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho u_i'' \xi''}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\widetilde{u}_k \overline{\rho u_i'' \xi''}\right) = D_i^{\xi} + P_i^{\xi} - \overline{\rho}\epsilon_i^{\xi} + H_i^{\xi} \tag{1.28}$$

Avec les termes du second membre suivants :

$$\begin{aligned}
D_i^{\xi} &= -\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho u_k'' u_i'' \xi''} - \overline{u_i'' \rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} - \overline{\xi'' \tau_{ik}}\right) \\
P_i^{\xi} &= -\overline{\rho u_k'' u_i''}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \xi''}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_k} \\
\overline{\rho}\epsilon_i^{\xi} &= \overline{\tau_{ik}\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} + \overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}\frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} \\
H_i^{\xi} &= -\overline{\xi''\frac{\partial p}{\partial x_i}}
\end{aligned} \tag{1.29}$$

– équation des flux turbulents de fraction massique ;

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho u_i'' Y''}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\widetilde{u}_k \overline{\rho u_i'' Y''}\right) = D_i^{Y} + P_i^{Y} - \overline{\rho}\epsilon_i^{Y} + H_i^{Y} + \psi_i^{Y} \tag{1.30}$$

Avec les termes du second membre suivants :

$$\begin{aligned}
D_i^{Y} &= -\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho u_k'' u_i'' Y''} - \overline{u_i'' \rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k}} - \overline{Y'' \tau_{ik}}\right) \\
P_i^{Y} &= -\overline{\rho u_k'' u_i''}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' Y''}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_k} \\
\overline{\rho}\epsilon_i^{Y} &= \overline{\tau_{ik}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}} + \overline{\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} \\
H_i^{Y} &= -\overline{Y''\frac{\partial p}{\partial x_i}} \\
\psi_i^{Y} &= \overline{u_i''\omega}
\end{aligned} \tag{1.31}$$

Les termes D_{ij}, D_i^{ξ} et D_i^{Y} regroupent les différents effets de diffusion (diffusion laminaire et transport turbulent). P_{ij}, P_i^{ξ} et P_i^{Y} sont les termes de production, $\overline{\rho}\epsilon_{ij}$, $\overline{\rho}\epsilon_i^{\xi}$ et $\overline{\rho}\epsilon_i^{Y}$

les termes de dissipation et H_{ij}, H_i^ξ et H_i^Y les termes de corrélation avec le gradient de pression. Le terme ψ_i^Y est un terme lié à la réaction chimique.

La résolution de ces équations du second ordre permet de connaître les flux turbulents et ainsi de résoudre les équations des valeurs moyennes de vitesse et de scalaires. Cependant, de nouveaux termes d'ordre supérieur apparaissent dans ces nouvelles équations. On pourrait à nouveau écrire des équations pour les termes inconnus mais celles-ci feraient toujours apparaître des termes d'ordre supérieur. Il faut donc, à un certain ordre, modéliser les termes inconnus par des expressions ne faisant intervenir que des termes d'ordre inférieur ou du même ordre.

La connaissance de la seule valeur moyenne d'un scalaire n'est pas toujours suffisante pour représenter correctement les phénomènes associés à la turbulence. On introduit alors les équations de bilan pour les variances et la covariance de ces scalaires. En faisant l'hypothèse que le coefficient de diffusion moléculaire est constant, les équations moyennes pour ces quantités s'écrivent :

– variance de fraction de mélange :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho\xi''^2}\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\widetilde{u}_k\overline{\rho\xi''^2}\right)=\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho D\frac{\partial\xi''^2}{\partial x_k}}-\overline{\rho u_k''\xi''^2}\right)\\ -2\overline{\rho D\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}}-2\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\end{aligned}\tag{1.32}$$

– variance de fraction massique :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\widetilde{Y''^2}\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{Y''^2}\right)=\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho D\frac{\partial Y''^2}{\partial x_k}}-\overline{\rho u_k''Y''^2}\right)\\ -2\overline{\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}}-2\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}+2\overline{Y''\omega}\end{aligned}\tag{1.33}$$

– covariance :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho Y''\xi''}\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\widetilde{u}_k\overline{\rho Y''\xi''}\right)=\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho D\frac{\partial Y''\xi''}{\partial x_k}}-\overline{\rho u_k''Y''\xi''}\right)\\ -2\overline{\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}}-\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}+\overline{\xi''\omega}\end{aligned}\tag{1.34}$$

Là encore apparaissent des termes inconnus qui vont devoir être modélisés.

Enfin, l'équation d'état (1.16) moyenne s'écrit :

$$\overline{\rho T^*}=\overline{\rho}\widetilde{T^*}=cte\tag{1.35}$$

1.3 Modélisation de la Turbulence

1.3.1 Modèle $k-\epsilon$

Parmi les modèles de turbulence, le modèle $k-\epsilon$ est l'un des plus utilisés. Ce modèle du premier ordre repose sur le concept de viscosité turbulente introduit par Boussinesq [13], qui consiste à modéliser les tensions de Reynolds $\overline{\rho u_i'' u_k''}$ par analogie avec le tenseur des contraintes visqueuses $\overline{\tau}_{ik}$. En faisant l'hypothèse que ces deux termes représentent des phénomènes de diffusion, l'un correspond à la diffusion moléculaire et l'autre à un processus de mélange par diffusion turbulente. Par analogie avec le transport moléculaire de quantité de mouvement qui est caractérisé par la viscosité du fluide ν, le mélange turbulent est caractérisé par la viscosité turbulente ν_T. Le premier est une propriété moléculaire du fluide alors que le second dépend de l'écoulement turbulent, ν_T est donc *a priori* une variable du temps et de l'espace. Les tensions de Reynolds sont alors exprimées en fonction des gradients moyens de la façon suivante :

$$\overline{\rho u_i'' u_k''} - \frac{1}{3}\overline{\rho u_l'' u_l''}\delta_{ik} = -\overline{\rho}\nu_T\left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_i}\right) + \frac{2}{3}\overline{\rho}\nu_T\frac{\partial \widetilde{u}_l}{\partial x_l}\delta_{ik} \tag{1.36}$$

L'énergie cinétique turbulente k est la demi-trace du tenseur de Reynolds, elle est définie par :

$$\overline{\rho}k = \frac{1}{2}\overline{\rho u_l'' u_l''} \tag{1.37}$$

L'analogie avec la diffusion moléculaire permet également d'exprimer les flux turbulents des scalaires (analogie avec la loi de Fick) :

$$\overline{\rho u_k'' \xi''} = -\overline{\rho} D_T \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \qquad \overline{\rho u_k'' Y''} = -\overline{\rho} D_T \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} \tag{1.38}$$

Les flux turbulents des variances des scalaires s'écrivent alors :

$$\overline{\rho u_k'' \xi''^2} = -\overline{\rho} D_T \frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k} \qquad \overline{\rho u_k'' Y''^2} = -\overline{\rho} D_T \frac{\partial \widetilde{Y''^2}}{\partial x_k} \qquad \overline{\rho u_k'' \xi'' Y''} = -\overline{\rho} D_T \frac{\partial \widetilde{\xi'' Y''}}{\partial x_k} \tag{1.39}$$

Le coefficient de diffusion turbulente D_T est le rapport de la viscosité turbulente ν_T sur le nombre de Schmidt turbulent σ_T : $D_T = \nu_T/\sigma_T$. Les expressions (1.38) et (1.39) pour les flux turbulents sont aussi appelées "loi gradient" car les flux sont directement reliés aux gradients des scalaires transportés.

L'équation pour l'énergie cinétique turbulente k est obtenue à partir de l'équation des tensions de Reynolds Eq.(1.26) :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}k\right)+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_j k\right)=\frac{1}{2}\left[D_{ii}+P_{ii}-\overline{\rho}\epsilon_{ii}+H_{ii}\right]=D^k+P^k-\overline{\rho}\epsilon+H^k \tag{1.40}$$

Avec les termes du second membre suivants :

$$\begin{aligned}
D^k &= -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho u_j'' u_i'' u_i''}-\overline{u_i''\tau_{ij}}-\overline{u_i''\tau_{ij}}\right)\\
P^k &= -\overline{\rho u_j'' u_i''}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j}\\
\overline{\rho}\epsilon &= \overline{\tau_{ij}\frac{\partial u_i''}{\partial x_j}}\\
H^k &= -\overline{u_i''\frac{\partial p}{\partial x_i}}
\end{aligned} \tag{1.41}$$

Le transport turbulent de l'énergie cinétique k est modélisée par une loi gradient, ce qui conduit à :

$$D^k=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\left(\nu+\frac{\nu_T}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right) \tag{1.42}$$

Le terme de production P^k est fermé.

Le terme de corrélation avec la pression H^k est habituellement décomposé en deux parties, $H^k = G^k + \Phi^k$, la première liée aux fluctuations de pression et la seconde liée à la pression moyenne :

$$G^k=-\overline{u_j''}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} \qquad \text{et} \qquad \Phi^k=-2\overline{u_j''\frac{\partial p'}{\partial x_j}} \tag{1.43}$$

Le terme G^k lié à la pression moyenne est nul lorsque la masse volumique est constante ($\overline{u_j''}=\overline{u_j'}=0$). Cependant, il nécessite une modélisation particulière pour les écoulements à masse volumique variable (on parlera plus précisément de ce terme dans les chapitres suivants).

Le terme Φ^k est négligé car il peut aussi être exprimé de la façon suivante :

$$\Phi^k=-\overline{u_j''\frac{\partial p'}{\partial x_j}}=-\frac{\partial \overline{u_j'' p'}}{\partial x_j}+\overline{p'\frac{\partial u_j''}{\partial x_j}} \tag{1.44}$$

L'expression $\partial\overline{u_j'' p'}/\partial x_j$ est un terme de flux, considéré comme négligeable devant le terme de diffusion D^k, Eq. (1.42). L'expression $\overline{p'\partial u_j''/\partial x_j}$ est nulle lorsque la masse volumique est constante car l'équation de continuité implique $\partial u_j''/\partial x_j = 0$. Il n'y a pas de raison *a priori*

qui permette de négliger Φ^k lorsque la masse volumique varie. Ce terme est néanmoins souvent négligé dans les modèles où les effets de compressibilité sont négligeables.

Le modèle $k-\epsilon$ utilise aussi une équation de transport pour le taux de dissipation de la turbulence ϵ et la connaissance de k et ϵ permet d'exprimer la viscosité turbulente ν_T. L'analyse dimensionnelle a conduit à :

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \tag{1.45}$$

où C_μ est une constante déterminée expérimentalement dont la valeur est estimée à $0,09$. Launder et Spalding [45] ont proposé directement une équation modélisée pour ϵ basée sur la forme de celle pour l'énergie cinétique turbulente :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\epsilon\right) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_j\epsilon\right) = D^\epsilon + C_{\epsilon 1}\frac{\epsilon}{k}P^k - C_{\epsilon 2}\overline{\rho}\frac{\epsilon^2}{k} + C_{\epsilon 3}\frac{\epsilon}{k}H^k \\ &\text{avec} \qquad D^\epsilon = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_\epsilon})\frac{\partial \epsilon}{\partial x_j}\right) \end{aligned} \tag{1.46}$$

Des détails supplémentaires sur le modèle $k-\epsilon$ peuvent être trouvés dans les ouvrages de Tennekes et Lumley [89] ou de Schiestel [85].

Si les variances des scalaires sont transportées, les termes de dissipation scalaire apparaissant dans ces équations doivent également être modélisés. Les trois termes de dissipation intervenant dans les équations (1.32), (1.25) et (1.34) sont respectivement :

$$\overline{\rho}\epsilon_\xi = -2\overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} \quad \overline{\rho}\epsilon_Y = -2\overline{\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}} \quad \overline{\rho}\epsilon_{\xi Y} = -2\overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}} \tag{1.47}$$

Pour représenter l'évolution de la dissipation d'un scalaire passif, on utilise habituellement un modèle de relaxation linéaire. Ce modèle relie le taux de dissipation à un temps de mélange caractéristique, lui-même relié au temps caractéristique de la turbulence :

$$\overline{\rho}\epsilon_\xi = \frac{\overline{\rho\xi''^2}}{\tau_\xi} = \frac{\overline{\rho\xi''^2}}{R_\xi \tau_T} \quad \text{avec} \quad \tau_T = \frac{k}{\epsilon} \tag{1.48}$$

La constante R_ξ a été déterminée dans plusieurs expériences (voir par exemple [48]). Cette représentation suppose une très forte similarité des spectres turbulents pour les scalaires et pour le champ de vitesse, similarité qui n'est pas toujours vérifiée même pour un scalaire passif. Pour un scalaire réactif, la modélisation de la dissipation est compliquée par le fait qu'elle peut-être entièrement pilotée par la réaction chimique. Des modèles de fermeture

algébrique pour ces termes de dissipation, spécifiques à la combustion, seront proposés dans les chapitres suivants. D'autres possibilités consistant à considérer des équations de transport modélisées pour ces termes ont aussi été proposées [53, 59].

Les constantes du modèle $k-\epsilon$ généralement utilisées sont répertoriées dans le tableau 1.1, voir par exemple [85].

C_μ	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	$C_{\epsilon 3}$	σ_k	σ_ϵ	σ_T	R_ξ
0,09	1,44	1,92	1,44	1	1,3	0,7	1,25

TAB. 1.1 – Constantes du modèle $k-\epsilon$

La connaissance de k et ϵ permet de calculer la viscosité turbulente et finalement les tensions de Reynolds et les flux turbulents des scalaires.

Le modèle $k-\epsilon$ est limité à des cas où la turbulence est faiblement anisotrope car ce modèle ne résout pas les différentes composantes de l'énergie cinétique $\overline{\rho u_1''^2}$, $\overline{\rho u_2''^2}$ et $\overline{\rho u_3''^2}$. De plus, l'hypothèse de Boussinesq, qui conduit à la loi gradient pour les flux turbulents, peut se révéler inadéquate pour des écoulements à masse volumique variable. En effet, le transport turbulent peut, dans certaines configurations de combustion, être complètement dé-corrélée des gradients moyens, voire même être de signe opposé à celui donné par la loi gradient.

1.3.2 Modèle $R_{ij}-\epsilon$

Ce modèle du second ordre pour représenter les effets moyens de la turbulence consiste à résoudre les six équations pour les tensions de Reynolds (1.26) ainsi qu'une équation pour la dissipation visqueuse $\epsilon = \epsilon_{jj}/2$. L'anisotropie à grande échelle est bien représentée par la résolution des 6 composantes des tensions de Reynolds et l'isotropie des petites échelles de la turbulence permet de ne résoudre qu'une équation pour les composantes ϵ_{ij} de la dissipation visqueuse :

$$\epsilon_{ij} = \frac{2}{3}\epsilon\delta_{ij} \tag{1.49}$$

Cette hypothèse est valable pour des grands nombres de Reynolds. L'équation pour la dissipation s'écrit de façon analogue à celle du modèle $k-\epsilon$ (1.46) mais le terme de

diffusion peut être écrit de façon plus complète avec la relation proposée par Daly et Harlow [24] :

$$D^{\epsilon} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(C_{\epsilon}\frac{k}{\epsilon}\overline{\rho u_k'' u_m''}\frac{\partial \epsilon}{\partial x_m}\right) \tag{1.50}$$

Daly et Harlow utilisent l'hypothèse d'un grand nombre de Reynolds pour obtenir l'expression précédente et ils l'utilisent également pour exprimer le terme de diffusion des tensions de reynolds :

$$D_{ij} = -\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho u_k'' u_j'' u_i''}\right) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(C_s\frac{k}{\epsilon}\overline{\rho u_k'' u_m''}\frac{\partial \widetilde{u_i'' u_j''}}{\partial x_m}\right) \tag{1.51}$$

De la même façon que pour H^k, H_{ij} est décomposé en une partie liée aux fluctuations de pression et une partie liée à la pression moyenne. La seconde partie, G_{ij}, est nulle lorsque la masse volumique est constante car $\overline{u_i''} = 0$.

La demi-trace du terme lié aux fluctuations de pression Φ^k est nulle pour un écoulement à masse volumique constante (voir paragraphe précédent). Les composantes de ce terme, Φ_{ij}, quant à elles, ne sont pas nulles ; elles assurent donc la redistribution de la production d'énergie sur les différentes composantes des tensions de Reynolds. Ce terme a donc un effet d'isotropisation de l'écoulement, voir par exemple [36, 46, 49, 63, 64, 84]. Une façon de modéliser ce terme est de considérer l'équation de transport pour le tenseur d'anisotropie b_{ij}=$\overline{\rho u_i'' u_j''}/2\overline{\rho}k$-$\delta_{ij}/3$ comme l'ont déjà fait par exemple Djenidi et Antonia [29] ; les équations (1.26) et (1.40) conduisent à :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho} b_{ij}\right) + \frac{\partial}{\partial x_l}\left(\widetilde{u}_l \overline{\rho} b_{ij}\right) = \frac{1}{2k}\Bigg[&\left(D_{ij} - \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k}D_{ll}\right) + \left(P_{ij} - \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k}P_{ll}\right) \\ &- \left(\overline{\rho\epsilon_{ij}} - \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k}\overline{\rho\epsilon_{ll}}\right) + \left(G_{ij} - \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k}G_{ll}\right) + \left(\Phi_{ij} - \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k}\Phi_{ll}\right)\Bigg]\end{aligned} \tag{1.52}$$

L'effet d'isotropisation se traduit par un équilibre des termes du membre de droite de l'équation précédente. Le terme de diffusion est négligé, l'équilibre s'écrit alors :

$$\begin{aligned}\left(\Phi_{ij} - \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k}\Phi_{ll}\right) = C_1\left(\overline{\rho}\epsilon_{ij} - \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k}\overline{\rho}\epsilon_{ll}\right) - C_2\left(P_{ij} - \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k}P_{ll}\right) \\ -C_3\left(G_{ij} - \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k}G_{ll}\right)\end{aligned} \tag{1.53}$$

Lorsque la trace $\Phi_{ll} = 2\Phi^k$ est négligée, on obtient :

$$\Phi_{ij} = C_1 \left(\overline{\rho}\epsilon_{ij} - \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k} \overline{\rho}\epsilon_{ll} \right) - C_2 \left(P_{ij} - \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k} P_{ll} \right) - C_3 \left(G_{ij} - \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{2k} G_{ll} \right) \quad (1.54)$$

Le terme que multiplie la constante C_1 est aussi appelé terme "lent" ou terme de retour à l'isotropie, initialement proposé par Rotta [84]. Le terme que multiplie la constante C_2 est le terme "rapide" ou d'isotropisation de la production, introduit par Naot et al. [63, 64]. Ces deux premiers termes correspondent au modèle connu, proposé par Launder,Reece et Rodi [46]. Le dernier terme représente l'isotropisation des effets de variation de la masse volumique, ce terme a déjà été utilisé par Bailly et al. [3] pour un écoulement turbulent réactif.

Pour que le second ordre soit complet, les équations d'évolutions des flux turbulents des scalaires (1.28) et (1.30) doivent être résolues, ce qui permet d'éviter l'utilisation de la loi gradient pour représenter la diffusion turbulente des scalaires. Les différents termes de diffusion des équations (1.28) et (1.30) sont modélisés en considérant un nombre de Reynolds élevé et en utilisant les relations équivalentes à celles proposées par Daly et Harlow pour le champ de vitesse :

$$D_i^{\xi} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(C_{\xi} \frac{k}{\epsilon} \overline{\rho u_k'' u_j''} \frac{\partial \widetilde{u_i'' \xi''}}{\partial x_j} \right) \quad D_i^{Y} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(C_{Y} \frac{k}{\epsilon} \overline{\rho u_k'' u_j''} \frac{\partial \widetilde{u_i'' Y''}}{\partial x_j} \right) \quad (1.55)$$

Les termes de production sont fermés. Les termes de dissipation ϵ_i^{ξ} et ϵ_i^{Y} sont souvent négligés en invoquant une hypothèse d'isotropie à petite échelle du champ scalaire et du champ de vitesse, lorsque la masse volumique est constante [47]. Ces termes peuvent également être fermés par un modèle de relaxation linéaire :

$$\overline{\rho}\epsilon_i^{\xi} = \frac{\overline{\rho u_i'' \xi''}}{\tau_{\xi}} = \frac{\overline{\rho u_i'' \xi''}}{R_{\xi} \tau_T} \quad (1.56)$$

Les termes de corrélation avec la pression H_i^{Y} et H_i^{ξ} sont modélisés par analogie avec le terme H_{ij}. Les termes H_i^{Y} et H_i^{ξ} sont tout d'abord décomposés en deux parties : $H_i^{Y} = G_i^{Y} + \Phi_i^{Y}$ et $H_i^{\xi} = G_i^{Y} + \Phi_i^{Y}$. Les fermetures pour les termes G_i^{Y} et G_i^{ξ} seront développées dans les chapitres suivants, ces termes sont nuls lorsque la masse volumique est constante. Launder [36, 47] propose de modéliser les termes Φ_i^{Y} et Φ_i^{ξ} par un terme "lent" de retour à l'isotropie et un terme "rapide" d'isotropisation de la production. Les

effets d'isotropisation de la variation de la masse volumique sont pris en compte par un terme supplémentaire, comme l'ont utilisé Bailly et al. [3] :

$$\Phi_i^Y = -\overline{Y''\frac{\partial p'}{\partial x_i}} = -C_{Y1}\frac{\epsilon}{k}\overline{\rho u_i'' Y} - C_{Y2}\overline{\rho u_j'' Y}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{Y3}G_i^Y \tag{1.57}$$

$$\Phi_i^\xi = -\overline{\xi''\frac{\partial p'}{\partial x_i}} = -C_{\xi 1}\frac{\epsilon}{k}\overline{\rho u_i'' \xi} - C_{\xi 2}\overline{\rho u_j'' \xi}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{\xi 3}G_i^\xi \tag{1.58}$$

Les constantes du modèle $R_{ij} - \epsilon$ généralement utilisées sont répertoriées dans le tableau 1.2

C_ϵ	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	$C_{\epsilon 3}$	C_S	C_1	C_2	C_3	C_ξ	$C_{\xi 1}$	$C_{\xi 2}$	$C_{\xi 3}$	R_ξ
0,18	1,44	1,92	1,44	0,25	1,8	0,6	0,55	0,18	3	0,5	0,5	1,25

TAB. 1.2 – Constantes du modèle $R_{ij} - \epsilon$

Les deux modèles de turbulence présentés, $k - \epsilon$ et $R_{ij} - \epsilon$, permettent de résoudre les équations des grandeurs caractéristiques moyennes des phénomènes qui nous intéressent. Cependant, les fermetures proposées par ces modèles ont été établies en ne considérant que les phénomènes turbulents inertes ; certains phénomènes induits par la réaction chimique nécessitent une approche différente qui ne permet pas d'utiliser directement les fermetures proposées. De plus, le taux de réaction chimique ω, représenté par une loi d'Arrhénius, est une fonction fortement non linéaire des grandeurs ξ et Y. De ce fait, le taux de réaction chimique moyen $\overline{\omega}$ ne peut pas être représenté par la loi Arrhénius des valeurs moyennes $\overline{\xi}$ et $\overline{Y}$:

$$\overline{\omega(\xi, Y)} \neq \omega(\overline{\xi}, \overline{Y}) \tag{1.59}$$

Le taux de réaction chimique moyen $\overline{\omega}$ ainsi que tous les termes où la réaction chimique intervient doivent donc être modélisés. De manière générale, la modélisation des termes inconnus des équations moyennes nécessite la prise en compte des phénomènes induits par l'interaction de la turbulence et de la réaction chimique. Une description quantitative des flammes turbulentes, qui conduit aux modèles habituels pour les termes inconnus, sera exposée aux chapitres suivants. Une description qualitative de la structure d'une flamme turbulente est un préalable nécessaire.

1.4 Interaction entre Combustion et Turbulence

1.4.1 Flammes Turbulentes de Prémélange

La structure interne d'une flamme turbulente a tout d'abord été considérée, dès les premiers travaux de Damköhler en 1940 [25], comme étant une flamme laminaire très fine plissée et rapidement convectée par la turbulence de telle sorte que la zone de flamme apparaisse épaisse à l'oeil nu. En fait, cette façon de représenter la structure interne d'une flamme turbulente n'est pertinente que si la taille des plus petits tourbillons créés par la turbulence, est plus grande que l'épaisseur de la flamme laminaire, empêchant ainsi aux tourbillons de pénétrer dans la flamme laminaire. On obtient une classification relativement simple des structures de flammes turbulentes en comparant les longueurs et les temps caractéristiques de la turbulence à la longueur et au temps caractéristiques des flammes laminaires. Différents nombres caractéristiques peuvent être choisis pour établir cette classification des régimes de combustion. Les deux nombres les plus utilisés sont les nombres de Damköhler Da et de Karlovitz Ka qui comparent le temps caractéristique chimique τ_c aux temps caractéristiques de la turbulence τ_T et τ_K associés respectivement aux structures énergétiques et dissipatives de la turbulence :

$$Da = \frac{\tau_T}{\tau_c} = \frac{l_T}{\delta_L}\frac{S_L}{u'} \qquad Ka = \frac{\tau_c}{\tau_K} = \frac{\delta_L}{l_K}\frac{u_K}{S_L} \tag{1.60}$$

τ_T, l_T et u' sont respectivement le temps, l'échelle intégrale et la vitesse caractéristiques de la turbulence τ_K, l_K et u_K sont le temps, la longueur et la vitesse caractéristiques de la dissipation (échelle de Kolmogorov). δ_L et S_L sont l'épaisseur et la vitesse de la flamme laminaire. Les longueurs, temps et vitesses caractéristiques de la turbulence peuvent être exprimés en fonction de l'énergie cinétique turbulente k, de la dissipation ϵ et de la viscosité cinématique du fluide ν :

$$u' = \sqrt{k} \qquad l_T = \frac{u'^3}{\epsilon} \qquad u_K = (\nu\epsilon)^{1/4} \qquad l_K = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4} \tag{1.61}$$

Ces relations permettent de relier les nombres Da et Ka au nombre de Reynolds turbulent Re_T :

$$Re_T = \frac{u' l_T}{\nu} = Da^2 Ka^2 \tag{1.62}$$

Le diagramme de la figure 1.5 , avec u'/S_L en ordonnée et l_T/δ_L en abscisse, proposé par Barrère et Borghi [4, 11, 12] permet de représenter les limites des différents régimes de combustion. Un diagramme équivalent est utilisé par Peters [70]. Selon la zone du diagramme dans laquelle on se trouve, les flammes turbulentes seront de différents types : les flammes "plissées", les flammes "épaissies" et les flammes "plissées-épaissies".

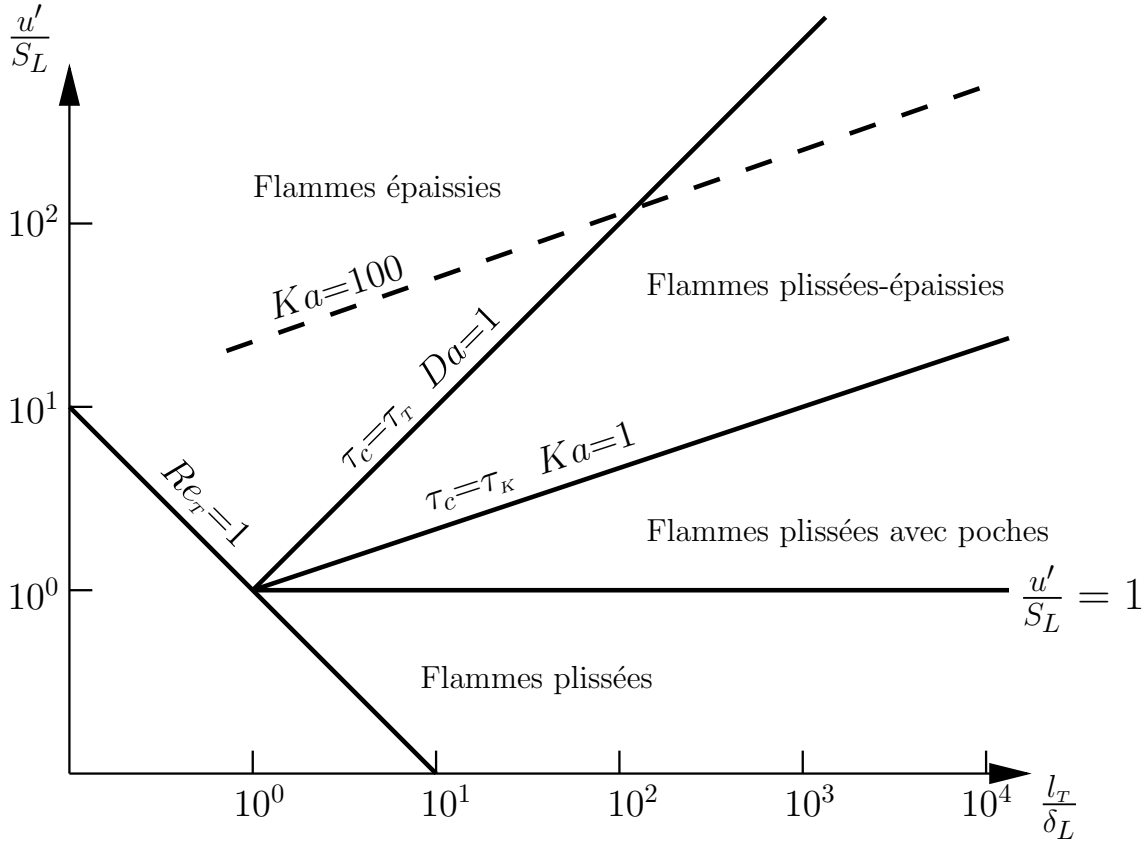


FIG. 1.5 – Les différents types de flammes turbulentes de prémélanges (diagramme de Borghi [11, 12])

Les Flammes "Plissées"

Dans le régime de combustion des "flammes plissées" ou régime de "flammelettes", la flamme turbulente est constituée d'une collection de flammes laminaires (flammelettes) plissées par la turbulence. La structure interne de la flamme laminaire n'est pas perturbée par les tourbillons car les tailles de tourbillons sont toutes plus grandes que l'épaisseur de la flammelette, $l_K > \delta_L$. La considération des seuls rapports d'échelles de longueurs

n'est toutefois pas suffisante pour conclure quant à la structure de la flamme ; d'autres paramètres non dimensionnels tel que u'/S_L doivent être pris en compte. De plus, la comparaison de ces deux échelles de longueur n'est pas si évidente car l_K est défini d'un point de vue statistique et δ_L est susceptible de varier d'un point à un autre au sein de la flamme moyenne du fait des étirements locaux.

Dans ce régime, la flamme turbulente peut donc être considérée comme un ensemble de flammelettes d'épaisseur quasiment constante δ_L, courbées et plissées occupant une zone d'épaisseur δ_T. δ_T est définie comme l'épaisseur moyenne de la flamme turbulente, le "flame brush" en anglais.

Lorsque l'intensité turbulente augmente ($u' > S_L$), la déformation de la flammelette s'accentue et peut ainsi provoquer des interactions entre deux parties adjacentes de celle-ci, voir figure 1.6. Ces interactions sont susceptibles de conduire à la formation de "poches" de gaz entourées d'une flammelette. Ces poches peuvent être constituées de gaz frais ou de gaz brûlés suivant que l'interaction se fait au niveau des zones de préchauffage ou des zones de réaction. Dans ce dernier cas, on parle alors d'interaction de deux flammelettes "dos à dos". L'apparition de poche de gaz frais dans les gaz brûlés est nettement plus fréquente que l'inverse car la propagation de la flamme locale favorise ce phénomène, voir figure 1.6. Les interactions "dos à dos" ne forment une poche de gaz brûlés que si une extinction des zones de réaction se produit, la turbulence doit alors être suffisamment forte.

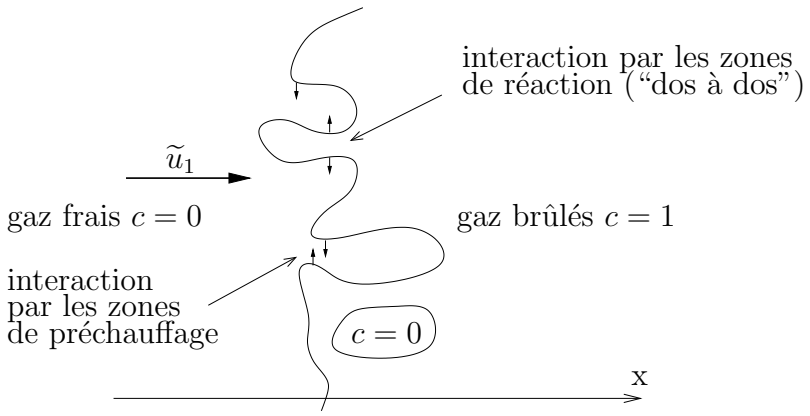


FIG. 1.6 – Formation de poches dans une flamme turbulente

Les Flammes "Plissées-épaissies"

Lorsque l'énergie cinétique turbulente k augmente et que l'échelle intégrale l_T est constante alors l'échelle de Kolmogorov l_K diminue et devient de plus en plus proche voire inférieure à l'épaisseur des flammelettes δ_L. Les structures turbulentes sont alors susceptibles de pénétrer dans la structure de la flamme laminaire, provoquant ainsi son épaississement. La zone de préchauffage est la première affectée par ces tourbillons car son épaisseur est plus importante que celle de la zone de réaction. Les premières études concernant l'épaississement de la zone de préchauffage ont été réalisées par Zimont [95]. Ce phénomène est en fait la conséquence des interactions des zones de préchauffage qui se produisent de plus en plus fréquemment car le rayon de courbure des flammelettes est de plus en plus petit et peut être, par endroit, de l'ordre de δ_L. L'étirement que la turbulence provoque peut aussi réduire l'épaisseur de la flammelette [41, 94] et créer des interactions "dos à dos" suivies d'extinction des deux zones de réaction en contact ; une poche de gaz brûlés encerclée par la zone de réaction apparaît alors dans la zone de préchauffage.

Les Flammes "Epaissies"

Si l'énergie cinétique turbulente k augmente encore et que l'échelle intégrale l_T est toujours constante de telle sorte que $\tau_T = \tau_c$ alors les interactions de flammelettes ont lieu à toutes les échelles, même les plus grandes. La flamme n'est plus plissée mais seulement épaissie par la turbulence. Ce régime de combustion est aussi appelé "réacteur bien agité" (well-stirred reactor) mais ce nom n'est pas très adapté car on observe tout de même une flamme. En fait, les flammes turbulentes épaissies ont la même structure que les flammes laminaires, avec une zone de préchauffage et une zone de réaction bien séparées. Cependant, comme la diffusion dans ces zones est engendrée par le transport turbulent qui est bien plus important que le transport moléculaire, les zones sont bien plus épaisses que dans des flammes laminaires.

Le diagramme de la figure (1.5) permet de choisir le modèle de combustion le mieux adapté à la situation que l'on cherche à représenter, mais on doit bien garder à l'esprit que cette classification des régimes de combustion n'est que qualitative [18]. En effet, les

limites entre les différentes zones sont basées sur des raisonnements d'ordres de grandeurs ; par exemple, la limite entre les flammes épaissies et les flammes plissées-épaissies est définie, selon les auteurs par la droite $Da = 1$ ou $Ka = 100$, la limite entre les flammes plissées-épaissies et les flammes plissées peut correspondre à $Ka = 0.1$ ou $Ka = 10$ plutôt que $Ka = 1$. De plus, l'analyse qui conduit à cette classification est basée sur certaines hypothèses non réalistes : une turbulence homogène isotrope obtenue dès que $Re_T = 1$ [28], une réaction globale irréversible, etc.

Les trois types de flammes turbulentes qui viennent d'être décrites engendrent des différences importantes des fluctuations de températures. En effet, si la flamme est de type plissé, la mesure locale et instantanée de la température donnera soit la température des gaz frais soit la température des gaz brûlés. Comme la flammelette a une épaisseur δ_L très fine, la probabilité d'obtenir une température intermédiaire sera très faible. Par contre, si la flamme est du type "épaissi", les fluctuations de température ne seront pas assez fortes pour que les températures des gaz frais et des gaz brûlés puissent être mesurées au même endroit de la flamme moyenne. La fonction densité de probabilité (PDF) de la température aura, dans le cas des flammes "plissées", plutôt l'allure de deux distributions de Dirac, l'une correspondant à la température des gaz frais, l'autre à la température des gaz brûlés. Dans le cas de flammes "épaissies", la PDF sera plus étroite, elle aura plutôt l'allure d'une gaussienne. La PDF de température pour des flammes de type "plissé-épaissi" montrera à la fois la présence de pics et de situations intermédiaires.

1.4.2 Flammes Turbulentes Partiellement Prémélangées

Le cas limite où la flamme turbulente est non prémélangée se rencontre très souvent dans les applications, l'exemple le plus courant est le brûleur à gaz. Un jet de gaz de combustible est injecté au centre d'un écoulement d'air de même direction, on parle alors de flamme de diffusion turbulente.

Il est *a priori* plus difficile de bâtir un diagramme délimitant différents régimes de combustion pour ce type de flamme comme on l'a fait pour les flammes turbulentes prémélangées. En effet, on a pu déterminer des propriétés intrinsèques pour les flammes laminaires de prémélange (vitesse, temps et longueur caractéristiques) qu'il n'est plus possible de

déterminer pour les flammes de diffusion car elles ne se propagent pas. Ces flammes de diffusion sont contrôlées par le mélange entre combustible et oxydant, c'est-à-dire par le taux de dissipation local ϵ_ξ ; cette quantité est une propriété de l'écoulement lui-même.

Lorsque la vitesse est élevée, des zones de recirculation sont parfois nécessaires pour stabiliser les flammes de diffusion. Lorsque ces zones ne sont pas parfaitement accrochées au nez du brûleur, un prémélange partiel de combustible et d'air se produit avant de brûler, le "flame brush" est alors constitué à la fois de flammes de diffusion et de prémélange.
Ces prémélanges partiels existent dans la plupart des configurations pratiques, même quand il s'agit de flammes turbulentes de prémélange, car le mélange n'est jamais parfaitement homogène. En effet, les procédés d'injection du combustible pur dans l'air ne sont pas parfaits et conduisent forcément à des hétérogénéités de richesse. Celles-ci peuvent avoir une influence non négligeable sur l'interaction flamme-turbulence car le temps caractéristique chimique et la vitesse de propagation de la flamme laminaire sont fortement dépendants de la richesse.
Par exemple, une flamme turbulente se propageant dans un milieu à richesse moyenne égale à la stœchiométrie et fortement hétérogène, présentera des épaississements locaux là où le temps caractéristique chimique devient grand ; la richesse sera, à ces endroits, très différente de la stœchiométrie. Une flamme turbulente se propageant dans le même milieu mais homogène sera juste plissée par la turbulence. Comme les variations de richesse vont provoquer des variations de vitesse du front de flamme, des étirements supplémentaires sont susceptibles d'apparaître.

Dans ces configurations, la turbulence joue un rôle très important car elle mélange à grande échelle les gaz présents. Le mélange à petite échelle est, quant à lui, assuré à son stade ultime par la diffusion moléculaire qui joue un rôle également très important. Dans des flammes de prémélange parfait, la turbulence mélange les gaz frais et les gaz brûlés, mais dans des flammes de prémélange partiel, il faut en plus prendre en compte le mélange entre le combustible et l'air. Dans ces cas, la PDF aura au minimum deux dimensions alors qu'une seule dimension peut suffire pour caractériser les prémélanges parfaits.

1.5 Conclusions

La complexité des phénomènes physiques intervenant et interagissant dans un écoulement réactif turbulent, nous empêche de résoudre directement les équations locales représentant l'évolution des grandeurs mécaniques et thermodynamiques caractéristiques de ces écoulements.

Dans un premier temps, ces équations sont simplifiées en faisant jouer un certain nombre d'hypothèses portant sur la représentation des mécanismes chimiques et sur les propriétés de l'écoulement :

- La cinétique chimique peut être représentée par une réaction globale. Cette hypothèse est très éloignée de la réalité mais nous permet de ne prendre en compte qu'un nombre limité d'espèces chimiques. Dans ces conditions, le taux de réaction d'une seule espèce permet de caractériser la réaction globale.
- Le nombre de Mach des écoulements que nous étudierons est faible ($Ma < 0.3$).
- Les espèces et la chaleur diffusent de la même manière au niveau moléculaire ($Le_i = 1$).
- Les parois des systèmes sont considérées adiabatiques et imperméables aux espèces.

L'ensemble de ces hypothèses permet de n'utiliser que deux variables pour connaître la température et les concentrations de toutes les espèces du mélange (approximation de Schvab-Zeldovitch). La résolution des équations de la mécanique des fluides (conservation de la masse et quantité de mouvement), de la fraction de mélange et de la fraction massique de combustible suffisent à caractériser les écoulements considérés, qu'il s'agisse de flammes de diffusion ou de flammes de prémélange.

Dans un deuxième temps, le phénomène turbulent nous conduit à utiliser une approche statistique pour prédire l'évolution moyenne de l'écoulement réactif. Les équations pour les quantités moyennes qui résultent de cette approche font apparaître des termes inconnus qu'il faut modéliser. Nous utiliserons dans cette étude soit le modèle $k - \epsilon$, soit un modèle du second ordre $R_{ij} - \epsilon$. Ces modèles ont été développés en premier lieu pour les écoulements d'un fluide inerte et à masse volumique constante. Dans notre cas, ces modèles doivent être adaptés pour prendre en compte à la fois la réaction chimique et les effets de variation de la masse volumique. Les équations de transport moyennes que nous utiliserons, ainsi que les termes qui les composent, sont récapitulés dans le tableau 1.3. Le

développement de méthodes pour fermer les différents termes des équations est l'objectif principal de ce travail ; il est détaillé dans la deuxième partie de ce mémoire. Pour ce faire nous chercherons à prendre en compte les deux aspects fondamentaux de la combustion turbulente :

– l'effet de la turbulence sur la flamme
– l'effet de la flamme sur la turbulence

Les différentes structures particulières de flamme turbulente : prémélange parfait, flammes plissées, flammes épaissies, prémélange partiel ont conduit à l'élaboration de modèles de fermeture différents que nous allons présenter succinctement dans ce qui suit.

Convection	Diffusion	Termes sources
$\frac{DA}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}A) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\widetilde{u}_j A)$		? : termes inconnus à modéliser
$\frac{D}{Dt} =$	0	
$\frac{D\widetilde{u}_i}{Dt} =$	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}\right)$	$-\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}$
$\frac{D\widetilde{\xi}}{Dt} =$	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_j}} - \overline{\rho u_j'' \xi''}\right)$	
$\frac{D\widetilde{Y}}{Dt} =$	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_j}} - \overline{\rho u_j'' Y''}\right)$	$+\overline{\omega}$
$\frac{D\widetilde{\xi''^2}}{Dt} =$	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi''^2}{\partial x_j}} - \overline{\rho u_j'' \xi''^2}\right)$	$-2\overline{\rho u_j'' \xi''}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_j} - \overline{\rho}\epsilon_\xi$
$\frac{D\widetilde{Y''^2}}{Dt} =$	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho D \frac{\partial Y''^2}{\partial x_j}} - \overline{\rho u_j'' Y''^2}\right)$	$-2\overline{\rho u_j'' Y''}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_j} - \overline{\rho}\epsilon_Y + 2\overline{Y''\omega}$
$\frac{D\widetilde{Y''\xi''}}{Dt} =$	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho D \frac{\partial Y''\xi''}{\partial x_j}} - \overline{\rho u_j'' Y''\xi''}\right)$	$-\overline{\rho u_j'' Y''}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_j} - \overline{\rho u_j'' \xi''}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_j} - \overline{\rho}\epsilon_{\xi Y} + \overline{\xi''\omega}$
Fermeture pour le scalaire passif : $\epsilon_\xi = \frac{\epsilon}{k}\frac{\widetilde{\xi''^2}}{R_\xi}$ Fermetures pour le scalaire réactif : $\epsilon_Y =?$ $\epsilon_{\xi Y} =?$ $\overline{\omega} =?$ $\overline{Y''\omega} =?$ $\overline{\xi''\omega} =?$		

Modèle de turbulence du 1^{er} ordre : k-ϵ		
$\frac{Dk}{Dt} =$	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k})\frac{\partial k}{\partial x_j}\right)$	$-\overline{\rho u_j'' u_i''}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} - \overline{\rho}\epsilon + H^k$
$\frac{D\epsilon}{Dt} =$	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_\epsilon})\frac{\partial \epsilon}{\partial x_j}\right)$	$-C_{\epsilon 1}\frac{\epsilon}{k}\overline{\rho u_j'' u_i''}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{\epsilon 2}\overline{\rho}\frac{\epsilon^2}{k} + C_{\epsilon 3}\frac{\epsilon}{k}H^k$
$\widetilde{u_j''\xi''} = -D_T\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_j}$ $\widetilde{u_j''Y''} = -D_T\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_j}$ $D_T = \frac{\nu_T}{\sigma_T}$ $\widetilde{u_j''\xi''^2} = -D_T\frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_j}$ $\widetilde{u_j''Y''^2} = -D_T\frac{\partial \widetilde{Y''^2}}{\partial x_j}$ $\widetilde{u_j''\xi''Y''} = -D_T\frac{\partial \widetilde{\xi''Y''}}{\partial x_j}$ $\widetilde{u_i''u_j''} = -\nu_T\left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_i}\right) + \frac{2}{3}\left(k + \nu_T\frac{\partial \widetilde{u}_l}{\partial x_l}\right)\delta_{ij}$ $\nu_T = C_\mu\frac{k^2}{\epsilon}$ si $\rho = cte$ alors $H^k = 0$ si ρ est variable $H^k =?$		

Modèle de turbulence du 2^{nd} ordre : R_{ij}-ϵ		
$\frac{D\widetilde{u_i''\xi''}}{Dt} =$	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(C_\xi\frac{k}{\epsilon}\overline{\rho u_j'' u_m''}\frac{\partial \widetilde{u_i''\xi''}}{\partial x_m}\right)$	$-\overline{\rho u_j'' u_i''}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_j} - \overline{\rho u_j'' \xi''}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} - \overline{\rho}\epsilon_i^\xi + H_i^\xi$
$\frac{D\widetilde{u_i''Y''}}{Dt} =$	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(C_Y\frac{k}{\epsilon}\overline{\rho u_j'' u_m''}\frac{\partial \widetilde{u_i''Y''}}{\partial x_m}\right)$	$-\overline{\rho u_j'' u_i''}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_j} - \overline{\rho u_j'' Y''}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} - \overline{\rho}\epsilon_i^Y + H_i^Y + \overline{u_i''\omega}$
$\frac{D\widetilde{u_i''u_m''}}{Dt} =$	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(C_s\frac{k}{\epsilon}\overline{\rho u_j'' u_l''}\frac{\partial \widetilde{u_i''u_m''}}{\partial x_l}\right)$	$-\overline{\rho u_j'' u_i''}\frac{\partial \widetilde{u_m}}{\partial x_j} - \overline{\rho u_j'' u_m''}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} - \epsilon_{im} + H_{im}$
$\frac{D\epsilon}{Dt} =$	$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(C_\epsilon\frac{k}{\epsilon}\overline{\rho u_j'' u_m''}\frac{\partial \epsilon}{\partial x_m}\right)$	$-C_{\epsilon 1}\frac{\epsilon}{k}\overline{\rho u_j'' u_i''}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{\epsilon 2}\overline{\rho}\frac{\epsilon^2}{k} + C_{\epsilon 3}\frac{\epsilon}{k}\frac{H_{ii}}{2}$
si $\rho = cte$: $\epsilon_i^\xi = \epsilon_i^Y = 0$ $H_i^\xi = -C_{\xi 1}\frac{\epsilon}{k}\overline{\rho u_i''\xi} - C_{\xi 2}\overline{\rho u_j''\xi}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j}$ $H_i^Y =?$ $\overline{u_i''\omega} =?$ $\epsilon_{im} = \frac{2}{3}\epsilon\delta_{im}$ $H_{im} = C_1\left(\overline{\rho}\epsilon_{im} - \frac{\widetilde{u_i''u_m''}}{2k}\overline{\rho}\epsilon_{ll}\right) - C_2\left(P_{im} - \frac{\widetilde{u_i''u_m''}}{2k}P_{ll}\right)$ si ρ varie : $\epsilon_i^\xi =?$ $\epsilon_i^Y =?$ $H_i^\xi =?$ $H_i^Y =?$ $\overline{u_i''\omega} =?$ $\epsilon_{im} =?$ $H_{im} =?$		

TAB. 1.3 – Equations à résoudre et termes à modéliser

Chapitre 2

Modélisation de la Combustion Turbulente

L'un des objectifs des modèles de combustion turbulente est de déterminer le taux de production moyen $\overline{\omega}$ engendré par les réactions chimiques. Du fait de la forte non linéarité des taux de production (ou de destruction) des différentes espèces, l'estimation du taux de production chimique moyen n'est pas directe et doit être basée sur une approche phénoménologique. L'analyse décrite au cours du chapitre précédent a conduit à une classification des régimes de combustion et a permis de développer des modèles adaptés à chaque régime de combustion. Ces différents modèles ont chacun une approche physique du problème de combustion turbulente qui leur est propre.

Dans ce chapitre, nous utiliserons une variable d'avancement de la réaction c définie de telle sorte qu'elle soit nulle ($c \equiv 0$) dans les gaz frais et égale à l'unité ($c \equiv 1$) dans les gaz complètement brûlés. La fraction de mélange ξ introduite ici est nulle ($\xi \equiv 0$) dans l'oxydant pur et égale à l'unité ($\xi \equiv 1$) dans le combustible pur.

2.1 Approches de Modélisation

Les trois principales approches utilisées pour décrire les flammes turbulentes sont présentées sur la figure (2.1) d'après l'article de revue de Veynante et Vervisch [93].

L'approche basée sur une analyse géométrique de la flamme décrit cette dernière

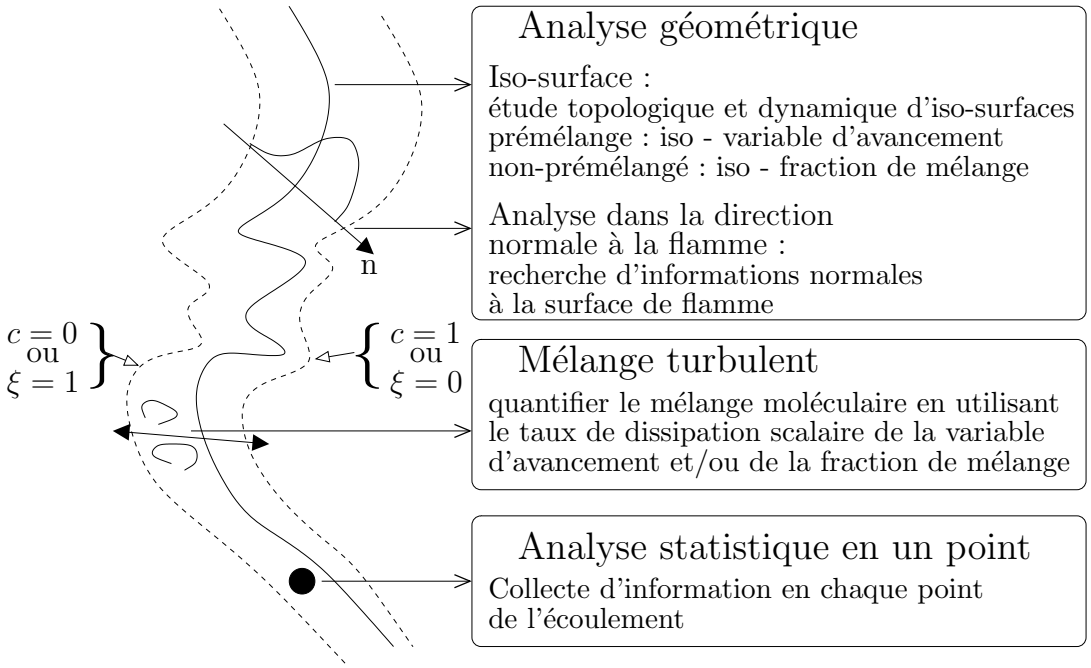


FIG. 2.1 – Trois types d'analyses des flammes turbulentes prémélangées ou non prémélangées, d'après Veynante et Vervisch [93]

comme une surface. Cette analyse est généralement utilisée avec une hypothèse de flammelettes (flammes plissées), ce qui permet à partir des propriétés physiques et dynamiques d'une isosurface (c ou ξ) de déterminer le champ scalaire correspondant. La flamme est alors considérée comme une interface séparant les gaz frais des gaz brûlés (ou le combustible de l'oxydant). Il existe essentiellement deux méthodes de calcul, basées sur cette approche. La première consiste à dériver une équation de transport d'une iso-surface, comme par exemple l'équation G [39]. La seconde utilise le concept de densité de surface de flamme initialement proposé par Marble et Broadwell en 1978 [55]. La densité de surface de flamme, notée Σ, mesure la surface de la flamme disponible localement par unité de volume. Cette quantité est directement reliée au taux de réaction chimique moyen :

$$\overline{\omega_i} = \Theta_i \Sigma \tag{2.1}$$

Θ_i est le taux de production chimique local moyenné le long de la direction normale à la flamme. Si on considère que les flammes sont juste plissées alors Θ_i peut être estimé à partir du calcul d'une flamme laminaire. L'avantage de ce type d'approche est de découpler

la description chimique de la flamme (modèle local pour Θ_i) de l'interaction de la flamme avec la turbulence (Σ).

Le taux de réaction chimique moyen peut également être estimé en cherchant à quantifier précisément le mélange que la turbulence engendre entre les gaz frais et les gaz brûlés ou entre le combustible et l'oxydant. Les termes qui représentent ce mélange sont les termes de dissipation scalaire ϵ_c, ϵ_ξ qui apparaissent dans les équations pour les variances $\widetilde{c''^2}$ et $\widetilde{\xi''^2}$. On montre facilement, dans le cas de flammes prémélangées plissées, qu'une relation algébrique existe entre le taux de dissipation ϵ_c et le taux de réaction chimique moyen $\overline{\omega_c}$ et le terme $\overline{c''\omega_c}$ [57]. Dans le cas de flammes non prémélangées, comme le combustible et l'oxydant doivent se mélanger pour réagir, le taux de dissipation ϵ_ξ joue également un rôle essentiel. La réaction chimique n'agit pas directement sur ce taux de dissipation scalaire ϵ_ξ mais indirectement par le biais des variations de masse volumique. Les taux de dissipation scalaire ϵ_c et ϵ_ξ sont des paramètres clés pour la modélisation de la combustion turbulente. Quelle que soit l'approche physique utilisée les taux de dissipation scalaire interviennent directement ou indirectement dans les modèles. Certaines méthodes proposent d'ailleurs de résoudre directement des équations de transport pour ces quantités [36, 53, 59].

Les propriétés statistiques des champs scalaires, en un point de l'écoulement (moyennes, variances ...), peuvent être déduites de la fonction densité de probabilité (PDF). Contrairement à l'analyse géométrique qui considère souvent la flamme comme une interface, l'utilisation d'une méthode de PDF permet d'obtenir les propriétés statistiques d'états intermédiaires c'est-à-dire dans le front de flamme. La probabilité que la variable c^* ait une valeur comprise entre c et $c + dc^*$ au point x et au temps t est $P(c)dc^*$. Les quantités statistiques peuvent alors être exprimées à l'aide de la PDF, par exemple :

$$\overline{c} = \int_0^1 cP(c;x,t)dc \qquad \overline{c'^2} = \int_0^1 (c-\overline{c})^2 P(c;x,t)dc \tag{2.2}$$

La PDF doit être normalisée, ce qui permet d'écrire la relation suivante :

$$\int_0^1 P(c;x,t)dc = 1 \tag{2.3}$$

Lorsque plusieurs variables sont nécessaires pour décrire la structure de la flamme, une PDF jointe doit être utilisée. Si les variables sont la fraction de mélange et l'avancement

de la réaction, la PDF s'écrit $P(c,\xi;x,t)$. Une quantité statistique dont la valeur locale et instantanée est fonction de ces deux variables, comme par exemple le taux de réaction chimique moyen, s'écrit alors :

$$\overline{\omega_c} = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \int_0^1 \omega_c P(c,\xi;x,t) d\xi dc \tag{2.4}$$

Il peut être utile de décomposer la PDF jointe de deux variables en deux PDF de telle sorte que chaque PDF ne soit fonction que d'une variable. Ce procédé nécessite l'introduction d'une PDF conditionnée. La PDF $P(c,\xi;x,t)$ s'exprime alors de la façon suivante :

$$P(c,\xi;x,t) = P(c|\xi;x,t)P(\xi;x,t) \tag{2.5}$$

$P(\xi;x,t)$ est la PDF de la fraction de mélange indépendante de la variable d'avancement et $P(c|\xi;x,t)$ est la PDF de la variable d'avancement conditionnée en une valeur particulière de la fraction de mélange. Des moyennes statistiques conditionnées en chaque valeur particulière de la fraction de mélange peuvent être définies :

$$\overline{c|\xi} = \int_0^1 cP(c|\xi;x,t)dc \tag{2.6}$$

On peut noter que Klimenko et Bilger [40] ont proposé d'utiliser des fermetures pour ces moyennes ; cette démarche semble *a priori* bien adaptée pour les flammes non prémélangées puisque la réaction chimique se produit préférentiellement au voisinage des conditions stœchiométrique. Les modèles de turbulence basés sur l'approche statistique par les biais des PDF sont de deux types différents :

- Les modèles à PDF présumée
- Les modèles à PDF transportée

Le premier type de modèle consiste à présumer la forme de la PDF. Par exemple, si on présume que la PDF de la fraction de mélange a la forme d'une fonction béta (fonction définie par trois paramètres), la connaissance de la moyenne $\overline{\xi}$, la variance $\overline{\xi'^2}$ et la condition de normalisation de la PDF vont permettre de déterminer complètement la forme de la PDF $P(\xi;x,t)$ en chaque point de calcul. La résolution des équations pour la valeur moyenne $\overline{\xi}$ et la variance $\overline{\xi'^2}$ suffisent, via la PDF, à déterminer n'importe quelle quantité statistique dont la valeur locale et instantanée n'est fonction que de ξ.

Le second type de modélisation consiste à résoudre une équation de transport de la PDF

[31, 34]. Ces méthodes ont l'avantage de pouvoir prendre en compte précisément la chimie et donc d'être *a priori* applicable à tous les régimes de combustion. En particulier, tous les termes définis en un point, comme le taux de réaction chimique moyen, peuvent être calculés.

Lorsque la masse volumique varie, il est plus pratique d'utiliser une PDF définie au sens de Favre, c'est-à-dire pondérée par la masse volumique, soit $\widetilde{P}(c;x,t)$ telle que :

$$\widetilde{P}(c;x,t) = \frac{\rho P(c;x,t)}{\overline{\rho}} \tag{2.7}$$

Les trois approches de modélisation qui viennent d'être présentées ne sont pas si différentes et peuvent être reliées les unes aux autres. Ces concepts ayant été introduits, nous allons maintenant présenter une courte revue des modèles qui ont été proposés pour représenter les flammes turbulentes.

2.2 Prémélange Parfait et Chimie Infiniment Rapide

2.2.1 Modèle "Eddy Break-Up"

Nous considérons maintenant des prémélanges parfaits et l'extrême limite du régime des flammes plissées ou les phénomènes chimiques sont très rapides comparés aux phénomènes turbulents : $\tau_c << \tau_T$ et $\tau_c < \tau_K$. La zone de réaction est alors vue comme une collection de poches de gaz frais et de gaz brûlés séparées par des interfaces réactives. L'hypothèse sous-entendue par cette représentation est que le taux de réaction chimique des espèces ω_i est de l'ordre du nombre de Damköhler Da. Pourtant, le taux de réaction chimique moyen $\overline{\omega}_c$ doit, lui, rester fini ; il faut donc que la probabilité d'obtenir des gaz en cours de réaction $(0 < c < 1)$ soit d'ordre inverse du nombre de Damköhler $1/Da$. La PDF de c est alors principalement composée de deux pics de Dirac, là où ω_i est nul, c'est-à-dire dans les gaz frais $(c = 0)$ et dans les gaz brûlés $(c = 1)$. La turbulence va "casser" ces poches de gaz frais et de gaz brûlés et ainsi augmenter la densité de surface de flamme. Le taux de réaction chimique moyen est donc contrôlé par la turbulence. Les travaux de Spalding [87] ont abouti, après quelques modifications, à la relation suivante pour le taux

de réaction chimique moyen :

$$\overline{\omega}_c = C_{EBU}\ \overline{\rho}\ \frac{\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}{\tau_T} \tag{2.8}$$

Le modèle EBU a été très utilisé dans les codes de calcul industriel car il est très simple à mettre en œuvre puisqu'il ne nécessite aucune équation de transport supplémentaire. Le terme source $\overline{\omega}_c$ qui intervient dans l'équation de transport pour $\widetilde{c}$ n'est fonction que de quantités connues et ne dépend pas des caractéristiques chimiques de l'écoulement. Cet avantage est aussi un inconvénient car la seule façon de faire intervenir la chimie dans le modèle est d'ajuster la constante C_{EBU}. La formule (2.8) a été justifiée théoriquement plus tard par Bray et Moss [57] ce qui a permis de donner une interprétation physique à la constante C_{EBU}.

2.2.2 Modèle Bray-Moss-Libby

L'idée de base du formalisme du modèle BML a été proposée initialement en 1977 par Bray et Moss [57] et a depuis fait l'objet de nombreux travaux et améliorations par Bray, Moss et Libby puis par Bray, Champion et Libby, voir pour plus de détails [19]. On peut noter que des travaux similaires étaient conduits à la même époque à l'ONERA par R. Borghi.

L'idée consiste à présumer la forme de la PDF de la variable c comme une somme de gaz frais, de gaz brûlés et de gaz en train de brûler :

$$\widetilde{P}(c;x,t) = \underbrace{\alpha(x,t)\delta(c)}_{\text{gaz frais}} + \underbrace{\beta(x,t)\delta(1-c)}_{\text{gaz brûlés}} + \underbrace{\gamma(x,t)f(c;x,t)}_{\text{gaz en cours de réaction}} \tag{2.9}$$

Pour des raisons de simplicité, on utilise une PDF de Favre. α, β et γ sont respectivement les probabilités de trouver des gaz frais, des gaz brûlés et des gaz en train de brûler. $\delta(c)$ et $\delta(1-c)$ sont respectivement les distributions de Dirac correspondant aux gaz frais et aux gaz brûlés. La normalisation de la PDF conduit à :

$$\alpha + \beta + \gamma = 1 \tag{2.10}$$

La PDF permet alors d'exprimer le terme source moyen de la variable c :

$$\overline{\omega}_c(x,t) = \overline{\rho}\gamma(x,t)\int_0^1 \frac{\omega(c)}{\rho} f(c;x,t)dc \tag{2.11}$$

Afin de pouvoir calculer ce terme source moyen, les paramètres de la PDF α, β, γ et la fonction f doivent d'abord être déterminés.

On considère maintenant le régime des flammes plissées, c'est-à-dire que les nombres de Reynolds et de Damköler sont grands. Dans ce régime, en un point donné de la flamme moyenne, on observe une intermittence de gaz frais et de gaz brûlés ; la PDF de c est alors quasiment bimodale ($\gamma << \alpha, \beta$), elle s'écrit :

$$\widetilde{P}(c;x,t) = \alpha(x,t)\delta(c) + \beta(x,t)\delta(1-c) + \mathcal{O}(1/Da) \tag{2.12}$$

La normalisation de la PDF et l'expression de $\widetilde{c}$ permettent de déterminer les paramètres α et β :

$$\widetilde{c} = \int_0^1 c\widetilde{P}(c;x,t)dc = \beta \qquad \text{et} \qquad \alpha = 1-\beta \tag{2.13}$$

La masse volumique moyenne est calculée à partir de l'équation d'état (1.16) :

$$\begin{aligned} \overline{\rho}\widetilde{T^*} &= \rho_r T_r^* \qquad \text{et} \qquad \widetilde{T^*} = \alpha T_r^* + \beta T_p^* = (1-\widetilde{c})T_r^* + \widetilde{c}T_p^* \\ \overline{\rho} &= \frac{\rho_r}{1+\tau\widetilde{c}} \qquad \text{avec} \qquad \tau = \frac{T_p^*}{T_r^*} - 1 = \frac{\rho_r}{\rho_p} - 1 \end{aligned} \tag{2.14}$$

où τ est le facteur d'expansion thermique.
Comme la connaissance de $\widetilde{c}$ suffit à définir complètement la forme de la PDF, alors n'importe quelle quantité statistique peut être calculée en fonction de $\widetilde{c}$ seulement ; notamment la variance :

$$\widetilde{c''^2} = \alpha\widetilde{c}^2 + \beta\left(1-\widetilde{c}\right)^2 = \widetilde{c}(1-\widetilde{c}) \tag{2.15}$$

Cette valeur pour la variance correspond à la valeur physique maximale possible (bimodalité).
La PDF ne permet cependant pas de calculer le terme source moyen car l'équation (2.11) conduit à une forme indéterminée $\gamma \to 0$ et $\int_0^1 \omega(c)/\rho f(c;x,t)dc \to \infty$. Cependant, on peut démontrer (cf annexe A) que dans ce cas limite, le terme source moyen est proportionnel à la dissipation scalaire. En dérivant une équation de transport pour la variance ($\widetilde{c}(1-\widetilde{c})$), on obtient :

$$-2\overline{\rho D\frac{\partial c}{\partial x_k}\frac{\partial c}{\partial x_k}} = \overline{\omega}_c - 2\overline{c\omega}_c \tag{2.16}$$

En posant $\overline{\rho}\epsilon_c = 2\overline{\rho D(\partial c''/\partial x_k)^2}$ et $c_m = \overline{c\omega}_c/\overline{\omega}_c$, le terme source moyen s'exprime, en supposant un nombre de Reynolds élevé, de la façon suivante :

$$\overline{\omega}_c = \frac{\overline{\rho}\epsilon_c}{(2c_m - 1)} \tag{2.17}$$

Le terme source moyen est donc fonction de la dissipation ϵ_c qui caractérise le mélange et de c_m qui caractérise la réaction chimique. La valeur de c_m est un paramètre du modèle qui est déterminé par la structure locale de la flamme. La dissipation peut être résolue par une équation de transport ou par un modèle algébrique de relaxation linéaire, Eq. (1.48). Dans ce dernier cas, on obtient :

$$\overline{\omega}_c = \frac{1}{(2c_m - 1)}\frac{\overline{\rho c''2}}{R_c\tau_T} = \frac{1}{(2c_m - 1)}\overline{\rho}\frac{\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}{R_c\tau_T} \tag{2.18}$$

On retrouve bien l'expression du modèle EBU et la constante C_{EBU} s'identifie à :

$$C_{EBU} = 1/R_c(2c_m - 1) \tag{2.19}$$

L'expression du taux de réaction chimique moyen est cette fois obtenue de façon analytique avec des hypothèses bien définies et une interprétation physique des constantes du modèle.

2.2.3 Modèles à une Equation de Transport

Les approches décrites précédemment qui considèrent la densité de surface de flamme ou le taux de dissipation scalaire font parties de cette catégorie de modèle. En effet, dans la limite d'une réaction infiniment rapide, le taux de réaction moyen peut être exprimé comme une fonction de la dissipation scalaire ou de la densité de surface de flamme.

Une équation de transport pour le taux de dissipation d'un scalaire réactif a été proposée par Mantel et Borghi [53] et modifiée récemment par Mura et Borghi [59] dans le cas où les réactions chimiques sont très rapides :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\overline{\rho}\epsilon_Y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}(\widetilde{u}_i - \widetilde{U}_{L_i})\epsilon_Y\right) &= \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\rho}D_T\frac{\partial\epsilon_Y}{\partial x_i}\right) \\ &+ C_{P_Y}\,\overline{\rho}\,D_T\frac{\epsilon}{k}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_i}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_i} + C_{P_U}\,\overline{\rho}\,\nu_T\frac{\epsilon_Y}{k}\frac{\partial\widetilde{u}_i}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{u}_i}{\partial x_k} \\ &+ \overline{\rho}\alpha\frac{\epsilon}{k}\epsilon_Y - \frac{2}{3}\overline{\rho}\beta\frac{\epsilon_Y^2}{\widetilde{Y''2}}\left(\frac{3}{2} - C_{\epsilon_Y}\frac{S_L}{k^{1/2}}\right)\end{aligned} \tag{2.20}$$

où $\widetilde{U}_{L_i}$ est la moyenne des vitesse de propagation des flammes locales, exprimé de la façon suivante :

$$\widetilde{U}_{L_i} = \frac{S_L}{1 + u''/S_L} \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_i} / \sqrt{\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_j} \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_j}} \tag{2.21}$$

Cependant, cette équation a été dérivée dans le cas où la masse volumique est constante et reste difficile à appliquer à des configurations réelles de combustion. Des travaux plus récents [88, 62] ont permis d'obtenir une équation de transport pour la dissipation en prenant en compte les effets de variations de masse volumique. Cette équation, relativement complexe nécessite maintenant un effort particulier pour la modélisation de ses différents termes de production.

La dérivation d'une équation de transport pour la densité de surface de flamme conduit à un résultat similaire, voir par exemple [32]. La modélisation des différents termes de production permet d'aboutir à :

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\widetilde{u}_i \Sigma\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_T \frac{\partial \Sigma}{\partial x_i}\right) + A_{ik} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_i} \Sigma + \alpha_0 \Gamma_k \frac{\epsilon}{k} \Sigma - \beta_0 \frac{S_L + C\sqrt{k}}{\widetilde{c}(1-\widetilde{c})} \Sigma^2 \tag{2.22}$$

où A_{ik} est un tenseur lié à l'étirement moyen des flammes locales, α_0, β_0 et C des constantes du modèle et Γ_k est la fonction d'efficacité du modèle ITNFS (Intermittent Turbulence Net Flame Stretch) [56]. Cette fonction d'efficacité permet de prendre en compte les phénomènes d'étirement et d'extinction du front de flamme provoqués par les structures turbulentes de l'écoulement.

2.3 Prémélange Parfait et Temps Chimique Fini

2.3.1 PDF Calculée

Le premier problème rencontré lorsque le temps chimique est considéré non nul est lié à la définition de ce temps caractéristique. En effet, le schéma cinétique réactionnel ne conduit pas à un seul mais à plusieurs temps caractéristiques chimiques qu'il faudrait tous comparer aux temps caractéristiques de la turbulence. Dans notre cas, comme nous considérons que les nombres de Lewis sont tous égaux à un, que le milieu est adiabatique et que la combustion peut être représentée par une réaction globale alors un seul temps chimique est considéré et une seule variable est nécessaire pour caractériser la combustion.

Si ces approximations sont réalistes, alors la PDF du degré d'avancement de la réaction c suffit à calculer le taux de réaction chimique moyen.

Les travaux menés par O'brien et Dopazo [31] puis par Pope [73] aux Etats-Unis et par Frost [34] en URSS ont, les premiers, conduit à l'écriture d'une équation de bilan qui permet le calcul direct de la PDF $\widetilde{P}(c)$:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\widetilde{P}(c)\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{P}(c)\right)=&\frac{\partial}{\partial x_k}\left(-\overline{\rho}\langle u_k''|c\rangle\widetilde{P}(c)\right)\\&-\frac{\partial}{\partial c}\left(\left\langle\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}D\frac{\partial c}{\partial x_k}\right)\mid c\right\rangle\widetilde{P}(c)+\overline{\omega}_c\widetilde{P}(c)\right)\end{aligned}\tag{2.23}$$

Le terme lié à la réaction chimique $\overline{\omega}_c\widetilde{P}(c)$ ne pose pas de problème de fermeture particulier. En revanche les termes qui font intervenir les moyennes conditionnées $\overline{\rho}\langle u_k''|c\rangle\widetilde{P}(c)$ et $\left\langle\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}D\frac{\partial c}{\partial x_k}\right)\mid c\right\rangle\widetilde{P}(c)$, nécessitent un modèle. Ces deux derniers termes représentent respectivement le transport turbulent et le mélange à petite échelle (terme de micromélange). Le problème est d'évaluer le micromélange en tenant compte de l'existence d'une structure de flammelette, voir par exemple [60, 72]. La résolution de cette équation de PDF reste néanmoins délicate à mettre en œuvre. De plus, même si elle permet de prendre en compte des cinétiques chimiques détaillées, les temps de calcul correspondants restent prohibitifs pour des applications industrielles.

2.3.2 PDF Présumée

Lorsque le temps chimique n'est plus infiniment petit devant le temps caractéristique de la turbulence, la PDF de l'avancement de la réaction c ou de la température ne peut plus être considérée comme quasi bimodale et sa forme dépend de l'endroit considéré dans le flamme. La forme de la PDF doit passer d'un pic dans les gaz frais à un pic dans les gaz brûlés de façon continue. La variance $\widetilde{c''^2}$ doit également varier à la traversée de la flamme tout en restant inférieure à sa valeur maximale $\widetilde{c}(1-\widetilde{c})$, valeur pour laquelle la PDF est bimodale. On peut donc se donner une forme présumée de la PDF qui dépend d'un nombre fini de paramètres. Ces paramètres de la PDF sont calculés à partir des différents moments de la variable c. Si, par exemple, la forme de la PDF ne dépend que de trois paramètres, alors la valeur moyenne $\widetilde{c}$ (premier moment), la variance $\widetilde{c''^2}$ (second moment) et la condition de normalisation de la PDF suffisent à calculer ces paramètres.

Plusieurs formes de PDF définies par trois paramètres seulement ont déjà été utilisées ; par exemple celle proposée par Borghi et Dutoya [10] est composée d'un rectangle et de pics de Dirac ou celle utilisée par Bradley [15] est une fonction béta.
Pour déterminer la forme locale de ces PDF, les équations de transport pour la valeur moyenne $\widetilde{c}$ et la variance $\widetilde{c''^2}$ doivent être résolues. Dans ces équations les termes liés à la réaction chimique ne posent plus de problème puisque la PDF est connue, en revanche les termes de diffusion turbulente et les termes de dissipation scalaire sont toujours inconnus et nécessitent un effort particulier de modélisation. Ces derniers termes, peuvent être fermés en résolvant des équations de transport pour les flux turbulents et la dissipation scalaire ou en utilisant des modèles algébriques pour ces quantités (loi gradient et relaxation linéaire de la variance).

2.4 Prémélange Partiel

On parle de prémélange partiel lorsque la richesse de l'écoulement considéré est variable mais que la structure de la flamme turbulente conserve sensiblement la même structure qu'une flamme turbulente de prémélange. Autrement dit, les flammes locales se propagent, ce ne sont pas des flammes de diffusion, mais elles se propagent dans des gradients de richesse. Cette représentation des flammes de prémélange partiel permet d'utiliser des modèles similaires à ceux utilisés pour les flammes de prémélange homogène mais étendus à des cas où la richesse varie. Par exemple, le modèle BML a été étendu pour prendre en compte des effets de dilution par Lahjaily et al. [44] puis par Bigot et al. [9]. Un modèle basé sur l'équation G adapté au prémélange partiel a été proposé par Müller et al. [58] et des travaux encore plus anciens basés sur le modèle de densité de surface de flamme ont permis de modéliser des configurations où les flammes peuvent être prémélangés ou non prémélangés [91].

Les phénomènes, induits par les variations de richesse, que l'on cherche à représenter sont de deux natures différentes.
Tout d'abord, la température adiabatique de combustion est fortement dépendante de la richesse. Ainsi, le taux d'expansion thermique varie dans l'écoulement en fonction de sa richesse locale, ce qui a une influence importante sur le champ de vitesse et complique

fortement la définition de la variable d'avancement c. Cette variable est particulièrement difficile à définir si à la fois des zones riches et des zones pauvres sont présentes dans l'écoulement. Cependant, l'équation de transport pour la variable c a l'avantage de faire apparaître naturellement des termes liés aux dissipations des scalaires [20].
Les hétérogénéités de richesse provoquent également des variations importantes du temps caractéristique chimique. Des richesses trop éloignées de la stœchiométrie peuvent même conduire à des extinctions. Le régime de combustion est donc très difficile à définir puisque des flammelettes peuvent coexister avec des flammes épaissies localement.

Pour prendre en compte précisément ces différents effets, le mélange du combustible et de l'oxydant (c'est-à-dire la richesse) doit être calculé à l'aide de la fraction de mélange. Les modèles à chimie infiniment rapide présentés dans les paragraphes précédents peuvent être étendus à des configurations où la richesse est variable [44]. Dans ce cas, on considère que la combustion a lieu en régime de flammelettes quelle que soit la fraction de mélange locale. Les fluctuations de fraction de mélange sont alors dé-corrélées des fluctuations de la variable d'avancement, on peut alors faire l'hypothèse que $\widetilde{\xi'' c''} = 0$. Cependant ces modèles ne permettent pas de prendre en compte de façon satisfaisante les effets dus aux variations du temps caractéristique chimique. Plus récemment les travaux de Bigot et al. [8] ont conduit à la résolution d'une équation pour la corrélation croisée $\widetilde{\xi'' c''}$.

Toutefois, compte tenu de ces difficultés, les méthodes de PDF paraissent plus appropriées pour le calcul des flammes turbulentes partiellement prémélangées. La difficulté est alors de présumer (ou de calculer) la PDF jointe de fraction de mélange et d'avancement de la réaction.

2.5 Les Modèle Libby-Williams et LW-P

Libby et Williams en 2000 [52] ont proposé un modèle (LW) applicable à la combustion turbulente en prémélange partiel basé sur une PDF présumée et sur une thermochimie fonction de deux variables, la fraction massique de combustible Y et la fraction de mélange ξ. Les deux variables utilisées (Y,ξ) permettent de déterminer la composition du mélange en considérant les hypothèses déjà introduites au chapitre 1, hypothèses de Schvab-zeldovitch. La PDF jointe des deux variables Y et ξ est composée de deux pics de

Dirac :

$$\widetilde{P}(\xi, Y) = \alpha\delta(Y - Y_1)\,\delta(\xi - \xi_1) + (1-\alpha)\,\delta(Y - Y_2)\,\delta(\xi - \xi_2) \tag{2.24}$$

La PDF est donc définie par cinq paramètres Y_1, ξ_1, Y_2, ξ_2 et α. Si les premiers et seconds moments des scalaires sont résolus, les positions des pics de Dirac peuvent être obtenus par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \widetilde{\xi} - \left(\frac{(1-\alpha)}{\alpha}\,.\,(\overline{\rho\xi''^2})/\overline{\rho}\right)^{1/2} & Y_1 &= \widetilde{Y} - \left(\frac{(1-\alpha)}{\alpha}\,.\,(\overline{\rho Y''^2})/\overline{\rho}\right)^{1/2} \\ \xi_2 &= \widetilde{\xi} + \left(\frac{\alpha}{(1-\alpha)}\,.\,(\overline{\rho\xi''^2})/\overline{\rho}\right)^{1/2} & Y_2 &= \widetilde{Y} + \left(\frac{\alpha}{(1-\alpha)}\,.\,(\overline{\rho Y''^2})/\overline{\rho}\right)^{1/2} \end{aligned} \tag{2.25}$$

La seule inconnue restante est l'amplitude α.

On peut démontrer facilement que la droite support des deux pics de Dirac (D) $\left(Y - \widetilde{Y}\right) / \left(\xi - \widetilde{\xi}\right) = \pm d$ a une pente d fonction des variances des scalaires :

$$d = \left(\frac{\overline{\rho Y''^2}}{\overline{\rho\xi''^2}}\right)^{1/2} \tag{2.26}$$

En introduisant l'abscisse g le long de la droite D, les positions des pics s'exprime alors :

$$g_1 = \widetilde{g} - \left(\frac{(1-\alpha)}{\alpha}\,.\,(\overline{\rho g''^2})/\overline{\rho}\right)^{1/2} \qquad g_2 = \widetilde{g} + \left(\frac{\alpha}{(1-\alpha)}\,.\,(\overline{\rho g''^2})/\overline{\rho}\right)^{1/2} \tag{2.27}$$

les moments de g sont définis de la façon suivante : $\widetilde{g} = 0$ et $\overline{\rho g''^2} = \overline{\rho\xi''^2} + \overline{\rho Y_f''^2}$.
La figure 2.2 représente un exemple des pics de Dirac dans l'espace des compositions d'un prémélange partiel pauvre. Pour déterminer l'amplitude α, Libby et Williams ont proposé de résoudre une équation de transport pour la corrélation croisée $\overline{\rho Y''\xi''}$. Cependant, cette proposition n'est pas réalisable car la PDF à deux pics de Dirac impose une relation de dépendance entre la covariance $\overline{\rho Y''\xi''}$ et les variances $\overline{\rho\xi''^2}$,$\overline{\rho Y''^2}$ [75] :

$$\overline{\rho Y''\xi''} = \sqrt{\overline{\rho\xi''^2}\,.\,\overline{\rho Y''^2}} \tag{2.28}$$

Ribert et al. [75] ont alors proposé de déterminer l'amplitude α en considérant que la valeur de α obtenue lorsque les pics sont à leur position extrême sur la droite D est valable quelle que soient les positions des pics :

$$\alpha = \frac{g_{max} - \widetilde{g}}{g_{max} - g_{min}} \tag{2.29}$$

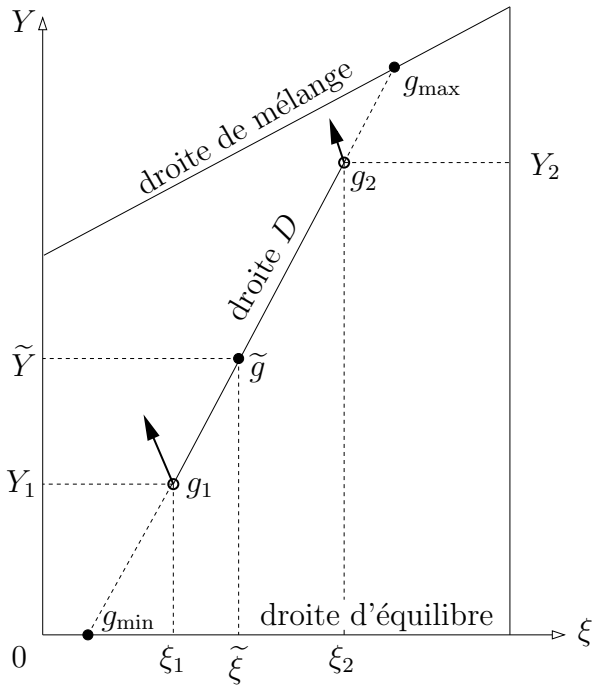


FIG. 2.2 – Postions des pics de Dirac dans l'espace des compositions

Les valeurs limites de g, g_{max} et g_{min}, sont déterminées par les différentes droites de l'espace des compositions, voir figure 2.2.

L'analyse introduite par Libby et Williams puis le modèle LW-P à deux pics de Dirac utilisé par Ribert et al., sont à l'origine du modèle LW-P à quatre pics de Dirac détaillé dans la seconde partie de ce mémoire.

2.6 Conclusions

Nous avons présenté les différentes approches possibles pour calculer le taux de réaction chimique moyen. Quelle que soit l'approche du problème utilisée ce taux de réaction chimique moyen est directement ou indirectement dépendant du mélange turbulent. Ce mélange turbulent est quantifié par le biais de la dissipation scalaire ou du terme de micromélange dans l'équation de PDF.

Le modèle que nous décrivons dans la seconde partie de ce mémoire est un développement du modèle LW-P décrit succinctement au paragraphe précédent. Il utilise une approche de PDF présumée qui permet de prendre en compte un temps chimique fini sans utiliser une

équation pour la PDF. Le taux de réaction chimique moyen est alors facilement calculé mais un modèle algébrique pour la dissipation scalaire est nécessaire puisque l'équation pour ce terme n'est pas résolue.

Par ailleurs, les modèles qui viennent d'être décrits dans ce chapitre cherchent à représenter l'effet de la turbulence sur la flamme mais ne prennent pas en compte l'effet inverse de la flamme sur la turbulence. Cet effet qui peut être représenté par la modification de la forme des flux turbulents est tout autant important car la turbulence, modifiée par la présence de la flamme, va ensuite agir sur le mélange des espèces.

Chapitre 3

Transports Turbulents Scalaires

Les équations moyennes pour la fraction massique de combustible (1.25) et pour la fraction de mélange (1.24) font apparaître les flux scalaires turbulents $\widetilde{u_i''Y''}$ et $\widetilde{u_i''\xi''}$. L'équation moyenne pour la variable d'avancement c fait aussi apparaître le flux de la variable d'avancement $\widetilde{u_i''c''}$. Comme cela a été rappelé, ces termes sont souvent modélisés en utilisant une hypothèse de "transport gradient" qui conduit aux relations (1.38) ou, pour la variable d'avancement c, à :

$$\widetilde{u_i''c''} = -D_T \frac{\partial \widetilde{c}}{\partial x_i} \tag{3.1}$$

Des études aussi bien théoriques qu'expérimentales [16, 51, 86] ont montré que les flux turbulents $\widetilde{u_i''c''}$ peuvent avoir, dans certaines régions de l'écoulement, le même signe que le gradient de la variable d'avancement moyenne $\partial\widetilde{c}/\partial x_i$. Dans ce cas, il est évident que les expressions (1.38) et (3.1) ne sont plus applicables ; on parle alors de transport turbulent à **contre-gradient** ou de façon plus générale de transport turbulent non-gradient.

3.1 Transports Gradient et Contre-Gradient

Ce phénomène de transport turbulent à contre-gradient peut-être expliqué théoriquement en utilisant l'approche de Bray, Moss et Libby décrit au paragraphe 2.2.2. La zone de réaction est alors composée de gaz frais et de gaz brûlés séparés par des flammelettes considérées infiniment minces. L'intermittence de gaz frais et de gaz brûlés conduit à utiliser des moyennes conditionnées pour ces deux états $c = 0$ et $c = 1$. La PDF jointe de

vitesse et d'avancement s'écrit de façon analogue à la relation (2.12) :

$$\widetilde{P}(u_i, c; x, t) = \alpha(x,t)\delta(c)P(u_i|c=0) + \beta(x,t)\delta(1-c)P(u_i|c=1) + \mathcal{O}(1/Da) \qquad (3.2)$$

Les composantes de la vitesse $\widetilde{u_i}$ peuvent alors être décomposées de la manière suivante :

$$\widetilde{u_i} = \alpha\overline{u_i}_r + \beta\overline{u_i}_p = (1-\widetilde{c})\overline{u_i}_r + \widetilde{c}\overline{u_i}_p \qquad (3.3)$$

$\overline{u_i}_r$ et $\overline{u_i}_p$ sont respectivement les composantes de la vitesse moyenne conditionnées dans les gaz frais et dans les gaz brûlés :

$$\overline{u_i}_r = \int u_i P(u_i|c=0)du_i \qquad \text{et} \qquad \overline{u_i}_p = \int u_i P(u_i|c=1)du_i \qquad (3.4)$$

Cette PDF jointe permet d'exprimer les flux turbulents de c :

$$\widetilde{u_i''c''} = \widetilde{c}(1-\widetilde{c})(\overline{u_i}_p - \overline{u_i}_r) \qquad (3.5)$$

Considérons maintenant un écoulement monodimensionnel turbulent réactif normal au front de flamme moyen comme le représente la figure 3.1.

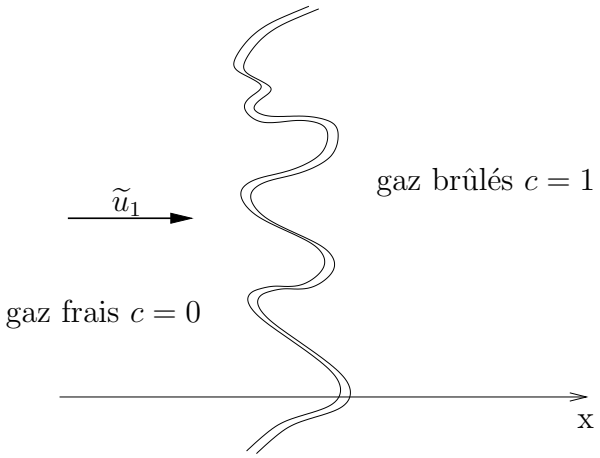


FIG. 3.1 – Représentation d'une flamme turbulente

La variable d'avancement moyenne $\widetilde{c}$ augmente à la traversée de la flamme moyenne ($\widetilde{c} = 0 \rightarrow 1$), le gradient $\partial\widetilde{c}/\partial x$ est donc positif et la relation (3.1) conduit donc à un signe négatif pour le flux turbulent : $\widetilde{u''c''} < 0$.

Du fait de l'expansion thermique $\rho_p = \rho_r/(1+\tau)$ et de la conservation de la masse à la traversée du front de flamme local $\rho_p\overline{u_p} = \rho_r\overline{u_r}$, on peut écrire :

$$\overline{u_p} = (1+\tau)\overline{u_r} \qquad \text{donc} \qquad \overline{u_p} > \overline{u_r} \qquad (3.6)$$

La vitesse moyenne conditionnée dans les gaz brûlés est donc susceptible d'être plus importante que celle conditionnée dans les gaz frais, la relation (3.5) conduit donc à un signe positif pour le flux turbulent : $\widetilde{u''c''} > 0$.
Le modèle (3.1) fourni une valeur du flux turbulent opposée à celle obtenue par la relation (3.5), le transport turbulent est donc dans ce cas à contre-gradient.

Lorsque le facteur d'expansion thermique τ augmente, l'écart entre $\overline{u_i}_p$ et $\overline{u_i}_r$ augmente aussi ; le phénomène de transport turbulent à contre-gradient sera donc d'autant plus important que τ est élevé [54]. En revanche, à mesure que le rapport u'/S_L augmente la diffusion du scalaire redevient contrôlée par le mélange turbulent gradient. Cela a été confirmé par les simulations numériques directes [77, 90, 92]. Le nombre de Bray $N_B = \tau S_L/u'$ a ainsi été introduit dans le but de caractériser la transition d'un type de transport à un autre.

Le phénomène de transport turbulent à contre-gradient est lié à l'effet du gradient de pression à travers la flamme turbulente [16] qui a pour effet de convecter plus rapidement les poches de gaz légers (brûlés) que les poches de gaz lourds (frais). Dans beaucoup de configurations pratiques la combustion a lieu en milieu confiné, les gaz brûlés subissent donc une forte accélération qui entraîne un fort gradient de pression et peut encore augmenter l'effet du transport à contre-gradient [86].

Pour prendre en compte le transport turbulent à contre-gradient dans les simulations numériques, on peut soit utiliser un modèle algébrique permettant aux flux turbulents d'être du même signe que le gradient de $\widetilde{c}$, soit résoudre une équation de transport pour ce terme. Cette seconde proposition, plus générale, est retenue ici. L'équation des flux turbulents $\widetilde{u_i''c''}$ s'écrit de façon analogue à celle des flux turbulents de fraction massique de combustible Eq.(1.30) :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho u_i'' c''}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\widetilde{u}_k \overline{\rho u_i'' c''}\right) = D_i^c + P_i^c - \overline{\rho}\epsilon_i^c + H_i^c + \psi_i^c \tag{3.7}$$

où :

$$
\begin{aligned}
D_i^c &= -\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho u_k'' u_i'' c''} - \overline{u_i'' \rho D \frac{\partial c''}{\partial x_k}} - \overline{c'' \tau_{ik}}\right) \\
P_i^c &= -\overline{\rho u_k'' u_i''}\frac{\partial \widetilde{c}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' c''}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_k} \\
\overline{\rho}\epsilon_i^c &= \overline{\tau_{ik}\frac{\partial c''}{\partial x_k}} + \overline{\rho D \frac{\partial c''}{\partial x_k}\frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} \\
H_i^c &= -\overline{c''\frac{\partial p}{\partial x_i}} \\
\psi_i^c &= \overline{u_i'' \omega}
\end{aligned}
\tag{3.8}
$$

Les termes de diffusion, de dissipation et le terme lié à la réaction chimique nécessitent des fermetures adaptées. Le terme de corrélation scalaire-pression est également très important car responsable du transport turbulent à contre-gradient. Un terme équivalent de corrélation vitesse-pression apparaît dans les équations des tensions de Reynolds et est responsable de la production de turbulence par la flamme.

Les travaux de modélisation du second ordre menés par Bailly et al. [3] pour des flammes turbulentes de prémélanges, puis ceux menés par Bigot et al. [9] pour des flammes turbulentes de prémélanges partiels et enfin les travaux de Domingo et Bray [30] concernant les termes de pression sont détaillés dans les paragraphes qui suivent.

3.2 Flammes Turbulentes de Prémélange

Le modèle, au second ordre complet, appliqué aux flammes turbulentes de prémélanges, proposé par Bailly et al. [3], est basé sur une approche de flammelettes. Le terme de réaction chimique moyen qui apparaît dans l'équation pour $\widetilde{c}$ est fermé en utilisant en particulier la fonction d'efficacité ITNFS introduite par Meneveau et Poinsot [56] :

$$
\overline{w}_c = \frac{1.5}{0.7}\overline{\rho}\Gamma_k \frac{\epsilon}{k}(1+\tau)\frac{\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}{1+\tau\widetilde{c}} \tag{3.9}
$$

où Γ_k est la fonction d'efficacité ITNFS qui représente l'étirement local imposé à la flamme par la turbulence.

Le terme de diffusion des flux turbulents D_i^c est fermé par un modèle gradient généralisé [24] :

$$
D_i^c = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(C_c \frac{k}{\epsilon}\overline{\rho u_k'' u_j''}\frac{\partial \widetilde{u_i'' c''}}{\partial x_j}\right) \tag{3.10}
$$

Les termes de production P_i^c ne nécessitent aucun modèle puisque les tensions de Reynolds sont résolues (second ordre complet).

Le terme lié à la réaction chimique est calculé algébriquement en utilisant l'hypothèse de flammelettes [50] :

$$\psi_i^c = \overline{u_i''\omega} = \frac{\overline{\rho u_i'' c''}}{\overline{\rho}\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}\overline{c''w}_c = \frac{\overline{\rho u_i'' c''}}{\overline{\rho}\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}(c_m - \widetilde{c})\overline{w}_c \tag{3.11}$$

où c_m est la constante du modèle BML introduite dans la relation (2.18). Cette constante est déterminée par la structure interne d'une flammelette et estimée à 0.75 dans ce cas.

Le modèle de dissipation des flux turbulents proposé par Bailly et al. [3], basé sur les travaux de Bray et al. [17], est le suivant :

$$\overline{\rho}\epsilon_i^c = K\frac{\overline{\rho u_i'' c''}}{\overline{\rho}\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}\overline{w}_c \tag{3.12}$$

où K est une constante égale à l'unité.

Le terme de corrélation c-pression H_i^c est décomposé en deux parties :

$$H_i^c = G_i^c + \Phi_i^c = -\overline{c''}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} - \overline{c''\frac{\partial p'}{\partial x_i}} \tag{3.13}$$

En utilisant l'approche BML, on peut écrire Φ_i^c comme étant la somme de trois contributions :

$$\Phi_i^c = -\overline{c''\frac{\partial p'}{\partial x_i}} = \alpha\left[\Phi_i^c\right]_r + \alpha\left[\Phi_i^c\right]_p + \gamma\alpha\left[\Phi_i^c\right]_f \tag{3.14}$$

Les deux premières contributions correspondent respectivement aux contributions de Φ_i^c dans les gaz frais et dans les gaz brûlés, la dernière correspond à la contribution de Φ_i^c due à la zone réactive (passages des flammelettes). Les contributions non réactives pour lesquelles la masse volumique est constante peuvent être fermées par un modèle classique, déjà introduit pour la fraction de mélange et la fraction massique de combustible (1.57), (1.58). Lorsque la contribution réactive est négligée, le terme Φ_i^c de corrélation avec les fluctuations de pression 3.14 s'écrit alors :

$$\Phi_i^c = -\overline{c''\frac{\partial p'}{\partial x_i}} = -C_{c1}\frac{\epsilon}{k}\overline{\rho u_i'' c''} - C_{c2}\overline{\rho u_j'' c''}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{c3}G_i^c \tag{3.15}$$

Dans le terme G_i^c, $\overline{c''}$ est directement relié aux quantités connues :

$$\overline{c''} = \frac{\overline{\rho}}{\rho_r}\tau\widetilde{c}(1-\widetilde{c}) \qquad \text{donc} \qquad G_i^c = -\overline{c''}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} = -\frac{\overline{\rho}}{\rho_r}\tau\widetilde{c}(1-\widetilde{c})\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} \tag{3.16}$$

Rappelons que $\overline{c''}$ est nul pour les écoulements à masse volumique constante.

Le terme de corrélation vitesse-pression H_{ij} qui apparaît dans les équations pour les tensions de Reynolds est modélisé en procédant de la même manière que pour le terme H_i^c. Il est tout d'abord décomposé en deux parties :

$$H_{ij} = G_{ij} + \Phi_{ij} = -\overline{u_i''}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} - \overline{u_j''}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} - \overline{u_i''\frac{\partial p'}{\partial x_j}} - \overline{u_j''\frac{\partial p'}{\partial x_i}} \tag{3.17}$$

La relation (1.54) permet de modéliser le terme Φ_{ij}. Dans le terme G_{ij}, $\overline{u_i''}$ est directement relié aux quantités connues :

$$\overline{u_i''} = \frac{\overline{\rho}}{\rho_r}\tau\widetilde{u_i''c''} \quad \text{donc} \quad G_{ij} = -\overline{u_i''}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} - \overline{u_j''}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} = -\frac{\overline{\rho}}{\rho_r}\tau\left(\widetilde{u_i''c''}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} + \widetilde{u_j''c''}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}\right) \tag{3.18}$$

Tous les termes des équations, nécessaires pour le calcul au second ordre, sont désormais fermés. Les phénomènes de diffusion à contre-gradient et de production de turbulence par la flamme sont pris en compte uniquement par les effets dus à la variation de masse volumique et du gradient de pression moyen via les termes G_i^c et G_{ij}. On sait maintenant que les termes Φ_i^c et Φ_{ij} sont également en partie responsables de la diffusion à contre-gradient et de la production de turbulence. Cependant, si on se contente d'utiliser les équations (3.15) et (1.54) alors on ne peut pas prendre en compte ces effets car ces modèles sont basés sur une hypothèse de masse volumique constante.

3.3 Flammes Turbulentes Partiellement Prémélangées

Le modèle de combustion turbulente du second ordre complet proposé par Bigot et al. [8, 9] est une extension des travaux de Bailly et al. pour des configurations où la richesse varie. La prise en compte des variations de richesse se base sur l'étude de Lahjaily et al. [44].

Les variations de richesse sont déterminées par la résolution d'une équation de transport pour la fraction de mélange moyenne (1.24) et d'une équation de transport pour la variance de fraction de mélange (1.32). Les flux turbulents du premier et du second moments de ce scalaire passif sont modélisés par les lois gradient (1.38) et (1.39). La dissipation de ce scalaire est fermée par un modèle de relaxation linéaire (1.48).
La fraction de mélange utilisée dans les travaux de Bigot et al. est notée ici f et n'est

pas définie de la même manière que la fraction de mélange introduite dans les parties précédentes de ce mémoire. Les indices (1) et (2) de l'équation 1.19 caractérisent respectivement, dans les travaux de Bigot et al., les valeurs minimum et maximum de f dans l'écoulement simulé. Pour simplifier les problèmes posés par les variations de richesse, le domaine de fluctuations de richesse est limité à des cas pauvres où les flammes peuvent se propager (richesse supérieure à la limite d'extinction). Par conséquent, la borne inférieure $f = 0$ correspond au mélange le plus pauvre de l'écoulement considéré dont la richesse doit être supérieure à la limite d'extinction et la borne supérieure $f = 1$ correspond au mélange le plus riche de l'écoulement considéré dont la richesse doit être inférieur à l'unité. De plus, les flammelettes sont considérées quasiment infiniment minces. Ces hypothèses permettent de définir relativement facilement la variable d'avancement c et permettent de négliger la corrélation croisée $\widetilde{c''f''}$ car la flamme étant infiniment mince, les fluctuations de c ne peuvent se produire en même temps que les fluctuations de f. Autrement dit, la flamme est si mince que la fraction de mélange reste constante à sa traversée. Cette dernière caractéristique permet d'exprimer le facteur d'expansion thermique moyen en fonction de la fraction de mélange moyenne uniquement.

$$\widetilde{\tau} = \tau_1 + (\tau_2 - \tau_1)\widetilde{f} \tag{3.19}$$

τ_1 et τ_2 sont respectivement les facteurs d'expansion thermique correspondant à des mélanges de richesse constante $f = 0$ et $f = 1$.

Le terme de réaction chimique moyen $\overline{\omega}_c$ est calculé par le modèle BML-ITNFS (3.9) où le taux d'expansion thermique et la fonction d'efficacité $\widetilde{\Gamma}_k$ dépendent de la fraction de mélange moyenne :

$$\overline{w}_c = \frac{1.5}{0.7}\overline{\rho}\widetilde{\Gamma}_k\frac{\epsilon}{k}(1+\widetilde{\tau})\frac{\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}{1+\widetilde{\tau}\widetilde{c}} \tag{3.20}$$

La fonction d'efficacité dépend aussi de la variance de fraction de mélange [56].

Les fermetures pour les flux turbulents $\widetilde{u_i''c''}$ utilisent la même approche que celle décrite dans le paragraphe précédent. La seule différence est que le taux d'expansion thermique est un taux d'expansion moyen qui dépend de la fraction de mélange moyenne. La fermeture du terme G_{ij} de l'équation pour les tensions de Reynolds est légèrement différente car le terme $\overline{u_i''}$ dépend aussi des flux turbulents de fraction de mélange, ce qui

conduit à :

$$G_{ij} = -\frac{\overline{\rho}}{\rho_r}\widetilde{\tau}\left(\widetilde{u_i''c''}\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_j} + \widetilde{u_j''c''}\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i}\right) - \frac{\overline{\rho}}{\rho_r}(\tau_2-\tau_1)\widetilde{c}\left(\widetilde{u_i''f''}\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_j} + \widetilde{u_j''f''}\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i}\right) \tag{3.21}$$

Les fermetures précédentes fournissent un modèle au second ordre complet de combustion turbulente partiellement prémélangée. Cependant, le domaine de richesse sur lequel ce modèle est applicable est borné à des cas pauvres où les flammes peuvent se propager. Les auteurs ont voulu élargir ce domaine pour prendre en compte des cas où la richesse est inférieure à la limite d'extinction. L'hypothèse $\widetilde{c''f''} = 0$ a donc été abandonnée au profit d'une équation de transport pour cette corrélation. L'expression du taux d'expansion thermique est ainsi modifiée :

$$\widetilde{\tau} = \frac{\tau_1 + (\tau_2-\tau_1)\widetilde{f}_p}{1 + (\tau_2-\tau_1)\widetilde{c''f''}} \tag{3.22}$$

où $\widetilde{f}_p$ est la fraction de mélange moyenne conditionnée dans les gaz brûlés.
Les fermetures des termes de pression G_{ij} et G_i^c s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} G_i^c &= -\overline{c''}\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i} = -\left[\frac{\overline{\rho}}{\rho_r}\widetilde{\tau}\widetilde{c}(1-\widetilde{c}) + \frac{\overline{\rho}}{\rho_r}(\tau_2-\tau_1)(1-\widetilde{c})\widetilde{c''f''}\right]\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i} \\ G_{ij} &= -\frac{\overline{\rho}}{\rho_r}\widetilde{\tau}\left(\widetilde{u_i''c''}\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_j} + \widetilde{u_j''c''}\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i}\right) \\ &\quad -\frac{\overline{\rho}}{\rho_r}(\tau_2-\tau_1)\left((\widetilde{u_i''f''}\widetilde{c} + \widetilde{u_i''f''c''})\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_j} + (\widetilde{u_j''f''}\widetilde{c} + \widetilde{u_j''f''c''})\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i}\right) \end{aligned} \tag{3.23}$$

Les corrélations triples $\widetilde{u_i''f''c''}$ et $\widetilde{u_j''f''c''}$ sont modélisés par une fermeture gradient.

Il est important de noter que $\widetilde{c''f''} \neq 0$ correspond nécessairement à une hypothèse de temps chimique fini : $\widetilde{c''f''}$ est différent de zéro lorsque les fluctuations de f sont possibles dans la flamme, donc quand cette dernière a une épaisseur non négligeable. Dans le modèle proposé par Bigot et al., le temps chimique est pris en compte par l'intermédiaire de la fonction d'efficacité $\widetilde{\Gamma_k}$.

3.4 Modélisation des Fluctuations de Pression

Les modèles de fermeture des termes de fluctuations de pression Φ_i^c et Φ_{ij}, utilisés dans les travaux de Bailly et al. [3] et Bigot et al. [9], sont des extensions en moyenne de Favre de

ceux établis pour les écoulements de fluides à masse volumique constante [46, 64, 84]. Dans les analyses faites par ces différents auteurs, la masse volumique est considérée constante, ce qui permet de négliger la trace Φ_{kk}. Le modèle (3.15) pour le terme Φ_i^c est obtenu par analogie avec l'analyse qui a conduit à la relation (1.54) en faisant apparaître un terme "lent" dit de retour à l'isotropie, un terme rapide d'isotropisation de la production et un terme d'isotropisation de G_i^c.

La plupart des auteurs développant des modèles de combustion turbulente ont soit utilisé ces fermetures adaptées aux écoulements non réactifs [3, 9, 73] soit tout simplement négligé ces termes de fluctuations de pression [16]. Cependant, comme l'ont montré des simulations numériques directes de flammes turbulentes [77, 90, 92], aucune de ces deux stratégies n'est satisfaisante.

Une proposition récente de Domingo et Bray [30] a conduit à une fermeture originale pour les deux termes de fluctuations de pression Φ_i^c et Φ_{ij} dans une flamme turbulente. Le modèle, basé sur une approche de "flammelettes", a été comparé avec succès à des résultats de simulations numériques directes. Dans cette approche les termes Φ_i^c et Φ_{ij} sont décomposés en utilisant la PDF quasi-bimodale introduite dans le modèle BML (2.12) :

$$\overline{c''\frac{\partial p'}{\partial x_i}} = \overline{\rho}\widetilde{\frac{c''}{\rho}\frac{\partial p'}{\partial x_i}} = \alpha\overline{\rho}\left(\widetilde{\frac{c''}{\rho}\frac{\partial p'}{\partial x_i}}\right)_r + \beta\overline{\rho}\left(\widetilde{\frac{c''}{\rho}\frac{\partial p'}{\partial x_i}}\right)_p + \gamma\overline{\rho}\left(\widetilde{\frac{c''}{\rho}\frac{\partial p'}{\partial x_i}}\right)_f \tag{3.24}$$

$$= \alpha\frac{\overline{\rho}}{\rho_r}\left(\overline{c'\frac{\partial p'}{\partial x_i}}\right)_r + \beta\frac{\overline{\rho}}{\rho_p}\left(\overline{c'\frac{\partial p'}{\partial x_i}}\right)_p + \gamma\overline{\rho}\left(\widetilde{\frac{c''}{\rho}\frac{\partial p'}{\partial x_i}}\right)_f \tag{3.25}$$

où l'indice $_r$ signifie que le terme est conditionné dans les gaz frais, l'indice $_p$ signifie que le terme est conditionné dans les gaz brûlés et l'indice $_f$ signifie que le terme est conditionné dans le front de flamme. Les valeurs conditionnées dans les gaz frais et les gaz brûlés font intervenir les gradients de pression conditionnés :

$$\left(\overline{c'\frac{\partial p'}{\partial x_i}}\right)_r = -\widetilde{c}\frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{p}_r - \overline{p}) \qquad \left(\overline{c'\frac{\partial p'}{\partial x_i}}\right)_p = (1-\widetilde{c})\frac{\partial}{\partial x_i}(\overline{p}_p - \overline{p}) \tag{3.26}$$

La partie conditionnée à l'intérieur du front de flamme local est calculée en utilisant des relations de flammelettes [30] qui conduisent à :

$$\gamma\overline{\rho}\left(\widetilde{\frac{c''}{\rho}\frac{\partial p'}{\partial x_i}}\right)_f = 0.5\tau < n.x_i > \Sigma\rho_r S_L^2(0.7-\widetilde{c}) \tag{3.27}$$

$< n.x_i >$ est le cosinus directeur moyen entre la normale à la flammelette et la direction x_i, Σ la densité de surface de flamme et S_L la vitesse de flamme laminaire. On montre donc que ces termes, loin d'être négligeables, sont proportionnels au taux de production chimique moyen $\overline{\omega} = S_L \Sigma$.

Le terme Φ_{ij} est obtenu de manière similaire :

$$\overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} = \alpha \frac{\overline{\rho}}{\rho_r} \left(\overline{u_i' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} \right)_r + \beta \frac{\overline{\rho}}{\rho_p} \left(\overline{u_i' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} \right)_p + \gamma \overline{\rho} \left(\widetilde{\frac{u_i''}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_j}} \right)_f \tag{3.28}$$

Les parties conditionnées dans les gaz frais et les gaz brûlés font apparaître les gradients de pression, les vitesses et les corrélations vitesse-pression conditionnées :

$$\left(\overline{u_i' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} \right)_r = \overline{u_{ir}' \frac{\partial p_r'}{\partial x_j}} + (\overline{u}_{ir} - \widetilde{u}_i) \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{p}_r - \overline{p}) \tag{3.29}$$

$$\left(\overline{u_i' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} \right)_p = \overline{u_{ip}' \frac{\partial p_p'}{\partial x_j}} + (\overline{u}_{ip} - \widetilde{u}_i) \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{p}_p - \overline{p}) \tag{3.30}$$

La partie conditionnée dans le front de flamme local s'exprime de la façon suivante (voir [30]) :

$$\gamma \overline{\rho} \left(\widetilde{\frac{u_i''}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_j}} \right)_f = -0.5\tau < n.x_j > \Sigma \rho_r S_L^2 \frac{\widetilde{u_i'' c''}}{1 - \widetilde{c}} - 0.35\tau^2 < n.x_i >< n.x_j > \Sigma \rho_r S_L^3 \tag{3.31}$$

Dans ce modèle interviennent les quantités conditionnées dans les gaz frais et les gaz brûlés suivantes : vitesses, gradients de pression et corrélations vitesse-pression.

En utilisant la forme de la PDF, les vitesses conditionnées sont exprimables en termes des quantités résolues $\widetilde{u}_i$ et $\widetilde{u_i'' c''}$:

$$\overline{u}_{ir} = \widetilde{u}_i - \frac{\widetilde{u_i'' c''}}{1 - \widetilde{c}} \qquad \overline{u}_{ip} = \widetilde{u}_i + \frac{\widetilde{u_i'' c''}}{\widetilde{c}} \tag{3.32}$$

Les gradients de pression conditionnés sont calculés en faisant l'hypothèse que les vitesses moyennes conditionnées dans les réactifs et les gaz brûlés vérifient les équations d'Euler :

$$\rho_r \frac{\partial \overline{u}_{ir}}{\partial t} + \rho_r \overline{u}_{jr} \frac{\partial \overline{u}_{ir}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{p}_r}{\partial x_i} = 0 \tag{3.33}$$

$$\rho_p \frac{\partial \overline{u}_{ip}}{\partial t} + \rho_p \overline{u}_{jp} \frac{\partial \overline{u}_{ip}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{p}_p}{\partial x_i} = 0 \tag{3.34}$$

La somme des termes de corrélations vitesse-pression conditionnés ($\overline{u'_{ir}\partial p'_r/\partial x_j}$, ...) peut alors être modélisée en utilisant un modèle à masse volumique constante classique [46]. Ce choix est justifié par le fait que ces termes sont les seuls qui ne soient pas nuls dans l'écoulement, en dehors des zones de flamme. Les équations ainsi obtenues pour les tensions de Reynolds se comportent donc correctement en dehors des zones de combustion. Toutefois, le modèle choisi pour représenter ces corrélations ($\overline{u'_{ir}\partial p'_r/\partial x_j}$, ...) n'est pas en accord avec les résultats de DNS effectuée par Domingo et Bray.

3.5 Conclusions

Au cours de ce chapitre nous avons fait un bilan des enjeux auxquels la modélisation du second ordre permet de répondre et des problèmes que posent la fermeture des équations moyenne de bilan pour ces quantités du second ordre, flux turbulents et variance de la variable d'avancement. La résolution d'équations de transport pour les flux turbulents permet d'exprimer le rôle important du terme de corrélation scalaire-pression H_i^c dans la représentation du phénomène de diffusion non gradient ou à contre-gradient. Les termes analogues de corrélation vitesse-pression H_{ij}, présents dans les équations pour les tensions de Reynolds doivent eux aussi être modélisés précisément car ils sont responsables de la production de turbulence par les flammes.

Les modèles au second ordre complet proposés par Bailly et al. [3] et Bigot et al. [9] sont en mesure de représenter ces deux phénomènes engendrés par les flammes turbulentes. Cependant, l'approche de "flammelettes" utilisée fait intervenir un certain nombre de constantes empiriques (c_m, K, ...) qu'il est parfois difficile de justifier. De plus, ces modèles ne représentent la diffusion à contre-gradient et la production de turbulence par la flamme que via l'interaction entre le gradient de pression moyen et les variations de masse volumique, négligeant en cela le rôle des fluctuations de pression.

Le modèle de Bigot et al. [9] est en plus applicable à des configurations de prémélange partiel. Toutefois, l'utilisation de la variable d'avancement c et l'approche de "flammelettes" restreint le domaine de richesse pour lequel le modèle est applicable.

Le modèle du second ordre complet, proposé dans la seconde partie de ce mémoire, utilise une méthode de PDF et la fraction massique de combustible Y comme variable

d'avancement. Ce modèle est applicable au prémélange partiel et théoriquement valable sur tout le domaine de richesse. La modélisation des termes de pression sera inspirée du modèle de Domingo et Bray [30] mais adaptée pour prendre en compte les hétérogènéités de richesse.

Deuxième partie

Le Modèle LW-P

Chapitre 4

Description du Modèle LW-P

Le modèle que nous décrivons dans ce chapitre est basé sur l'analyse originale de Libby et Williams [52], voir paragraphe 2.5. Ces travaux ont ensuite été poursuivis au LCD à Poitiers et ont aboutis au modèle LW-P. Ce modèle du premier ordre a été validé dans différentes configurations géométriques pour la combustion de mélange parfait ou présentant des hétérogénéités de richesse [75, 76, 79, 80]. L'objectif est de développer un modèle de PDF présumée du même type qui permette de simuler la production de turbulence par la flamme associée à des mécanismes de diffusion non-gradient.

Le modèle utilise les approximations de Schvab-Zeldovitch (une réaction globale, $Le = 1$, $Ma < 0.3$) introduites dans le premier chapitre de ce mémoire. Par conséquent, l'état thermochimique du mélange est déterminé par deux variables, la fraction de mélange ξ définie par la relation (1.19) et la fraction massique de combustible Y.

Les paramètres de forme de la PDF jointe $\widetilde{P}(Y,\xi)$ (LW-P 1^{er} ordre) sont déterminés à partir des premiers et seconds moments de ξ et Y : la fraction de mélange moyenne $\widetilde{\xi}$, sa variance $\widetilde{\xi''^2}$, la fraction massique moyenne $\widetilde{Y}$, sa variance $\widetilde{Y''^2}$ et la covariance $\widetilde{\xi''Y''}$. La résolution d'équations de transport pour ces cinq quantités moyennes ((1.24), (1.25), (1.32), (1.33), (1.34)) est donc nécessaire.

Pour le modèle du second ordre (LW-P 2^{nd} ordre), c'est-à-dire incluant des équations de bilan pour les flux turbulents (1.28) et (1.30), une PDF jointe des deux scalaires et de la vitesse est introduite : $\widetilde{P}(Y,\xi,u_i)$. Les paramètres de cette PDF sont déterminés par les premiers et seconds moments des deux variables scalaires (comme LW-P 1^{er} ordre) et

par les flux turbulents de ces scalaires $\widetilde{u_i''Y''}$ et $\widetilde{u_i''\xi''}$.

Les transports turbulents sont modélisés soit par un modèle $k-\epsilon$ (LW-P 1^{er} ordre) soit par un modèle $R_{ij}-\epsilon$ (LW-P 2^{nd} ordre).

Le principal avantage de l'utilisation de ce type de méthode est de ne pas imposer un régime de combustion particulier. Le modèle est donc théoriquement applicable à des configurations allant des flammes parfaitement prémélangées aux flammes non prémélangées, quel que soit la valeur du nombre de Damköhler. La forme présumée de la PDF à plusieurs pics de Dirac permet d'évaluer les différents termes non fermés des équations de transport, notamment les termes liés à la réaction chimique. La PDF utilisée sera composée de quatre pics de Dirac en prémélange partiel et seulement de deux pics en prémélange parfait. Dans ce dernier cas, seules les équations pour les deux moments scalaires $\widetilde{Y}$, $\widetilde{Y''^2}$ et les flux turbulents de Y sont nécessaires car la fraction de mélange est constante, $\widetilde{\xi} = cte$, $\widetilde{\xi''^2} = \widetilde{\xi''Y''} = 0$, $\widetilde{u_i''\xi''} = 0$.

4.1 Cinétique Chimique

Le temps chimique est introduit dans les équations par l'expression instantanée du taux de consommation de combustible. Ce taux de consommation peut être exprimé par la loi d'Arrhénius (1.3) comme cela a été fait dans les travaux de Ribert et al. [75, 76] et Robin et al. [79, 80]. Les constantes a et b sont, dans ces travaux, égales à l'unité et le coefficient pré-exponentiel est ajusté au mélange réactif considéré dans chaque étude. Les variations de richesse sont prises en compte dans cette expression du taux de disparition de combustible par le biais de la température $T(\xi, Y)$ et des fractions massiques de réactifs Y et $Y_{O_2}(\xi, Y)$. Cependant, cette représentation globale de la cinétique n'est en générale pas valable sur tout le domaine de richesse. Les travaux récents de Fernández-Tarrazo et al. [33] ont confirmé qu'une représentation globale de la cinétique pouvait donner des résultats satisfaisants sur tout le domaine de richesse à condition d'utiliser un facteur pré-exponentiel et une température d'activation qui soient des fonctions de la richesse.

Dans notre cas, de façon à rendre la loi d'Arrhénius pour la réaction globale applicable

à un large domaine de richesse nous l'exprimons de la façon suivante :

$$\omega = \rho\Omega = \rho K(\xi)\left(Y - Y_{\min}(\xi)\right)\exp\left[-T_a/T\right] \tag{4.1}$$

La température d'activation T_a est considérée constante mais le coefficient pré-exponentiel K est fonction de la fraction de mélange. La valeur minimale possible pour la fraction massique de combustible Y_{min} est également fonction de la fraction de mélange. Cette valeur limite est définie par les droites de combustion complète du domaine de définition des couples (ξ, Y) (voir Fig.1.3). Une tabulation du facteur pré-exponentiel $K(\xi)$ est créée à l'aide d'un logiciel de calcul de flamme laminaire 1-D [38], les valeurs de $K(\xi)$ étant ajustées de façon à obtenir les mêmes vitesses de propagation que celles obtenues avec des schémas cinétiques détaillés (le GRI 2.11 dans le cas de la combustion de méthane et d'air).

Les raisons pour lesquelles la loi d'Arrhénius est exprimée sous cette forme et les détails du calcul Chemkin sont explicités au paragraphe 9.2.2 du chapitre 9.

4.2 Espace des Compositions

Le domaine de définition de la PDF est limité par trois droites (voir Fig. 1.3 et Fig. 4.1) : la droite de mélange où Y atteint sa valeur maximale $Y = Y_{\max} = \xi$, la droite de combustion complète pauvre où Y atteint sa valeur minimale pour des cas pauvres $Y = Y_{\min} = 0$ et la droite de combustion complète riche où Y atteint sa valeur minimale pour des cas riches $Y = Y_{\min} = (\xi - \xi_{st})/(1 - \xi_{st})$.
La variable d'avancement Y est donc comprise entre $Y_{\min}$ (gaz entièrement brûlés) et $Y_{\max}$ (gaz frais). Ces limites sont des fonctions connues de la fraction de mélange ξ :

$$Y_{\max}(\xi) = \xi \quad \text{et} \quad Y_{\min}(\xi) = A(\xi).(\xi - \xi_{st}) \tag{4.2}$$

$A(\xi)$ représente le coefficient directeur de la droite $Y_{\min}(\xi)$, il est donc discontinu. $A(\xi) = 0$ en prémélange pauvre et $A(\xi) = 1/(1 - \xi_{st})$ en prémélange riche. En introduisant la fonction de Heaviside $H(\xi - \xi_{st})$, on obtient finalement l'expression suivante.

$$A(\xi) = \frac{1}{1 - \xi_{st}} H(\xi - \xi_{st}) \tag{4.3}$$

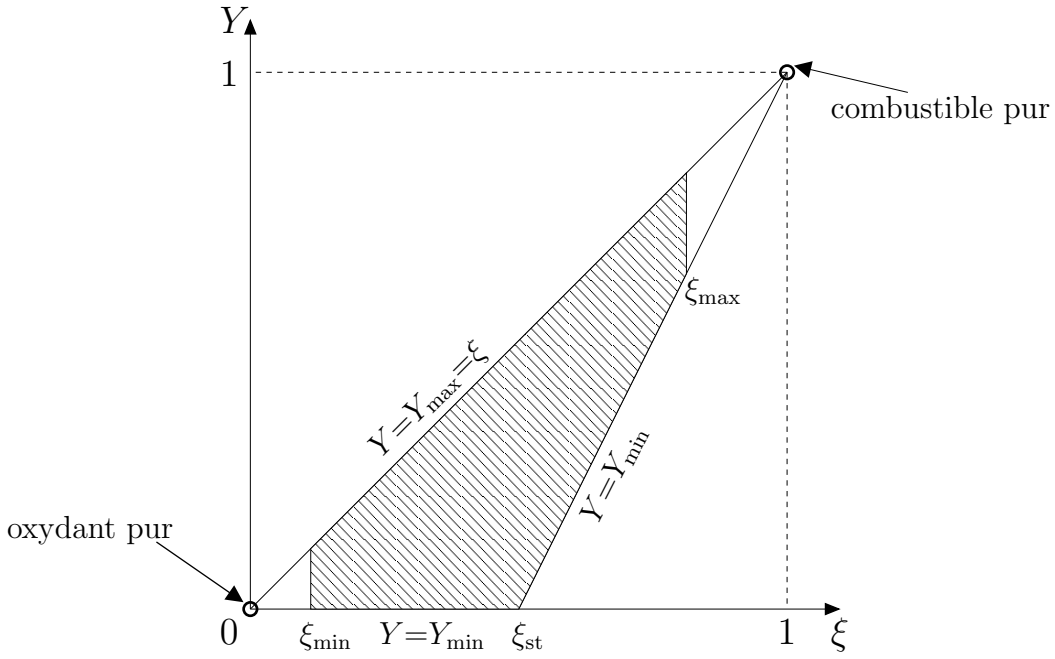


FIG. 4.1 – Domaine d'existence des couples (ξ,Y)

Il faut remarquer que, dans des configurations de prémélanges partiels, la fraction de mélange n'atteint pas systématiquement les valeurs extrêmes correspondant à l'oxydant pur ($\xi = 0$) et au combustible pur ($\xi = 1$). Le domaine de définition est alors délimité par deux droites supplémentaires $\xi = \xi_{min}$ et $\xi = \xi_{max}$. Dans le cas limite de flammes parfaitement prémélangées le domaine se réduit alors à une droite verticale $\xi = \xi_{min} = \xi_{max}$.

4.3 Paramètres de la PDF

Le modèle LW-P est un modèle basé sur l'existence d'une PDF formée de quatre distributions de Dirac. On considère de plus que pour chaque valeur de la richesse il existe deux avancements différents, voir figure 4.2.

Les paramètres de la PDF, c'est-à-dire les positions et les amplitudes des pics de Dirac dans l'espace des compositions, sont déterminés à partir des premiers et seconds moments des scalaires : $\widetilde{\xi}$, $\widetilde{\xi''^2}$, $\widetilde{Y}$, $\widetilde{Y''^2}$, $\widetilde{\xi''Y''}$.

Pour la modélisation du second ordre, des quantités supplémentaires interviennent : les

vitesses moyennes conditionnées en chaque pic, quantités qui sont déterminés à partir des flux turbulents scalaires $\overline{\rho u_i'' \xi''}$ et $\overline{\rho u_i'' Y''}$.

4.3.1 Premier Ordre

La PDF jointe de fraction de mélange et de fraction massique de combustible $\widetilde{P}(Y,\xi)$ est tout d'abord exprimée par deux distributions de Dirac en deux valeurs de la fraction de mélange :

$$\widetilde{P}(Y,\xi) = \alpha \widetilde{P}_a(Y)\delta\left(\xi - \xi_a\right) + (1-\alpha)\widetilde{P}_b(Y)\delta\left(\xi - \xi_b\right) \tag{4.4}$$

Cette expression fait apparaître les PDF de Y conditionnées en ξ_a et ξ_b. Ces PDF sont, à leur tour, exprimées par deux distributions de Dirac :

$$\begin{aligned} \widetilde{P}_a(Y) &= \beta\delta\left(Y - Y_{a1}\right) + (1-\beta)\delta\left(Y - Y_{a2}\right) \\ \widetilde{P}_b(Y) &= \gamma\delta\left(Y - Y_{b1}\right) + (1-\gamma)\delta\left(Y - Y_{b2}\right) \end{aligned} \tag{4.5}$$

Les quatres pics de Dirac résultant de la PDF jointe sont représentés dans l'espace des compositions sur la figure 4.2.

Finalement, La PDF jointe est définie par neuf paramètres, α, β, γ, ξ_a, ξ_b, Y_{a1}, Y_{a2}, Y_{b1} et Y_{b2} qui sont à déterminer.
Les quantités moyennes transportées $\widetilde{\xi}$, $\widetilde{\xi''^2}$, $\widetilde{Y}$, $\widetilde{Y''^2}$ et $\widetilde{\xi''Y''}$ fournissent cinq relations :

$$\begin{aligned} \widetilde{\xi} &= \alpha\xi_a + (1-\alpha)\xi_b \\ \widetilde{\xi''^2} &= \alpha{\xi_a}^2 + (1-\alpha){\xi_b}^2 - \widetilde{\xi}^2 = \alpha(1-\alpha)(\xi_b - \xi_a)^2 \end{aligned} \tag{4.6}$$

$$\begin{aligned} \widetilde{Y} &= \alpha\widetilde{Y}_a + (1-\alpha)\widetilde{Y}_b \\ \widetilde{Y''^2} &= \alpha\left(\widetilde{Y_a''^2} + {\widetilde{Y}_a}^2\right) + (1-\alpha)\left(\widetilde{Y_b''^2} + {\widetilde{Y}_b}^2\right) - \widetilde{Y}^2 \end{aligned} \tag{4.7}$$

$$\widetilde{\xi''Y''} = \alpha\widetilde{Y}_a\xi_a + (1-\alpha)\widetilde{Y}_b\xi_b - \widetilde{Y}\widetilde{\xi} = \alpha(1-\alpha)(\widetilde{Y}_b - \widetilde{Y}_a)(\xi_b - \xi_a) \tag{4.8}$$

Ces expressions font apparaître les moyennes et variances conditionnées en ξ_a et ξ_b, notées : $\widetilde{Y}_a$, $\widetilde{Y}_b$, $\widetilde{Y_a''^2}$, $\widetilde{Y_b''^2}$. Les PDF conditionnées permettent d'exprimer ces quantités en fonction des paramètres que l'on cherche à déterminer :

$$\begin{aligned} \widetilde{Y}_a &= \beta Y_{a1} + (1-\beta)Y_{a2} \\ \widetilde{Y_a''^2} &= \beta Y_{a1}^2 + (1-\beta)Y_{a2}^2 - {\widetilde{Y}_a}^2 = \beta(1-\beta)(Y_{a2} - Y_{a1})^2 \end{aligned} \tag{4.9}$$

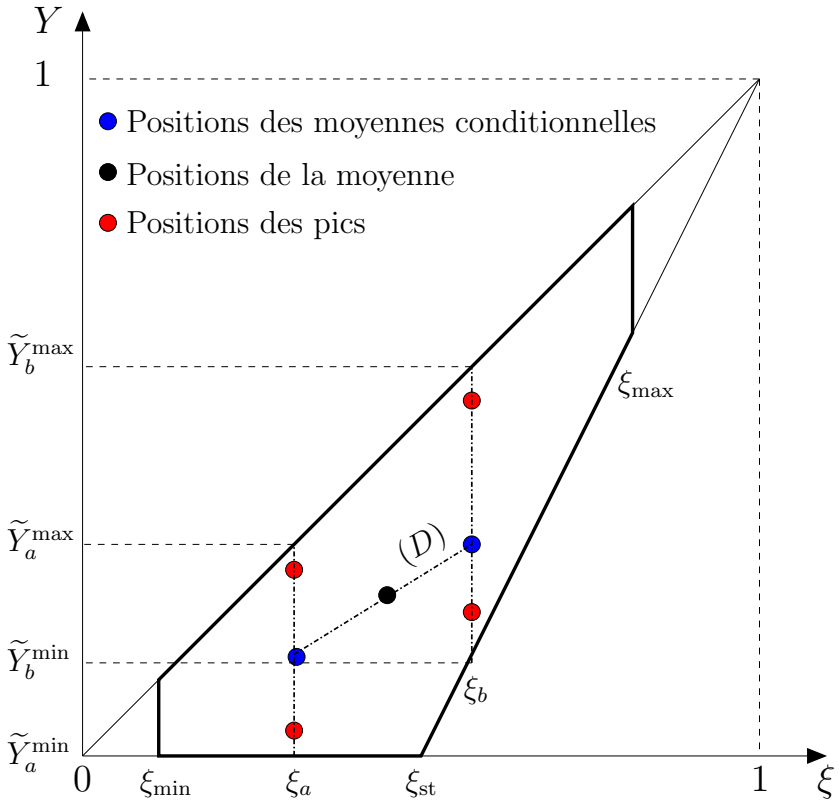


FIG. 4.2 – Répartition des pics de Dirac dans le domaine

$$\begin{aligned} \widetilde{Y}_b &= \gamma Y_{b1} + (1-\gamma) Y_{b2} \\ \widetilde{Y_b''^2} &= \gamma Y_{b1}^2 + (1-\gamma) Y_{b2}^2 - \widetilde{Y}_b^{\,2} = \gamma(1-\gamma)(Y_{b2} - Y_{b1})^2 \end{aligned} \tag{4.10}$$

Une sixième relation est obtenue en considérant que les variances normalisées conditionnées en ξ_a et ξ_b sont égales :

$$\frac{\widetilde{Y_a''^2}}{(\widetilde{Y}_a^{\max} - \widetilde{Y}_a)(\widetilde{Y}_a - \widetilde{Y}_a^{\min})} = \frac{\widetilde{Y_b''^2}}{(\widetilde{Y}_b^{\max} - \widetilde{Y}_b)(\widetilde{Y}_b - \widetilde{Y}_b^{\min})} \tag{4.11}$$

$\widetilde{Y}_a^{\max}$,$\widetilde{Y}_a^{\min}$,$\widetilde{Y}_b^{\max}$,$\widetilde{Y}_b^{\min}$ sont les valeurs maximales et minimales possibles pour les moyennes conditionnées en ξ_a et ξ_b, voir figure (4.2).

Finalement, les six relations (4.6),(4.7),(4.8) et (4.11) permettent d'obtenir les six paramètres de la PDF suivant :

$$\begin{aligned} \xi_a &= \widetilde{\xi} - \sqrt{\frac{(1-\alpha)}{\alpha}} \widetilde{\xi''^2} \\ \xi_b &= \widetilde{\xi} + \sqrt{\frac{\alpha}{(1-\alpha)}} \widetilde{\xi''^2} \end{aligned} \tag{4.12}$$

$$
\begin{aligned}
Y_{a1} &= \widetilde{Y}_a - \sqrt{\frac{(1-\beta)}{\beta}\widetilde{Y_a''^2}} \\
Y_{a2} &= \widetilde{Y}_a + \sqrt{\frac{\beta}{(1-\beta)}\widetilde{Y_a''^2}}
\end{aligned}
\tag{4.13}
$$

$$
\begin{aligned}
Y_{b1} &= \widetilde{Y}_b - \sqrt{\frac{(1-\gamma)}{\gamma}\widetilde{Y_b''^2}} \\
Y_{b2} &= \widetilde{Y}_b + \sqrt{\frac{\gamma}{(1-\gamma)}\widetilde{Y_b''^2}}
\end{aligned}
\tag{4.14}
$$

Les trois paramètres toujours inconnus sont les amplitudes α, β et γ des distributions de Dirac. Trois relations, permettant de les exprimer, sont nécessaires pour que les paramètres de la PDF soient entièrement déterminés.

Deux méthodes sont proposées. Dans la première on considère que les expressions des amplitudes, lorsque les pics sont sur les bords du domaine, sont valables quelles que soient leurs positions. Les amplitudes s'expriment alors par les relations suivantes :

$$
\alpha = \frac{\xi_{\max} - \widetilde{\xi}}{\xi_{\max} - \xi_{\min}} \qquad \beta = \frac{\widetilde{Y}_a^{\max} - \widetilde{Y}_a}{\widetilde{Y}_a^{\max} - \widetilde{Y}_a^{\min}} \qquad \gamma = \frac{\widetilde{Y}_b^{\max} - \widetilde{Y}_b}{\widetilde{Y}_b^{\max} - \widetilde{Y}_b^{\min}} \tag{4.15}
$$

Les valeurs maximales et minimales sont déterminées à partir du domaine de définition de la PDF, voir figure 4.2.

Cette méthode peut poser des problèmes lorsque les positions des distributions s'écartent de leurs positions limites. En effet, on peut se retrouver dans des situations où on obtient la valeur moyenne avec des amplitudes des distributions très différentes.

La seconde méthode, proposée par Champion et Libby [23], consiste à utiliser le moment du troisième ordre. Afin d'éviter de dériver des équations de transport supplémentaires, P.Plion [71] a proposé d'exprimer le moment d'ordre 3 en fonction des deux premiers moments. La relation (4.16) est utilisée pour calculer le moment d'ordre 3, cette relation est issue des propriétés des fonctions β. Pour une variable H, comprise entre $H_{\min}$ et $H_{\max}$, on obtient :

$$
\widetilde{H''^3} = 2\widetilde{H''^2}^2 \frac{H_{\max} - 2\widetilde{H} + H_{\min}}{(H_{\max} - \widetilde{H})(\widetilde{H} - H_{\min}) + \widetilde{H''^2}} \tag{4.16}
$$

Le moment d'ordre 3 peut également être exprimé en considérant une PDF à 2 pics de Dirac H_1 et H_2 d'amplitude respective μ et $1-\mu$:

$$
\widetilde{H''^3} = \mu(1-\mu)(2\mu-1)(H_2 - H_1)^3 \tag{4.17}
$$

A l'aide de ces deux relations on peut exprimer l'amplitude μ en fonction des deux premiers moments, on obtient :

$$\begin{aligned} \mu &= 0.5 \pm 0.5\sqrt{b} \quad \text{avec} \quad b = \frac{\widetilde{H''^3}^2}{4\widetilde{H''^2}^3 + \widetilde{H''^3}^2} \\ &\text{et} \\ b &= \frac{\widetilde{H''^2}(H_{\max} - 2\widetilde{H} + H_{\min})^2}{\widetilde{H''^2}(H_{\max} - 2\widetilde{H} + H_{\min})^2 + \left((H_{\max} - \widetilde{H})(\widetilde{H} - H_{\min}) + \widetilde{H''^2}\right)^2} \end{aligned} \tag{4.18}$$

Cette relation est utilisée pour déterminer les amplitudes α, β, γ avec respectivement les premier et second moments $\widetilde{\xi}$ et $\widetilde{\xi''^2}$, $\widetilde{Y}_a$ et $\widetilde{Y''^2_a}$, $\widetilde{Y}_b$ et $\widetilde{Y''^2_b}$. Les valeurs maximales et minimales sont déterminées à partir du domaine de définition de la PDF.

Les positions et les amplitudes des pics de Dirac dans l'espace des compositions sont maintenant connues.

4.3.2 Second Ordre

La PDF jointe du second ordre à trois dimensions u_i $(i = 1, 3)$ et deux dimensions scalaires Y et ξ, est construite de la même manière que celle du premier ordre (deux distributions à deux valeurs de la fraction de mélange et deux distributions à deux valeurs de l'avancement de la réaction) :

$$\widetilde{P}(u_i, Y, \xi) = \alpha \widetilde{P}_a(u_i, Y)\delta(\xi - \xi_a) + (1 - \alpha)\widetilde{P}_b(u_i, Y)\delta(\xi - \xi_b) \tag{4.19}$$

avec les PDF conditionnées en ξ_a et ξ_b suivantes :

$$\begin{aligned} \widetilde{P}_a(u_i, Y) &= \beta\delta(Y - Y_{a1})\,\widetilde{P}_a(u_i|Y_{a1}) + (1 - \beta)\delta(Y - Y_{a2})\,\widetilde{P}_a(u_i|Y_{a2}) \\ \widetilde{P}_b(u_i, Y) &= \gamma\delta(Y - Y_{b1})\,\widetilde{P}_b(u_i|Y_{b1}) + (1 - \gamma)\delta(Y - Y_{b2})\,\widetilde{P}_b(u_i|Y_{b2}) \end{aligned} \tag{4.20}$$

La différence avec la PDF du premier ordre est l'apparition des PDF de vitesse conditionnées en chaque pic. Comme la masse volumique en chaque pic est constante, ces PDF peuvent être exprimées indifféremment au sens de Favre ou au sens de Reynolds : $\widetilde{P}_j(u_i|Y_{jk}) = P_j(u_i|Y_{jk})$, avec $j = a, b$ et $k = 1, 2$.

Les 3 composantes de vitesse moyenne conditionnée sont définies par la relation suivante :

$$\overline{u_i}_{jk} = \int u_i P_j(u_i|Y_{jk}) du_i \tag{4.21}$$

Ces douze composantes de vitesse conditionnée sont les douze paramètres supplémentaires de la PDF du second ordre. Douze relations sont nécessaires et neuf sont obtenues en exprimant les trois composantes de la vitesse moyenne, les trois composantes des flux turbulents de fraction de mélange et les trois composantes des flux turbulents de fraction massique de combustible :

$$\widetilde{u_i} = \alpha\widetilde{u}_{ia} + (1-\alpha)\widetilde{u}_{ib} \tag{4.22}$$

$$\widetilde{u_i''\xi''} = \alpha\widetilde{u}_{ia}\xi_a + (1-\alpha)\widetilde{u}_{ib}\xi_b - \widetilde{u}_i\widetilde{\xi} = \alpha(1-\alpha)(\xi_b-\xi_a)(\widetilde{u}_{ib}-\widetilde{u}_{ia}) \tag{4.23}$$

$$\widetilde{u_i''Y''} = \alpha(\widetilde{u}_{ia}\widetilde{Y}_a + \widetilde{u_i''Y_a''}) + (1-\alpha)(\widetilde{u}_{ib}\widetilde{Y}_b + \widetilde{u_i''Y_b''}) - \widetilde{u}_i\widetilde{Y} \tag{4.24}$$

Ces expressions font apparaître les vitesses moyennes $\widetilde{u}_{ia}$ et $\widetilde{u}_{ib}$ et les flux turbulents $\widetilde{u_i''Y_a''}$, $\widetilde{u_i''Y_b''}$ conditionnés en ξ_a et ξ_b. Ces quantités s'expriment de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \widetilde{u}_{ia} &= \beta\overline{u}_{ia1} + (1-\beta)\overline{u}_{ia2} \\ \widetilde{u}_{ib} &= \gamma\overline{u}_{ib1} + (1-\gamma)\overline{u}_{ib2} \end{aligned} \tag{4.25}$$

$$\begin{aligned} \widetilde{u_i''Y_a''} &= \beta\left(\overline{u}_{ia1}-\widetilde{u}_{ia}\right)\left(Y_{a1}-\widetilde{Y}_a\right) + (1-\beta)\left(\overline{u}_{ia2}-\widetilde{u}_{ia}\right)\left(Y_{a2}-\widetilde{Y}_a\right) \\ &= \beta(1-\beta)\left(Y_{a2}-Y_{a1}\right)\left(\overline{u}_{ia2}-\overline{u}_{ia1}\right) \\ \widetilde{u_i''Y_b''} &= \gamma\left(\overline{u}_{ib1}-\widetilde{u}_{ib}\right)\left(Y_{b1-}\widetilde{Y}_b\right) + (1-\gamma)\left(\overline{u}_{ib2}-\widetilde{u}_{ib}\right)\left(Y_{b2}-\widetilde{Y}_b\right) \\ &= \gamma(1-\gamma)\left(Y_{b2}-Y_{b1}\right)\left(\overline{u}_{ib2}-\overline{u}_{ib1}\right) \end{aligned} \tag{4.26}$$

Finalement, les vitesses moyennes conditionnées en chaque pic s'écrivent :

$$\begin{aligned} \overline{u}_{ia1} &= \widetilde{u}_{ia} - \frac{\widetilde{u_i''Y_a''}}{\beta\left(Y_{a2}-Y_{a1}\right)} \\ \overline{u}_{ia2} &= \widetilde{u}_{ia} + \frac{\widetilde{u_i''Y_a''}}{(1-\beta)\left(Y_{a2}-Y_{a1}\right)} \end{aligned} \tag{4.27}$$

$$\begin{aligned} \overline{u}_{ib1} &= \widetilde{u}_{ib} - \frac{\widetilde{u_i''Y_b''}}{\gamma\left(Y_{b2}-Y_{b1}\right)} \\ \overline{u}_{ib2} &= \widetilde{u}_{ib} + \frac{\widetilde{u_i''Y_b''}}{(1-\gamma)\left(Y_{b2}-Y_{b1}\right)} \end{aligned} \tag{4.28}$$

Avec les expressions suivantes pour les vitesses moyennes conditionnées en a et b :

$$\begin{aligned} \widetilde{u}_{ia} &= \widetilde{u}_i - \frac{\widetilde{u_i''\xi''}}{\alpha\left(\xi_b-\xi_a\right)} \\ \widetilde{u}_{ib} &= \widetilde{u}_i + \frac{\widetilde{u_i''\xi''}}{(1-\alpha)\left(\xi_b-\xi_a\right)} \end{aligned} \tag{4.29}$$

Pour fermer le système, trois relations supplémentaires sont nécessaires. Nous considérons que l'écart des composantes de vitesse moyenne conditionnée rapporté à l'écart de température en ξ_a est égal à celui en ξ_b :

$$\frac{\overline{u}_{ia2} - \overline{u}_{ia1}}{\overline{T}_{a2} - \overline{T}_{a1}} = \frac{\overline{u}_{ib2} - \overline{u}_{ib1}}{\overline{T}_{b2} - \overline{T}_{b1}} \tag{4.30}$$

Cette dernière relation permet d'exprimer le rapport des flux turbulents conditionnés $\widetilde{u_i'' Y_a''}$ sur $\widetilde{u_i'' Y_b''}$:

$$\frac{\widetilde{u_i'' Y_a''}}{\widetilde{u_i'' Y_b''}} = \frac{\beta(1-\beta)\left(Y_{a2} - Y_{a1}\right)\left(\overline{T}_{a2} - \overline{T}_{a1}\right)}{\gamma(1-\gamma)\left(Y_{b2} - Y_{b1}\right)\left(\overline{T}_{b2} - \overline{T}_{b1}\right)} \tag{4.31}$$

Tous les paramètres de la PDF du modèle au second ordre, positions des pics, amplitudes et vitesses conditionnées sont finalement calculés à partir des premiers et seconds moments de ξ et Y, de la covariance et des flux turbulents des deux variables.

4.4 Comportement de la PDF

La méthode de construction de la PDF permet de retrouver les différents cas limites, comme illustré par la figure 4.3. Tout d'abord, lorsque la variance de fraction de mélange est nulle, la PDF se réduit à deux pics de Dirac positionnés sur une droite verticale (cas 1 sur la figure 4.3), c'est le cas d'un prémélange parfait. Les positions des différentes distributions sont alors uniquement contrôlées par la fraction massique moyenne de combustible et sa variance. Si la variance de fraction massique est également nulle, tous les pics sont sur le point moyen (cas 2 sur la figure 4.3). Si la variance de fraction massique tend vers sa valeur maximale, les pics sont rejetés près des bords du domaine (cas 3 sur la figure 4.3). Dans ce cas, la combustion a lieu en régime de flammelettes, le modèle LW-P tend vers le modèle BML et les formes finales des taux de réaction chimique moyen sont les mêmes [21].

La différence importante entre les modèles LW-P et BML est que le modèle BML est constitué de deux pics dans des états non réactifs (gaz frais et gaz brûlés) et d'un fond réactif alors que le modèle LW-P n'est constitué que de deux pics réactifs. Mais à la limite ou γ tend vers zéro (BML), les deux pics de LW-P tendent vers les états non réactifs, dans ce cas, la variance de fraction massique tend vers sa valeur maximale théorique : il n'y a plus de réaction chimique, la flamme est devenue si mince qu'elle a disparu.

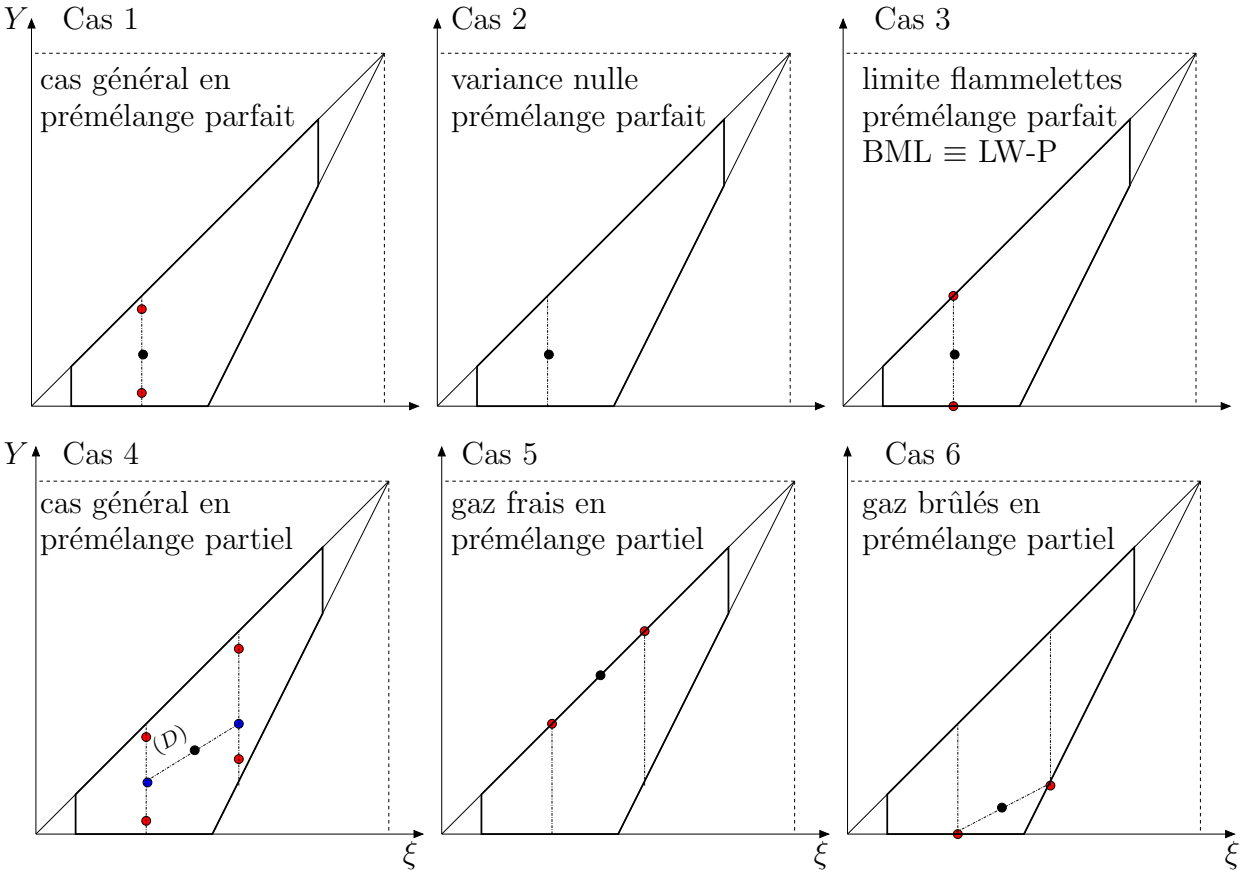


FIG. 4.3 – Comportement de la PDF

Lorsque la variance de fraction de mélange est non nulle et que le point moyen est dans les gaz frais (cas 5 sur la figure 4.3) ou dans les gaz brûlés (cas 6 sur la figure 4.3), la PDF se réduit encore à deux pics de Dirac. Dans ces cas, deux des quatres pics de Dirac sont sur la moyenne conditionnelle $\widetilde{Y}_a$ et les deux autres sur la moyenne conditionnelle $\widetilde{Y}_b$. Une caractéristique importante de cette PDF est que la pente d de la droite D qui relie les moyennes conditionnelles (voir cas 4 sur la figure 4.3) est égale au rapport de la covariance sur la variance de fraction de mélange. d est donc égale à l'unité dans les gaz frais ($\widetilde{\xi''Y''} = \widetilde{\xi''^2} = \widetilde{Y''^2}$), à zéro dans les gaz brûlés issus d'un mélange pauvre et à $(\widetilde{\xi} - \xi_{st})/(1 - \xi_{st})$ dans les gaz brûlés issu d'un mélange riche.

$$d = \frac{\widetilde{\xi''Y''}}{\widetilde{\xi''^2}} \tag{4.32}$$

Lorsque la PDF est constituée de 4 pics de Dirac répartis dans l'espace des compositions (cas 4 sur la figure 4.3), on constate que c'est la covariance qui va piloter la pente d.

Cette covariance a donc un rôle important lorsque la combustion est à richesse variable. Cette pente va engendrer un avancement de la réaction plus important sur certaines richesses que sur d'autres. Il faut remarquer que dans le modèle LW-P originale utilisé par Ribert et al. [75] où la PDF est composée de deux pics de Dirac quel que soit le cas considéré, la covariance est dépendante des deux autres variances selon la relation (2.28) ; la pente d de la droite qui relie ces deux pics est alors donnée par la relation (2.26).

4.5 Conclusions

Le modèle à PDF présumée présenté dans ce chapitre, qui consiste à répartir quatre distributions de Dirac dans l'espace des compositions permet une analyse approfondie des phénomènes induits par la combustion à richesse variable. Un deuxième avantage de cette approche mathématique est la simplicité avec laquelle les différents termes non fermés des équations de transport peuvent être modélisés.

Pour simplifier davantage les relations lors de la fermeture des différents termes des équations, les quatres états $a1$, $a2$, $b1$ et $b2$ seront aussi notés q ($q \in [1,4]$). Les valeurs moyennes s'exprimeront donc de la manière suivante :

$$\widetilde{\xi} = \sum_{q=1}^{4} \alpha_q \xi_q \qquad \widetilde{Y} = \sum_{q=1}^{4} \alpha_q Y_q \qquad \widetilde{u_i} = \sum_{q=1}^{4} \alpha_q \overline{u}_{iq} \tag{4.33}$$

Les amplitudes α_q sont reliées aux amplitudes α, β, γ par les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} \alpha_1 = \alpha_{a1} = \alpha\beta \qquad & \alpha_2 = \alpha_{a2} = \alpha(1-\beta) \\ \alpha_3 = \alpha_{b1} = (1-\alpha)\gamma \qquad & \alpha_4 = \alpha_{b2} = (1-\alpha)(1-\gamma) \end{aligned} \tag{4.34}$$

Chapitre 5

Présentation des Modèles de Fermeture des Equations de Transport

Dans ce chapitre, on propose des modèles de fermeture des termes inconnus des équations de transport récapitulées dans le tableau 1.3. Pour cela le modèle LW-P décrit dans le chapitre précédent est utilisé. Dans un premier temps nous traitons les équations de transport des scalaires, puis celles des flux turbulents et enfin celles des tensions de Reynolds. L'équation pour l'énergie cinétique turbulente k qui est utilisée dans le cas d'une résolution au premier ordre n'est pas modifiée.

5.1 Equations Scalaires

5.1.1 Termes dus à la Réaction Chimique

La forme de la PDF présentée au cours du chapitre précédent et l'expression (4.1) pour le taux de production chimique permet de calculer les différents termes moyens faisant intervenir la réaction chimique. Tout d'abord, le terme de consommation $\overline{\omega}$ introduit par l'équation (1.25) pour la fraction massique de combustible moyenne s'exprime simplement

en fonction des paramètres de la PDF :

$$\overline{\omega} = \overline{\rho}\widetilde{\Omega} = \overline{\rho}\int\int \Omega(\xi, Y)\widetilde{P}(\xi, Y)d\xi dY = \overline{\rho}\sum_{q=1}^{4}\alpha_q\Omega\left(\xi_q, Y_q\right) \tag{5.1}$$

De la même façon le terme $\overline{Y''\omega}$ intervenant dans l'équation (1.33) pour la variance de fraction massique de combustible s'exprime par :

$$\overline{Y''\omega} = \overline{\rho}\widetilde{Y''\Omega} = \overline{\rho}\sum_{q=1}^{4}\alpha_q\left(Y_q - \widetilde{Y}\right)\Omega\left(\xi_q, Y_q\right) \tag{5.2}$$

Enfin, le terme $\overline{\xi''\omega}$ intervenant dans l'équation (1.34) pour la covariance s'écrit :

$$\overline{\xi''\omega} = \overline{\rho}\widetilde{\xi''\Omega} = \overline{\rho}\sum_{q=1}^{4}\alpha_q\left(\xi_q - \widetilde{\xi}\right)\Omega\left(\xi_q, Y_q\right) \tag{5.3}$$

5.1.2 Termes de Diffusion

Dans le cas du modèle du premier ordre, tous les termes de diffusion turbulente introduits dans les équations de transport sont modélisés par une loi gradient comme décrits par les équations (1.38) et (1.39).

Dans le modèle du second ordre les termes de diffusion turbulente, $\overline{\rho u_i''\xi''}$ et $\overline{\rho u_i''Y''}$ existants dans les équations pour la fraction de mélange moyenne (1.24) et pour la fraction massique moyenne de combustible (1.25) sont fermés puisque les flux turbulents sont résolus.

L'utilisation de la PDF permet ainsi de fermer les termes de diffusion turbulente des équations des seconds moments (1.32), (1.33) et (1.34), c'est-à-dire $\overline{\rho u_i''\xi''^2}$, $\overline{\rho u_i''Y''^2}$, $\overline{\rho u_i''\xi''Y''}$:

$$\begin{aligned}
\overline{\rho u_i''\xi''^2} &= \overline{\rho}\int\int\int (u_i - \widetilde{u}_i)\left(\xi - \widetilde{\xi}\right)^2\widetilde{P}(u, \xi, Y)du_i d\xi dY \\
&= \overline{\rho}\sum_{q=1}^{4}\alpha_q\left(\xi_q - \widetilde{\xi}\right)^2(\overline{u}_{iq} - \widetilde{u}_i) \qquad (5.4)\\
\overline{\rho u_i''Y''^2} &= \overline{\rho}\sum_{q=1}^{4}\alpha_q\left(Y_q - \widetilde{Y}\right)^2(\overline{u}_{iq} - \widetilde{u}_i) \qquad (5.5)\\
\overline{\rho u_i''\xi''Y''} &= \overline{\rho}\sum_{q=1}^{4}\alpha_q\left(\xi_q - \widetilde{\xi}\right)\left(Y_q - \widetilde{Y}\right)(\overline{u}_{iq} - \widetilde{u}_i) \qquad (5.6)
\end{aligned}$$

5.1.3 Termes de Dissipation

Les termes de dissipation des scalaires ϵ_ξ, ϵ_Y et $\epsilon_{\xi Y}$ ne peuvent pas être fermés directement par la PDF car celle-ci fournit une information définie en un point alors que les termes de dissipation qui font intervenir les gradients instantanés des variables Y et ξ nécessitent une information définie au moins en deux points. Un modèle algébrique est donc nécessaire pour fermer ces termes.

La dissipation du scalaire passif ϵ_ξ est fermée par un modèle classique de relaxation linéaire donné par la relation (1.48).

Le terme de dissipation d'un scalaire réactif ne peut pas être modélisé par ce modèle de relaxation linéaire car la réaction chimique peut imposer fortement les gradients locaux et donc la valeur de la dissipation. Le choix des modèles de fermeture des taux dissipation ϵ_Y et $\epsilon_{Y\xi}$ a donc une importance cruciale pour être en mesure de représenter avec précision la combustion turbulente. Un modèle pour les dissipations scalaires spécifique à la combustion turbulente des mélanges partiels sera ensuite proposé au chapitre 6.

5.2 Equations des Flux Turbulents

5.2.1 Terme dû à la Réaction Chimique

Dans les équations pour les flux turbulents, un seul terme fait intervenir la réaction chimique : $\psi_i^Y = \overline{u_i''\omega}$. La relation (4.1) et la PDF conduisent à l'expression suivante :

$$\psi_i^Y = \overline{u_i''\omega} \;=\; \overline{\rho}\widetilde{u_i''\Omega} = \overline{\rho}\sum_{q=1}^{4}\alpha_q\left(\overline{u}_{iq} - \widetilde{u}_i\right)\Omega\left(\xi_q, Y_q\right) \tag{5.7}$$

5.2.2 Terme de Diffusion

Les termes de diffusion intervenant dans les équations des flux turbulents comprennent la diffusion turbulente exprimée par les corrélations du troisième ordre, $\overline{\rho u_k'' u_i'' \xi''}$ et $\overline{\rho u_k'' u_i'' Y''}$ et la diffusion laminaire exprimée par les corrélations, $\overline{u_i'' \rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}}$, $\overline{\xi'' \tau_{ik}}$, $\overline{u_i'' \rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k}}$ et $\overline{Y'' \tau_{ik}}$. Suffisamment loin des parois solides, la diffusion laminaire peut être négligée devant la diffusion turbulente. Concernant les corrélations du troisième ordre, nous utilisons ici le modèle de Daly et Harlow (1.55). De fait les corrélations du troisième ordre peuvent

également être exprimées en utilisant la PDF, ce qui conduit à :

$$\begin{aligned}\overline{\rho u_k'' u_i'' \xi''} &= \overline{\rho} \sum_{q=1}^{4} \alpha_q \left[(\overline{u}_{kq} - \widetilde{u_k})(\overline{u}_{iq} - \widetilde{u_i})(\xi_q - \widetilde{\xi}) + \overline{u_{kq}' u_{iq}'}(\xi_q - \widetilde{\xi}) \right] \\ \overline{\rho u_k'' u_i'' Y''} &= \overline{\rho} \sum_{q=1}^{4} \alpha_q \left[(\overline{u}_{kq} - \widetilde{u_k})(\overline{u}_{iq} - \widetilde{u_i})(Y_q - \widetilde{Y}) + \overline{u_{kq}' u_{iq}'}(Y_q - \widetilde{Y}) \right]\end{aligned} \tag{5.8}$$

Mais ces relations font intervenir les tensions de Reynolds conditionnées en chaque pic de Dirac $\overline{u_{kq}' u_{iq}'}$, quantités qui ne sont pas connues.

Pour déterminer ces tensions de Reynolds conditionnées $\overline{u_{kq}' u_{iq}'}$, il faut exprimer les tensions de Reynolds $\overline{\rho u_k'' u_i''}$ avec la PDF et faire une hypothèse supplémentaire. Par exemple, on peut considérer les intensités turbulentes conditionnées constantes :

$$\frac{\overline{u_{kq}' u_{iq}'}}{\overline{u}_{kq} \overline{u}_{iq}} = C_{ki} \tag{5.9}$$

L'expression des tensions de Reynolds en utilisant la PDF, relation (5.10), permet alors d'exprimer les tensions de Reynolds conditionnées en fonction des quantités connues :

$$\overline{\rho u_k'' u_i''} = \overline{\rho} \sum_{q=1}^{4} \alpha_q \left[(\overline{u}_{kq} - \widetilde{u_k})(\overline{u}_{iq} - \widetilde{u_i}) + \overline{u_{kq}' u_{iq}'} \right] \tag{5.10}$$

$$\overline{u_{kq}' u_{iq}'} = \left[\widetilde{u_k'' u_i''} - \sum_{q=1}^{4} \alpha_q (\overline{u}_{kq} - \widetilde{u_k})(\overline{u}_{iq} - \widetilde{u_i}) \right] (\overline{u}_{kq} \overline{u}_{iq}) \Big/ \left(\sum_{q=1}^{4} \alpha_q \overline{u}_{kq} \overline{u}_{iq} \right) \tag{5.11}$$

Cependant, l'hypothèse 5.9 utilisée pour déterminer les tensions de Reynolds conditionnées est loin d'être vérifiée. Tenant compte de cette incertitude nous préférons utiliser le modèle de Daly et Harlow pour fermer les corrélations du troisième ordre.

5.2.3 Terme de Dissipation

Les termes de dissipation des flux turbulents sont les suivants :

$$\overline{\rho} \epsilon_i^Y = \overline{\tau_{ik} \frac{\partial Y''}{\partial x_k}} + \overline{\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} \qquad \overline{\rho} \epsilon_i^\xi = \overline{\tau_{ik} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} + \overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} \tag{5.12}$$

Ces dissipations, comme les dissipations des scalaires, ne peuvent pas être fermées en utilisant la PDF. On cherche alors à établir des relations algébriques permettant de les exprimer en fonction des quantités connues et en tenant compte de la structure réactive de l'écoulement.

Dans un premier temps, on considère que la masse volumique est constante. L'équation de continuité implique donc que la divergence de la vitesse est nulle, ce qui permet d'écrire :

$$\overline{\tau_{ik}\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} = \overline{\rho\nu\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}\frac{\partial u_i}{\partial x_k}} \qquad \overline{\tau_{ik}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}} = \overline{\rho\nu\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial u_i}{\partial x_k}} \tag{5.13}$$

Si maintenant on considère que le nombre de Reynolds est grand et que le nombre de Schmidt est égal à l'unité ($D = \nu$), on peut écrire :

$$\overline{\rho}\epsilon_i^Y = 2\overline{\rho D\frac{\partial Y}{\partial x_k}\frac{\partial u_i}{\partial x_k}} = 2\overline{\rho D\frac{\partial Y}{\partial x_k}\frac{\partial Y}{\partial x_k}\frac{\partial u_i}{\partial Y}} \quad \overline{\rho}\epsilon_i^\xi = 2\overline{\rho D\frac{\partial \xi}{\partial x_k}\frac{\partial u_i}{\partial x_k}} = 2\overline{\rho D\frac{\partial \xi}{\partial x_k}\frac{\partial \xi}{\partial x_k}\frac{\partial u_i}{\partial \xi}} \tag{5.14}$$

Enfin, on estime que la vitesse évolue linéairement d'une poche de gaz à l'état 1 à une poche de gaz à l'état 2, ce qui implique que la dérivée instantanée de vitesse par rapport au scalaire est constante :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u_i}{\partial Y} &= \frac{(\overline{u}_{i2} - \overline{u}_{i1})}{(Y_2 - Y_1)} = \frac{\mu\,(1-\mu)\,(Y_2 - Y_1)\,(\overline{u}_{i2} - \overline{u}_{i1})}{\mu\,(1-\mu)\,(Y_2 - Y_1)^2} = \frac{\widetilde{u_i''Y''}}{\widetilde{Y''^2}} \\
\frac{\partial u_i}{\partial \xi} &= \frac{(\overline{u}_{i2} - \overline{u}_{i1})}{(\xi_b - \xi_a)} = \frac{\alpha\,(1-\alpha)\,(\xi_b - \xi_a)\,(\overline{u}_{i2} - \overline{u}_{i1})}{\alpha\,(1-\alpha)\,(\xi_b - \xi_a)^2} = \frac{\widetilde{u_i''\xi''}}{\widetilde{\xi''^2}}
\end{aligned} \tag{5.15}$$

Les termes de dissipation des flux turbulents des scalaires s'expriment alors en fonction des quantités moyennes et des dissipations des variances des scalaires :

$$\overline{\rho}\epsilon_i^Y = \overline{\rho}\epsilon_Y\frac{\widetilde{u_i''Y''}}{\widetilde{Y''^2}} \qquad \overline{\rho}\epsilon_i^\xi = \overline{\rho}\epsilon_\xi\frac{\widetilde{u_i''\xi''}}{\widetilde{\xi''^2}} = \frac{\overline{\rho u_i''\xi''}}{R_\xi\tau_t} \tag{5.16}$$

On constate que si les dissipations des scalaires sont fermées par un modèle de relaxation linéaire, ce qui est le cas pour le scalaire passif, alors les dissipations des flux turbulents s'expriment également par un modèle de relaxation linéaire. Comme la dissipation du scalaire réactif $\overline{\rho}\epsilon_Y$ est fortement dépendante de la réaction chimique, la dissipation des flux turbulents de fraction massique de combustible $\overline{\rho}\epsilon_i^Y$ l'est également.

Ces fermetures des termes de dissipation des flux turbulents semblent satisfaisantes car elles permettent de retrouver le modèle habituel pour le scalaire passif. Par ailleurs le modèle du scalaire réactif dépend effectivement de la réaction chimique.

5.2.4 Termes de Corrélation Scalaire-Pression

Comme nous l'avons vu dans la première partie, les termes de corrélation scalaire-pression sont très importants car ils sont responsables du mécanisme de diffusion à contre-gradient. Contrairement à ce qui a été fait dans les premières études sur le sujet, nous

n'allons pas décomposer les termes H_i^{ξ} et H_i^{Y} en une partie liée au gradient de pression moyen et une partie liée aux fluctuations de pression, mais plutôt modéliser les termes dans leur globalité. Le modèle que nous utilisons ici pour fermer ces termes est détaillé et comparé avec des résultats de simulations numériques directes dans le chapitre 7. Le point de départ de l'analyse est l'étude de Domingo et Bray décrite au chapitre 3. L'analyse est développée dans le cadre du formalisme déjà décrit du modèle LW-P et étendue au cas des prémélanges partiels.

5.3 Equations pour les Tensions de Reynolds

Les modèles classiques de fermeture des termes de dissipation et de corrélation vitesse-pression qui apparaissent dans les équations pour les tensions de Reynolds tel que celui proposé par Launder, Reece et Rodi [46] ne permettent pas de prendre en compte les effets de la flamme sur la turbulence. Nous proposons ici de nouvelles fermetures tenant compte de la structure réactive de l'écoulement.

5.3.1 Terme de Dissipation

La turbulence aux petites échelles correspondant au phénomène de dissipation généré par les transports moléculaires est généralement considérée comme isotrope. De ce fait les composantes ϵ_{ij} du tenseur de dissipation peuvent s'exprimer en fonction de la dissipation ϵ.

$$\overline{\rho}\epsilon_{ij} = \overline{\tau_{jk}\frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} + \overline{\tau_{ik}\frac{\partial u_j''}{\partial x_k}} = \frac{2}{3}\overline{\rho}\epsilon\delta_{ij} \tag{5.17}$$

Une équation de transport pour la dissipation turbulente ϵ doit alors être utilisée, cf Eq. (1.46).

La présence de flammes dans l'écoulement a une influence importante sur les gradients locaux de vitesse et donc sur la dissipation turbulente. De ce fait, l'hypothèse d'isotropie utilisée pour la dissipation turbulente a de grandes chances d'être mise en défaut par la présence de flammes. Pour caractériser une telle anisotropie engendrée par la combustion, on peut envisager de résoudre chaque composante de la dissipation turbulente ϵ_{ij} par une équation de transport dont les termes prendraient en compte le phénomène de combustion.

Cependant, cette technique augmenterait encore le nombre d'équations à résoudre, qui est déjà important. Pour prendre en compte cette anisotropie sans résoudre des équations de transport supplémentaires, on décompose la dissipation turbulente en une partie réactive et une partie non réactive :

$$\overline{\rho}\epsilon_{ij} = [\overline{\rho}\epsilon_{ij}]_{NR} + [\overline{\rho}\epsilon_{ij}]_{R} \tag{5.18}$$

La partie non réactive est considérée isotrope et est calculée par la résolution de l'équation pour ϵ :

$$[\overline{\rho}\epsilon_{ij}]_{NR} = \frac{2}{3}\overline{\rho}\epsilon\delta_{ij} \tag{5.19}$$

La partie réactive est exprimée en utilisant les mêmes hypothèses que celles utilisées pour exprimer les dissipations des flux turbulents $\overline{\rho}\epsilon_i^Y$ et $\overline{\rho}\epsilon_i^\xi$. Si la masse volumique est constante et que le nombre de Reynolds est grand alors on peut écrire :

$$[\overline{\rho}\epsilon_{ij}]_{R} = \left[2\overline{\rho\nu\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\frac{\partial u_j}{\partial x_k}}\right]_R = \left[2\overline{\rho\nu\frac{\partial u_i}{\partial Y}\frac{\partial u_j}{\partial Y}\frac{\partial Y}{\partial x_k}\frac{\partial Y}{\partial x_k}}\right]_R \tag{5.20}$$

Supposant maintenant que le nombre de Schmidt est égal à l'unité et que les gradients de vitesse par rapport à Y peuvent s'exprimer par la relation (5.15). On peut alors écrire :

$$[\overline{\rho}\epsilon_{ij}]_{R} = \overline{\rho}\epsilon_Y \frac{\widetilde{u_i''Y''}\widetilde{u_j''Y''}}{\left(\widetilde{Y''^2}\right)^2} \tag{5.21}$$

Finalement, les composantes de la dissipation turbulente s'expriment de la façon suivante :

$$\overline{\rho}\epsilon_{ij} = \frac{2}{3}\overline{\rho}\epsilon\delta_{ij} + \overline{\rho}\epsilon_Y \frac{\widetilde{u_i''Y''}\widetilde{u_j''Y''}}{\left(\widetilde{Y''^2}\right)^2} \tag{5.22}$$

5.3.2 Terme de Corrélation Vitesse-Pression

La méthode utilisée pour fermer ces termes est la même que celle utilisée pour fermer les termes de corrélation scalaire-pression. Ils sont également très importants car responsables de la production de turbulence par la flamme. Le modèle sera présenté au chapitre 7.

5.4 Conclusions

Les termes inconnus des équations de transports résolues dans le contexte du modèle LW-P (premier et second ordre) ont été traités dans ce chapitre. Les modèles de fermeture proposés prennent en compte la structure réactive de l'écoulement, y compris les modèles des termes des équations pour les tensions de Reynolds et pour le taux dissipation de la turbulence.

Les fermetures des taux de dissipation des scalaires ainsi que les fermetures des termes de corrélation avec la pression qui jouent des rôles cruciaux dans la modélisation de la combustion turbulente sont développées respectivement dans les chapitres 6 et 7.

Chapitre 6

Dissipations Scalaires

Dans les trois équations de transport pour les seconds moments des scalaires ξ et Y, soit $\overline{\rho\xi''^2}$, $\overline{\rho Y''^2}$ et $\overline{\rho\xi''Y''}$, apparaissent trois termes de dissipation définis par les équations (1.47) : ϵ_ξ, ϵ_Y, $\epsilon_{Y\xi}$. Comme nous l'avons vu au paragraphe 1.3.1 du chapitre 1, la dissipation du scalaire passif ϵ_ξ peut être modélisée par un modèle usuel de relaxation ; comme celui défini par l'équation (1.48).

Concernant maintenant les termes de dissipation des fluctuations de la variable réactive Y nous avons rappelé, cf Eq. (2.17), que dans le cas d'un prémélange parfait et du régime de "flammes plissées", la dissipation scalaire ϵ_Y est directement reliée au taux de réaction chimique moyen par une relation algébrique simple. Dans le cas général où la combustion s'écarte du régime de flammelettes et où le prémélange n'est que partiel, l'expression du taux de dissipation de Y doit être bien entendu revue, la relation (2.17) ne représentant qu'une limite possible.

Dans le cas d'un prémélange parfait en régime de "flammes épaissies", la dissipation scalaire est pilotée par le mélange turbulent et se comporte donc comme la dissipation d'un scalaire passif. Le modèle habituel de relaxation linéaire (1.48) peut être utilisé dans ce cas.

Notre objectif est de proposer un modèle de dissipation, tout d'abord en prémélange parfait, qui soit applicable à tous les régimes de combustion. Le modèle doit donc pouvoir retrouver les deux limites des "flammes plissées" et des "flammes épaissies". Le modèle de dissipation sera ensuite étendu pour prendre en compte les prémélanges partiels.

On pourrait dériver une équation de transport pour la dissipation puis la fermer [53, 59]. Dans la mesure où la fermeture d'une telle équation dans toute sa généralité pose encore des problèmes et aussi pour des raisons de simplicité du modèle, nous choisirons d'utiliser une fermeture algébrique plus simple. Cette fermeture doit permettre de retrouver les comportements limites tels qu'ils peuvent *a priori* être obtenus à partir de la résolution de l'équation de transport de ϵ_Y(Mura et al. [61]).

L'analyse décrite dans les paragraphes qui suivent a été publiée dans "Combustion and Flame" [61]. Elle a par ailleurs été validée dans le cadre de la simulation des flammes turbulentes stratifiées [80, 81].

6.1 Prémélange Parfait

Nous considérons dans un premier temps un prémélange parfait, caractérisé par la variable d'avancement Y.

Le modèle de dissipation proposé pour les prémélanges parfaits doit tenir compte des deux régimes limites des "flammes plissées" et des "flammes épaissies". Dans la limite des flammes plissées on montre que

$$\overline{\rho}\epsilon_Y = -2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k} - \overline{\omega}\left(Y_{max} - 2\widetilde{Y} + Y_{min}\right) + 2\overline{\omega Y''} \tag{6.1}$$

La démonstration analytique de cette expression de la dissipation en régime de "flammes plissées" est détaillé en annexe A. Lorsque l'on considère un nombre de Reynolds élevé, les termes de gradients moyens peuvent être négligés, soit :

$$\overline{\rho}\epsilon_Y = -\overline{\omega}\left(Y_{max} - 2\widetilde{Y} + Y_{min}\right) + 2\overline{\omega Y''} \tag{6.2}$$

Concernant maintenant la limite des flammes épaissies un modèle de relaxation linéaire peut être utilisé :

$$\overline{\rho}\epsilon_Y = \frac{\overline{\rho Y''^2}}{\tau_Y} = \frac{\overline{\rho Y''^2}}{R_Y\tau_t} \tag{6.3}$$

On fait maintenant l'hypothèse que le passage d'une limite à l'autre dépend d'une

fonction de ségrégation S_Y définissant l'état de fluctuation de Y :

$$\begin{aligned} \overline{\rho}\epsilon_Y &= S_Y\left(-\overline{\omega}\left(Y_{max}-2\widetilde{Y}+Y_{min}\right)+2\overline{\omega Y''}\right) \\ &+ (1-S_Y)\left(\frac{\overline{\rho Y''^2}}{R_Y\tau_t}\right) \end{aligned} \tag{6.4}$$

Ce facteur de ségrégation, normalisé entre 0 et 1 s'exprime par :

$$S_Y = \frac{\widetilde{Y''^2}}{(Y_{max}-\widetilde{Y})(\widetilde{Y}-Y_{min})} \tag{6.5}$$

Lorsque $S_Y \to 0$, on atteint le régime de flammes infiniment épaisses et on retrouve la fermeture (6.3) pour la dissipation. Lorsque $S_Y \to 1$, on est en régime de flammelettes et on retrouve la fermeture (6.2).

6.2 Prémélange Partiel

Dans le cas plus général où le prémélange est partiel, l'état de l'écoulement dépend des deux variables ξ et Y. La dissipation du scalaire passif est modélisable par l'équation (1.48) et il reste deux termes de dissipation à modéliser : $\overline{\rho\epsilon_Y}$ et $\overline{\rho\epsilon_{\xi Y}}$.

Dans le cas du régime de "flammes épaissies", on peut utiliser le modèle de relaxation linéaire pour ces deux dissipations :

$$\overline{\rho}\epsilon_Y = \frac{\overline{\rho Y''^2}}{\tau_Y} = \frac{\overline{\rho Y''^2}}{R_Y\tau_t} \qquad \overline{\rho}\epsilon_{Y\xi} = \frac{\overline{\rho Y''\xi''}}{\tau_{Y\xi}} = \frac{\overline{\rho Y''\xi''}}{R_{Y\xi}\tau_t} \tag{6.6}$$

En revanche, il reste à établir les expressions des dissipations $\overline{\rho}\epsilon_Y$ et $\overline{\rho}\epsilon_{\xi Y}$ dans le cas d'un régime de "flammes plissées". Pour les obtenir, on conduit une analyse analogue à celle qui a mené à l'équation (6.2), et applicable aux mélanges partiels.

La bimodalité de la PDF est supposée exister quelle que soit la richesse. Cependant, Y_{max} et Y_{min} sont maintenant des fonctions de la fraction de mélange, données par les équations (4.2) et (4.3). On peut démontrer que (cf annexe A) :

$$\begin{aligned} 2\rho D\frac{\partial(Y_{\max}-Y)}{\partial x_k}\frac{\partial(Y-Y_{\min})}{\partial x_k} &= \omega\left(Y_{\max}-2Y+Y_{\min}\right) \\ &+\frac{(Y_{\max}-Y)}{1-\xi_{st}}\left(2\rho D\frac{\partial\xi}{\partial x_k}\frac{\partial\xi}{\partial x_k}\right)\delta\left(\xi-\xi_{st}\right) \end{aligned} \tag{6.7}$$

En remplaçant Y_{max} et Y_{min} par les relations (4.2) et (4.3), on obtient :

$$\begin{aligned} 2A(\xi)\rho D\frac{\partial\xi}{\partial x_k}\frac{\partial\xi}{\partial x_k}+2\rho D\frac{\partial\xi}{\partial x_k}\frac{\partial Y}{\partial x_k} &+ 2A(\xi)\rho D\frac{\partial Y}{\partial x_k}\frac{\partial\xi}{\partial x_k}+2\rho D\frac{\partial Y}{\partial x_k}\frac{\partial Y}{\partial x_k} \\ &= \omega\left(Y_{\max}-2Y+Y_{\min}\right) \\ &+ \frac{(\xi-Y)}{1-\xi_{st}}\left(\rho D\frac{\partial\xi}{\partial x_k}\frac{\partial\xi}{\partial x_k}\right)\delta\left(\xi-\xi_{st}\right) \end{aligned} \tag{6.8}$$

Le dernier terme du membre de droite est négligé. Ce terme fait intervenir la dissipation du scalaire passif conditionnée à la stœchiométrie, Il peut devenir non négligeable dans les flammes de diffusion. Les fluctuations de A autour de la stœchiométrie sont aussi négligées, soit $A''=0$. Cette hypothèse permet d'exprimer facilement les valeurs moyennes de Y_{max} et Y_{min} :

$$\widetilde{Y}_{\min}=\widetilde{A}(\widetilde{\xi}-\xi_{st}) \qquad Y''_{\min}=\widetilde{A}\xi'' \tag{6.9}$$

L'équation (6.8) est moyennée en prenant en compte les hypothèses précédentes et en considérant un grand nombre de Reynolds :

$$-\left(1+\widetilde{A}\right)\overline{\rho}\epsilon_{Y\xi}+\widetilde{A}\overline{\rho}\epsilon_{\xi}+\overline{\rho}\epsilon_{Y}=-\overline{\omega}\left(\widetilde{Y}_{\max}-2\widetilde{Y}+\widetilde{Y}_{\min}\right)-\left(1+\widetilde{A}\right)\overline{\omega\xi''}+2\overline{\omega Y''} \tag{6.10}$$

Si on considère un prémélange parfait, c'est-à-dire $\widetilde{\xi}=cte$ et $\xi''=0$, l'équation (6.10) dégénère alors vers l'équation (6.2).

L'équation (6.10) fournit une relation entre les trois dissipations scalaires moyennes $\overline{\rho}\epsilon_{\xi}$, $\overline{\rho}\epsilon_{Y}$ et $\overline{\rho}\epsilon_{Y\xi}$ en régime de "flammes plissées". La dissipation du scalaire passif $\overline{\rho}\epsilon_{\xi}$ est fermée mais les deux autres dissipations sont toujours inconnues.

Afin d'avoir une idée des expressions de ces dissipations $\overline{\rho}\epsilon_{Y}$ et $\overline{\rho}\epsilon_{Y\xi}$ à la limite du régime de "flammes plissées" nous avons tout d'abord cherché à exprimer les valeurs de la variance $\widetilde{Y''^2}$ et de la covariance $\widetilde{Y''\xi''}$ lorsque cette limite est atteinte.

6.2.1 Expressions des Seconds Moments dans le Régime des "Flammes Plissées"

En prémélange partiel, les fluctuations du scalaire réactif Y sont dues à la fois à la réaction chimique et au mélange turbulent. Dans les gaz frais : $\widetilde{Y''^2}=\widetilde{Y''\xi''}=\widetilde{\xi''^2}$ les fluctuations de Y sont directement reliées aux fluctuations du scalaire passif ξ.

On peut démontrer (cf annexe A) que les valeurs de la variance $\widetilde{Y''^2}$ et de la covariance $\widetilde{Y''\xi''}$ à la limite où le régime de flammes infiniment minces est atteint s'expriment de la façon suivante :

$$\begin{aligned}\widetilde{Y''^2} &= (\widetilde{Y}_{\max} - \widetilde{Y})(\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{\min}) + \left(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A}^2\right)\widetilde{\xi''^2} \\ \widetilde{Y''\xi''} &= \left(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A}\right)\widetilde{\xi''^2}\end{aligned} \tag{6.11}$$

avec

$$\lambda = \frac{\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{\min}}{\widetilde{Y}_{\max} - \widetilde{Y}_{\min}} \qquad \text{et} \qquad (1-\lambda) = \frac{\widetilde{Y}_{\max} - \widetilde{Y}}{\widetilde{Y}_{\max} - \widetilde{Y}_{\min}} \tag{6.12}$$

Le premier terme du membre de droite de la relation exprimant la valeur limite de la variance de fraction massique $(\widetilde{Y}_{\max} - \widetilde{Y})(\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{\min})$, représente la part de variance due à la réaction chimique et le second terme $\left(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A}^2\right)\widetilde{\xi''^2}$, la part due au mélange turbulent. Dans le cas d'un prémélange parfait, on retrouve bien la relation habituelle : $\widetilde{Y''^2} = (Y_{\max} - \widetilde{Y})(\widetilde{Y} - Y_{\min})$.

Dans les travaux précédemment publiés [61], nous avons proposé d' exprimer les dissipations $\overline{\rho}\epsilon_Y$ et $\overline{\rho}\epsilon_{Y\xi}$ par analogie avec les valeurs limites des variances et covariances lorsque la limite du régime de "flammes plissées" est atteint et de façon à ce que les relations soient en accord avec la relation 6.10 :

$$\overline{\rho}\epsilon_Y = -\overline{\omega}\left(Y_{\max} - 2\widetilde{Y} + Y_{\min}\right) + 2\overline{\omega Y''} + \left(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A}^2\right)\overline{\rho}\epsilon_\xi \tag{6.13}$$

$$\overline{\rho}\epsilon_{Y\xi} = \overline{\omega\xi''} + \left(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A}\right)\overline{\rho}\epsilon_\xi \tag{6.14}$$

Ces relations vérifient bien la relation 6.10 mais on peut obtenir les expressions exactes de $\overline{\rho}\epsilon_Y$ et $\overline{\rho}\epsilon_{Y\xi}$ en écrivant les équations de transport pour les valeurs limites de la variance et de la covariance (6.11), c'est ce qui est fait en annexe A. Les relations obtenues (A.45) et (A.52) sont fermées mais complexes ; en considérant un écoulement à grand nombre de Reynolds et en négligeant les termes d'ordre élevé, on obtient :

$$\begin{aligned}\overline{\rho}\epsilon_Y = &-(\widetilde{Y}_{max} - 2\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_{min})\overline{\omega} + 2\overline{Y''\omega} - \frac{(1+\widetilde{A})(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}}\widetilde{\xi''^2}\overline{\omega} \\ &+(1+\widetilde{A})\left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\left(\overline{\rho}\epsilon_\xi + 2\overline{\rho u_k'' \xi''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right) \\ &+(1+\widetilde{A})\left(-\overline{\rho u_k'' Y''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \xi''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\right) + \widetilde{A}\overline{\rho}\epsilon_\xi\end{aligned} \tag{6.15}$$

$$\overline{\rho}\epsilon_{Y\xi} = \overline{\xi''\omega} + \left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\left(\overline{\rho}\epsilon_{\xi} + 2\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right) - \frac{(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\widetilde{\xi''^2}\overline{\omega} \\ -\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k} \tag{6.16}$$

Maintenant que les expressions des dissipations sont connues pour les cas limites des "flammes plissées" et des "flammes épaissies", le facteur de ségrégation S_Y nous permet de passer d'une limite à une autre :

$$\overline{\rho}\epsilon_Y = S_Y\left(\left[\overline{\rho}\epsilon_Y\right]_f\right) + (1-S_Y)\left(\frac{\overline{\rho Y''^2}}{R_Y\tau_t}\right) \\ \overline{\rho}\epsilon_{Y\xi} = S_Y\left(\left[\overline{\rho}\epsilon_{Y\xi}\right]_f\right) + (1-S_Y)\left(\frac{\overline{\rho Y''\xi''}}{R_{Y\xi}\tau_t}\right) \tag{6.17}$$

où $\left[\overline{\rho}\epsilon_Y\right]_f$ et $\left[\overline{\rho}\epsilon_{Y\xi}\right]_f$ sont les taux de dissipation scalaire, à la limite des flammes infiniment minces, fournis par les relations (6.15) et (6.16). Cette proposition plus générale a été employée pour simuler les flammes en V stratifiées turbulentes étudiées expérimentalement au CORIA [26].

6.2.2 Facteur de Ségrégation S_Y

Le facteur de ségrégation utilisé dans le cas particulier d'un prémélange parfait (6.5) n'est plus valide en prémélange partiel. En effet, contrairement au prémélange parfait, lorsque le régime de "flammes épaissies" est atteint, la variance du scalaire réactif n'est pas nulle ; elle est dans ce cas contrôlée par le mélange turbulent et donc directement fonction de la variance du scalaire passif :

$$\overline{\rho Y''^2} = \left(\overline{\rho Y''^2}\right)_{\min} = \left(\frac{\widetilde{Y}-\widetilde{Y}_{\min}}{\widetilde{Y}_{\max}-\widetilde{Y}_{\min}} + \frac{\widetilde{Y}_{\max}-\widetilde{Y}}{\widetilde{Y}_{\max}-\widetilde{Y}_{\min}}\widetilde{A}^2\right)\overline{\rho\xi''^2} \tag{6.18}$$

On choisit donc d'exprimer le facteur de ségrégation comme suit :

$$S_Y = \frac{\overline{\rho Y''^2} - \left(\overline{\rho Y''^2}\right)_{\min}}{\left(\overline{\rho Y''^2}\right)_{\max} - \left(\overline{\rho Y''^2}\right)_{\min}} \tag{6.19}$$

où $\left(\overline{\rho Y''^2}\right)_{\min}$ représente la variance minimale possible, celle atteinte en régime de "flammes épaissies" (équation (6.18)). $\left(\overline{\rho Y''^2}\right)_{\max}$ représente la variance maximale possible, celle atteinte en régime de flammes infiniment minces (équation (6.11)). On obtient finalement

le facteur de ségrégation suivant :

$$S_Y = \frac{\widetilde{Y''^2} - \left((\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{min})/(\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}) + (\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y})/(\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}) \widetilde{A}^2 \right) \widetilde{\xi''^2}}{(\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y})(\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{min})} \quad (6.20)$$

Lorsque l'on considère un prémélange parfait, cette équation dégénère correctement vers l'équation (6.5).

6.3 Conclusions

Dans ce chapitre nous avons proposé des expressions fermées pour les trois dissipations scalaires qui décrivent le mélange à petite échelle des écoulements turbulents partiellement prémélangés. Ces expressions permettent de retrouver les limites correspondant au régime de flammelettes et au régime de flammes épaissies dans les deux cas : mélange parfait et mélange partiel. Les fermetures sont ainsi applicables à tous les régimes de combustion en accord avec le modèle LW-P.

Les développements analytiques détaillés sont donnés dans l'annexe A. Ces travaux de modélisation des dissipations scalaires en prémélange partiel ont fait l'objet d'un article dans "Combustion and Flame" [61], reportée en annexe C.

Chapitre 7

Modélisation des Effets des Fluctuations de Pression

Ce chapitre est consacré à la modélisation des termes représentant en particulier le couplage entre gradient de pression et dégagement de chaleur H_i^{ξ}, H_i^{Y} et H_{ij} intervenant respectivement dans les équations des flux turbulents du scalaire réactif, des flux turbulents du scalaire passif et des tensions de Reynolds. Ces termes sont responsables du transport turbulent à contre-gradient lorsqu'il se produit et de la production de turbulence par la flamme. Comme ces phénomènes sont dus aussi bien aux effets du gradient de pression moyen que du gradient des fluctuations de pression, les termes sont modélisés globalement et les différentes contributions ne sont pas séparées dans l'analyse.

L'analyse proposée est basée sur une PDF discrète, composée de distributions de Dirac, applicable au modèle LW-P mais aussi à d'autres modèles de combustion turbulente. L'utilisation de cette PDF discrète conduit à l'introduction des gradients de pression moyenne conditionnés dans les différents états du mélange. Ces gradients de pression conditionnés sont déterminés par une méthode inspirée par les travaux de Domingo et Bray [30].

Le modèle finalement obtenu est validé dans le cas d'une flamme plane se propageant dans un mélange de richesse constante, par confrontation avec des résultats issus de simulations numériques directes. Ces travaux de modélisation ont été présentés au "Mediterranean Combustion Symposium" en 2007 [83].

7.1 Utilisation de la PDF

La PDF jointe (au sens de Favre) scalaires-vitesse est composée de nq distributions de Dirac et s'écrit de la façon suivante :

$$\widetilde{P}(u_i, Y, \xi) = \sum_{q=1}^{nq} \alpha_q P(u_i|(Y_q, \xi_q))\delta\left(Y - Y_q\right)\delta\left(\xi - \xi_q\right) \tag{7.1}$$

où (ξ_q, Y_q) est la position du pic q dans l'espace des compositions, α_q son amplitude et nq le nombre de pics qui composent la PDF. nq est égal à 4 avec le modèle LW-P en prémélange partiel mais peut aussi tendre vers l'infini dans le cas d'un modèle à PDF continue. Les vitesses moyennes conditionnées sont définies de la même manière que celles introduites dans la relation 4.21 :

$$\overline{u_i}_q = \int u_i P(u_i|(Y_q, \xi_q))du_i \tag{7.2}$$

Cette PDF nous permet d'exprimer les termes de pression H_i^ξ, H_i^Y et H_{ij} :

$$H_i^\xi = -\overline{\xi''\frac{\partial p}{\partial x_i}} = -\overline{\rho}\widetilde{\xi''\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i}} = -\overline{\rho}\sum_{q=1}^{nq}\alpha_q(\xi_q - \widetilde{\xi})\frac{1}{\rho_q}\left[\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}\right]_q \tag{7.3}$$

$$H_i^Y = -\overline{Y''\frac{\partial p}{\partial x_i}} = -\overline{\rho}\widetilde{Y''\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i}} = -\overline{\rho}\sum_{q=1}^{nq}\alpha_q(Y_q - \widetilde{Y})\frac{1}{\rho_q}\left[\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}\right]_q \tag{7.4}$$

$$\begin{aligned} H_{ij} = -\overline{u_i''\frac{\partial p}{\partial x_j}} - \overline{u_j''\frac{\partial p}{\partial x_i}} = &-\overline{\rho}\sum_{q=1}^{nq}\alpha_q(\overline{u}_{jq} - \widetilde{u_j})\frac{1}{\rho_q}\left[\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}\right]_q + \overline{\rho}\sum_{q=1}^{nq}\alpha_q\frac{1}{\rho_q}\left[-\overline{u_j'\frac{\partial p'}{\partial x_i}}\right]_q \\ &-\overline{\rho}\sum_{q=1}^{nq}\alpha_q(\overline{u}_{iq} - \widetilde{u_i})\frac{1}{\rho_q}\left[\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j}\right]_q + \overline{\rho}\sum_{q=1}^{nq}\alpha_q\frac{1}{\rho_q}\left[-\overline{u_i'\frac{\partial p'}{\partial x_j}}\right]_q \end{aligned} \tag{7.5}$$

Ces expressions font intervenir les gradients de pression moyenne conditionnés en chaque état q. Des corrélations conditionnées supplémentaires apparaissent dans la relation (7.5) pour le terme H_{ij}. Il n'y a pas de corrélation équivalente dans les relations (7.3) et (7.4) car il n'y a pas de fluctuation possible de ξ et Y pour chaque état (ξ=ξ_q,Y=Y_q). Le terme H_{ij} qui représente la corrélation vitesse-gradient de pression peut être divisé en deux

contributions 1 et 2 telles que :

$$H_{ij} = [H_{ij}]_1 + [H_{ij}]_2 \tag{7.6}$$

$$[H_{ij}]_1 = -\overline{\rho}\sum_{q=1}^{nq}\alpha_q(\overline{u}_{iq}-\widetilde{u}_i)\frac{1}{\rho_q}\left[\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_j}\right]_q - \overline{\rho}\sum_{q=1}^{nq}\alpha_q(\overline{u}_{jq}-\widetilde{u}_j)\frac{1}{\rho_q}\left[\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i}\right]_q \tag{7.7}$$

$$[H_{ij}]_2 = \overline{\rho}\sum_{q=1}^{nq}\alpha_q\frac{1}{\rho_q}\left[-\overline{u_i'\frac{\partial p'}{\partial x_j}}\right]_q + \overline{\rho}\sum_{q=1}^{nq}\alpha_q\frac{1}{\rho_q}\left[-\overline{u_j'\frac{\partial p'}{\partial x_i}}\right]_q \tag{7.8}$$

Il est important de noter ici que le terme $[H_{ij}]_2$ est le seul terme non nul lorsqu'il n'y a pas de fluctuations de scalaires (en dehors des zones de combustion et/où de mélange) car il représente les mêmes effets de redistribution de l'énergie par les fluctuations de pression que ceux que l'on observe dans un écoulement de fluide à masse volumique constante. Le modèle adopté pour le terme $[H_{ij}]_2$ doit donc prendre en compte ce mécanisme d'isotropisation de l'écoulement. Il faut remarquer qu'il n'y a pas de terme équivalent dans les expressions H_i^ξ et H_i^Y car les effets de mélange de type "masse volumique constante" sont inclus dans les expressions (7.3) et (7.4).

7.2 Gradients de Pression Moyenne Conditionnés

Les gradients de pression moyenne conditionnés sont décomposés en deux parties, une contribution non-réactive et une contribution réactive :

$$\left[\frac{\partial\overline{p_q}}{\partial x_i}\right]_q = \left[\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i}\right]_q^{NR} + \left[\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i}\right]_q^{R} \tag{7.9}$$

La partie non-réactive est modélisée en introduisant les équations de transport moyennes conditionnées en chaque état q en procédant d'une manière analogue à celle utilisée par Domingo et Bray pour les états représentant les gaz frais et les gaz brûlés du modèle BML :

$$\left[\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i}\right]_q^{NR} = -\rho_q\frac{\partial\overline{u}_{iq}}{\partial t} - \rho_q\overline{u}_{kq}\frac{\partial\overline{u}_{iq}}{\partial x_k} \tag{7.10}$$

La partie réactive est, quant à elle, modélisée en introduisant des relations approchées de flamme plane prémélangée laminaire :

$$\frac{dp}{dn} = -\rho u_n\frac{du_n}{dn} \qquad \omega = \rho u_n\frac{dY}{dn} \qquad \rho u_n = \rho_r|S_L| \tag{7.11}$$

Dans ces relations de flammelettes, $\overrightarrow{n}$ est le vecteur unitaire normal au front de flamme local et dirigé vers les gaz brûlés ($\overrightarrow{n}=\overrightarrow{\nabla Y}/\|\overrightarrow{\nabla Y}\|$), voir figure 7.1. S_L est la vitesse de flamme laminaire, déjà introduite dans la première partie de ce mémoire, et ρ_r la masse volumique des gaz frais.

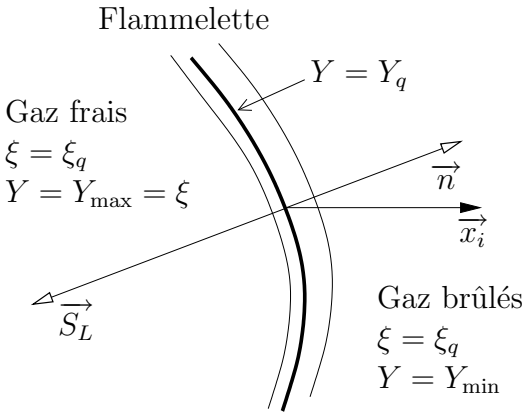


FIG. 7.1 – Définition du vecteur unité normal à la flammelette

Les relations 7.11 précédentes conduisent à l'expression suivante du gradient de pression à travers la flamme locale dans la direction x_i :

$$\frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial p}{\partial n}\frac{\partial n}{\partial x_i} = -\rho u_n \frac{\partial u_n}{\partial Y}\frac{\partial Y}{\partial n}\frac{\partial n}{\partial x_i} = -\omega \frac{\partial u_n}{\partial Y}\frac{\partial n}{\partial x_i} \tag{7.12}$$

$\partial n/\partial x_i$ est directement relié à l'angle entre les vecteurs unitaires $\overrightarrow{n}$ et $\overrightarrow{x_i}$. Si l'on considère maintenant que la dérivée $\partial u_n/\partial Y$ est constante à la traversée de la flamme locale, l'équation de continuité nous permet d'obtenir la relation suivante :

$$\frac{\partial u_n}{\partial Y} = \frac{u_{np} - u_{nr}}{Y_p - Y_r} = -\frac{u_{np} - u_{nr}}{Y_{\max} - Y_{\min}} = -\frac{u_{nr}\left(\frac{\rho_r}{\rho_p} - 1\right)}{Y_{\max} - Y_{\min}} = -\frac{\tau |S_L|}{Y_{\max} - Y_{\min}} \tag{7.13}$$

On remarque que le facteur d'expansion thermique τ, la vitesse de flamme laminaire S_L et les extremums de Y, $Y_{\max}$ et $Y_{\min}$ sont des fonctions de la fraction de mélange.
Finalement, le gradient de pression à travers la flammelette locale s'écrit :

$$\frac{\partial p}{\partial x_i} = \omega \frac{\tau |S_L|}{Y_{\max} - Y_{\min}}\frac{\partial n}{\partial x_i} \tag{7.14}$$

Tenant compte de ces résultats, la partie réactive du gradient de pression moyenne condi-

tionné à l'état q est :

$$\left[\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}\right]_q^R = \omega_q \frac{\tau(\xi_q)|S_L(\xi_q)|}{Y_{\max}(\xi_q) - Y_{\min}(\xi_q)} < \overrightarrow{n}.\overrightarrow{x_i} > = \rho_q \Omega_q \frac{\tau(\xi_q)|S_L(\xi_q)|}{Y_{\max}(\xi_q) - Y_{\min}(\xi_q)} | < \overrightarrow{n}.\overrightarrow{x_i} > \tag{7.15}$$

Compte tenu des expressions (7.10) et (7.15) des parties non-réactives et réactives des gradients de pression moyenne conditionnés, les termes H_i^{ξ}, H_i^Y et $[H_{ij}]_1$ peuvent finalement s'écrire :

$$\begin{aligned} H_i^{\xi} = \left[H_i^{\xi}\right]^{NR} + \left[H_i^{\xi}\right]^{R} = \overline{\rho} \sum_{q=1}^{nq} \alpha_q (\xi_q - \widetilde{\xi}) \left(\frac{\partial \overline{u}_{iq}}{\partial t} + \overline{u}_{kq} \frac{\partial \overline{u}_{iq}}{\partial x_k}\right) \\ -\overline{\rho} \sum_{q=1}^{nq} \alpha_q (\xi_q - \widetilde{\xi}) \Omega_q \frac{\tau(\xi_q)|S_L(\xi_q)|}{Y_{\max}(\xi_q) - Y_{\min}(\xi_q)} < \overrightarrow{n}.\overrightarrow{x_i} > \end{aligned} \tag{7.16}$$

$$\begin{aligned} H_i^{Y} = \left[H_i^{Y}\right]^{NR} + \left[H_i^{Y}\right]^{R} = \overline{\rho} \sum_{q=1}^{nq} \alpha_q (Y_q - \widetilde{Y}) \left(\frac{\partial \overline{u}_{iq}}{\partial t} + \overline{u}_{kq} \frac{\partial \overline{u}_{iq}}{\partial x_k}\right) \\ -\overline{\rho} \sum_{q=1}^{nq} \alpha_q (Y_q - \widetilde{Y}) \Omega_q \frac{\tau(\xi_q)|S_L(\xi_q)|}{Y_{\max}(\xi_q) - Y_{\min}(\xi_q)} < \overrightarrow{n}.\overrightarrow{x_i} > \end{aligned} \tag{7.17}$$

$$\begin{aligned} [H_{ij}]_1 = [H_{ij}]_1^{NR} + [H_{ij}]_1^{R} = \overline{\rho} \sum_{q=1}^{nq} \alpha_q (\overline{u}_{iq} - \widetilde{u_i}) \left(\frac{\partial \overline{u}_{jq}}{\partial t} + \overline{u}_{kq} \frac{\partial \overline{u}_{jq}}{\partial x_k}\right) \\ +\overline{\rho} \sum_{q=1}^{nq} \alpha_q (\overline{u}_{jq} - \widetilde{u_j}) \left(\frac{\partial \overline{u}_{iq}}{\partial t} + \overline{u}_{kq} \frac{\partial \overline{u}_{iq}}{\partial x_k}\right) \\ -\overline{\rho} \sum_{q=1}^{nq} \alpha_q (\overline{u}_{iq} - \widetilde{u_i}) \Omega_q \frac{\tau(\xi_q)|S_L(\xi_q)|}{Y_{\max}(\xi_q) - Y_{\min}(\xi_q)} < \overrightarrow{n}.\overrightarrow{x_j} > \\ -\overline{\rho} \sum_{q=1}^{nq} \alpha_q (\overline{u}_{jq} - \widetilde{u_j}) \Omega_q \frac{\tau(\xi_q)|S_L(\xi_q)|}{Y_{\max}(\xi_q) - Y_{\min}(\xi_q)} | < \overrightarrow{n}.\overrightarrow{x_i} > \end{aligned} \tag{7.18}$$

Le seul terme qu'il reste à modéliser est le terme de $[H_{ij}]_2$ qui représente les effets d'isotropisation induits par les fluctuations de pression.

7.3 Les Effets d'Isotropisation

Pour modéliser le terme $[H_{ij}]_2$, nous utilisons une méthode semblable à celle utilisée par exemple par Djenidi et Antonia [29] pour représenter de façon fermée le terme Φ_{ij} ($\Phi_{ij} = -\overline{u_i'' \partial p'/\partial x_j} - \overline{u_j'' \partial p'/\partial x_i}$) dans le cas des écoulements de fluide à masse volumique constante. Cette méthode consiste à analyser l'équation de transport pour le tenseur

d'anisotropie b_{ij} (1.52) et à constater que l'isotropisation se traduit par un équilibre des termes du membre de droite de cette équation. Dans le cas présent notre objectif est de trouver un modèle pour le terme $[H_{ij}]_2$. L'expression du tenseur d'anisotropie donne alors :

$$\begin{aligned}\left([H_{ij}]_2 - \frac{\widetilde{u_i''u_j''}}{2k}[H_{kk}]_2\right) = C_1\left(\overline{\rho\epsilon_{ij}} - \frac{\widetilde{u_i''u_j''}}{2k}\overline{\rho\epsilon_{kk}}\right) - C_2\left(P_{ij} - \frac{\widetilde{u_i''u_j''}}{2k}P_{kk}\right) \\ -C_3\left([H_{ij}]_1 - \frac{\widetilde{u_i''u_j''}}{2k}[H_{kk}]_1\right)\end{aligned} \tag{7.19}$$

La méthode classique utilisée pour les écoulements à masse volumique constante pour fermer Φ_{ij} (1.54) n'est pas utilisable lorsque la masse volumique varie car l'hypothèse qui permet de négliger la trace Φ_{kk} n'est plus vraie (divergence nulle de la vitesse). En revanche, les corrélations vitesse-pression $\left[\overline{u_i'\partial p'/\partial x_j}\right]_q$ qui composent le terme $[H_{ij}]_2$ sont conditionnées en chaque état q, or la masse volumique en chaque état est constante ; la trace $[H_{kk}]_2$ peut donc être négligée, ce qui permet d'obtenir le terme $[H_{ij}]_2$ à partir de la relation précédente :

$$\begin{aligned}[H_{ij}]_2 = C_1\left(\overline{\rho\epsilon_{ij}} - \frac{\widetilde{u_i''u_j''}}{2k}\overline{\rho\epsilon_{kk}}\right) - C_2\left(P_{ij} - \frac{\widetilde{u_i''u_j''}}{2k}P_{kk}\right) \\ -C_3\left([H_{ij}]_1 - \frac{\widetilde{u_i''u_j''}}{2k}[H_{kk}]_1\right)\end{aligned} \tag{7.20}$$

La pertinence de ce modèle, pour une flamme turbulente en prémélange parfait, est démontrée dans le paragraphe suivant, par confrontation du modèle à une simulation numérique directe 3D d'une flamme plane turbulente.

7.4 Caractéristiques des Bases de Données DNS

La base de données utilisée pour tester ce modèle est l'une de celles obtenues par Nishiki et al. [67, 68] pour trois valeurs différentes du taux d'expansion thermique. Dans ces simulations, une réaction chimique globale irréversible est considérée et l'intensité turbulente est comparable à la vitesse de flamme laminaire, voir tableau 7.1. Le nombre de Reynolds de l'échelle intégrale est $95,5$ pour les trois bases de données ($Re_T = 95,5$). La résolution spatiale du domaine de calcul est de $512 \times 128 \times 128$. La méthode numérique

est basée sur un schéma spectral dans les directions y et z et sur un schéma par différences finies précis au sixième ordre dans la direction x. L'intégration temporelle est réalisée par un schéma Runge Kutta précis au troisième ordre. Plus de détails concernant les bases de données DNS sont fournis dans les articles de Nishiki et al. [67, 68]. Les conditions principales du calcul sont reportées dans le tableau 7.1.

	cas H	cas M	cas L
ρ_r/ρ_p	7,530	5,000	2,500
$S_L(m/s)$	0,600	0,523	0,416
$\delta_L(mm)$	0,217	0,191	0,158
u'/S_L	0,880	1,010	1,260
l_T/δ_L	15,9	18	21,8
Re_T	95,5	95,5	95,5
Da	18,1	17,8	17,3
Ka	0,54	0,55	0,56

TAB. 7.1 – Caractéristiques des bases de données DNS

Dans ces simulations, la flamme moyenne se propage dans le direction x. Les moyennes d'ensemble sont obtenues dans le plan normal à la flamme moyenne (y,z). La vitesse moyenne entrante est ajustée de telle sorte que la flamme turbulente est statistiquement stable dans le domaine de calcul et que les résultats peuvent être moyennés dans le temps. Les résultats sont adimensionnés par la vitesse du son dans les gaz frais ($387m/s$) et par la longueur du domaine de calcul ($4\ mm$).

Les modèles que nous cherchons à valider sont testés uniquement dans le cas H où le taux d'expansion thermique est le plus réaliste, avoisinant la valeur d'un mélange de richesse 0.9 ($\tau = 6,53$).

7.5 Validation du Modèle en Prémélange Parfait

Considérant le cas d'un mélange parfait combustible-air, les termes $\tau(\xi_q)$, $S_L(\xi_q)$, $Y_{\max}(\xi_q)$ et $Y_{\min}(\xi_q)$ sont alors constants et les expressions (7.17), (7.18) s'écrivent :

$$H_i^Y = \overline{\rho}\sum_{q=1}^{nq}\alpha_q(Y_q-\widetilde{Y})\left(\frac{\partial\overline{u}_{iq}}{\partial t}+\overline{u}_{kq}\frac{\partial\overline{u}_{iq}}{\partial x_k}\right)-\frac{\tau|S_L|}{Y_{\max}-Y_{\min}}\overline{\omega Y''}<\overrightarrow{n}.\overrightarrow{x_i}> \tag{7.21}$$

$$\begin{aligned}[H_{ij}]_1 = {}& \overline{\rho}\sum_{q=1}^{nq}\alpha_q(\overline{u}_{iq}-\widetilde{u_i})\left(\frac{\partial\overline{u}_{jq}}{\partial t}+\overline{u}_{kq}\frac{\partial\overline{u}_{jq}}{\partial x_k}\right)-\frac{\tau|S_L|}{Y_{\max}-Y_{\min}}\overline{\omega u_i''}<\overrightarrow{n}.\overrightarrow{x_j}> \\ & +\overline{\rho}\sum_{q=1}^{nq}\alpha_q(\overline{u}_{jq}-\widetilde{u_j})\left(\frac{\partial\overline{u}_{iq}}{\partial t}+\overline{u}_{kq}\frac{\partial\overline{u}_{iq}}{\partial x_k}\right)-\frac{\tau|S_L|}{Y_{\max}-Y_{\min}}\overline{\omega u_j''}<\overrightarrow{n}.\overrightarrow{x_i}>\end{aligned} \tag{7.22}$$

Pour déterminer complètement ces termes de pression, le nombre de distributions de Dirac qui composent la PDF doit être défini. Avec le modèle LW-P en prémélange parfait ce nombre est $nq = 2$.

Il est important de remarquer que lorsque le modèle BML est utilisé, les parties non-réactives sont composées de deux pics de Dirac situés dans les gaz frais et les gaz brûlés ; dans ce cas, les parties non-réactives des relations (7.21) et (7.22) sont les mêmes que celles obtenues par le modèle proposé par Domingo et Bray. De plus, la principale différence existant entre les modèles LW-P et BML est que la PDF considérée avec LW-P n'est composée que de deux pics de Dirac qui sont situés à l'intérieur du domaine, ces pics sont donc réactifs, alors que la PDF du modèle BML est composée de deux pics non-réactifs (gaz frais et gaz brûlés) et d'un fond réactif. Toutefois, lorsque le régime de flamme infiniment mince est atteint (nombre de Damkölher infini), la structure de la PDF du modèle LW-P devient identique à celle de la PDF du modèle BML [21].

Pour calculer les parties non-réactives des relations (7.21) et (7.22) nous fixons $nq = 2$ et nous calculons les paramètres Y_q et $\overline{u}_{iq}$ à l'aide du modèle LW-P. Afin de tester les modèles pour les termes de pression H_i^Y et H_{ij} sans que le résultat ne soit trop dépendant du modèle choisi pour le taux de production chimique moyen, le terme $\overline{\omega Y''}$ de la partie réactive est directement extrait de la base de données DNS. De plus, le terme $\overline{u_i''\omega}$ est calculé à partir de la relation de flammelettes suivante :

$$\overline{u_i''\omega} = \frac{\overline{\rho u_i'' Y''}}{\overline{\rho Y''^2}}\overline{Y''\omega} \tag{7.23}$$

Cette relation est exacte en considérant le modèle LW-P en prémélange parfait (2 pics).

La valeur du cosinus directeur $< \overrightarrow{n}.\overrightarrow{x_i} >$ est estimée à partir de la base de données DNS à 0.8. La variable d'avancement Y est adimensionnée de telle sorte que $Y = 1$ dans les gaz frais ($Y_{\max}$) et $Y = 0$ dans les gaz brûlés ($Y_{\min}$).

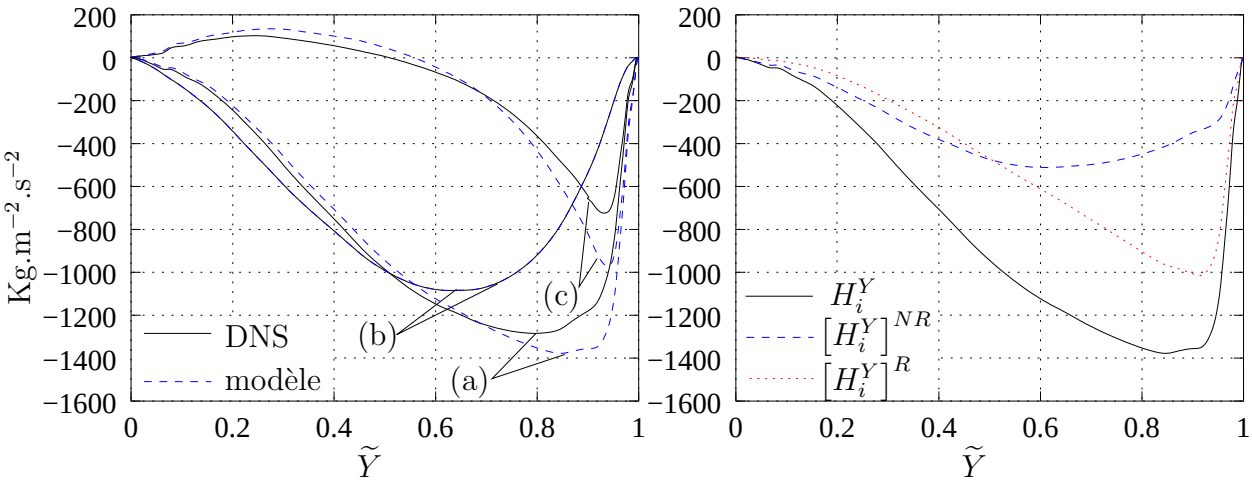


FIG. 7.2 – Validation du modèle pour le terme de corrélation scalaire-pression par comparaison avec la base de données DNS : (a)=$-\overline{Y''\partial p/\partial x}$=$H_i^Y$, (b)=$-\overline{Y''}\partial\overline{p}/\partial x$, (c)=$-\overline{Y''\partial p'/\partial x}$

Le premier graphique de la figure 7.2 montre le terme H_i^Y extrait de la base de données et celui évalué avec la relation 7.21. Les termes de corrélation avec le gradient de pression moyen $-\overline{Y''}\partial\overline{p}/\partial x$, obtenus avec le modèle et avec la base de données, sont identiques. Les résultats obtenus avec le modèle pour les termes $-\overline{Y''\partial p/\partial x}$ et $-\overline{Y''\partial p'/\partial x}$ sont tout à fait satisfaisants malgré un léger écart du côté des gaz frais ($\widetilde{Y} > 0.8$). La partie liée au gradient de pression moyen est plus importante que celle liée au gradient des fluctuations de pression. La partie fluctuante est comme prévue par l'analyse, du même ordre de grandeur que la partie moyenne, ce qui confirme l'importance de sa modélisation.

Le second graphique de la figure 7.2 montre l'importance de chacune des parties non-réactives $\left[H_i^Y\right]^{NR}$ et réactives $\left[H_i^Y\right]^{R}$ du modèle pour H_i^Y. Les deux contributions sont du même ordre de grandeur avec une partie réactive légèrement plus importante du côté des gaz frais.

Les valeurs des constantes C_1 et C_2, introduites par l'expression 7.20 du terme d'isotropisation $[H_{ij}]_2$, sont identiques à celles habituellement utilisées dans les modèles à masse

volumique constante (C_1=1.8 et C_2=0.6), voir tableau 1.2.

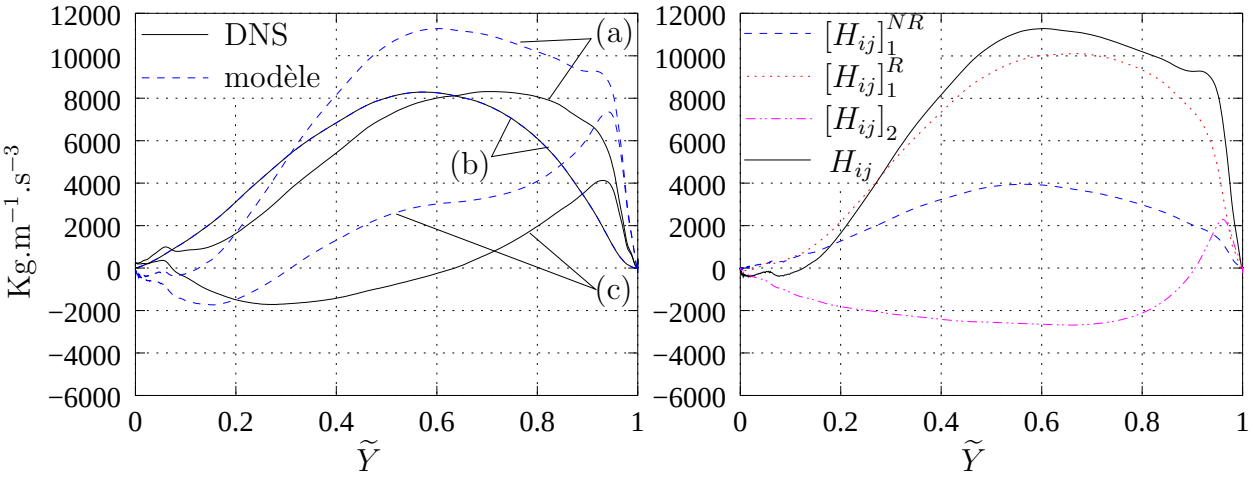


FIG. 7.3 – Validation du modèle pour le terme de corrélation vitesse-pression par comparaison avec la base de données DNS - C_3=0 : (a)=$-2\overline{u''\partial p/\partial x}$=$H_{ij}$, (b)=$-2\overline{u''}\partial\overline{p}/\partial x$, (c)=$-2\overline{u''\partial p'/\partial x}$

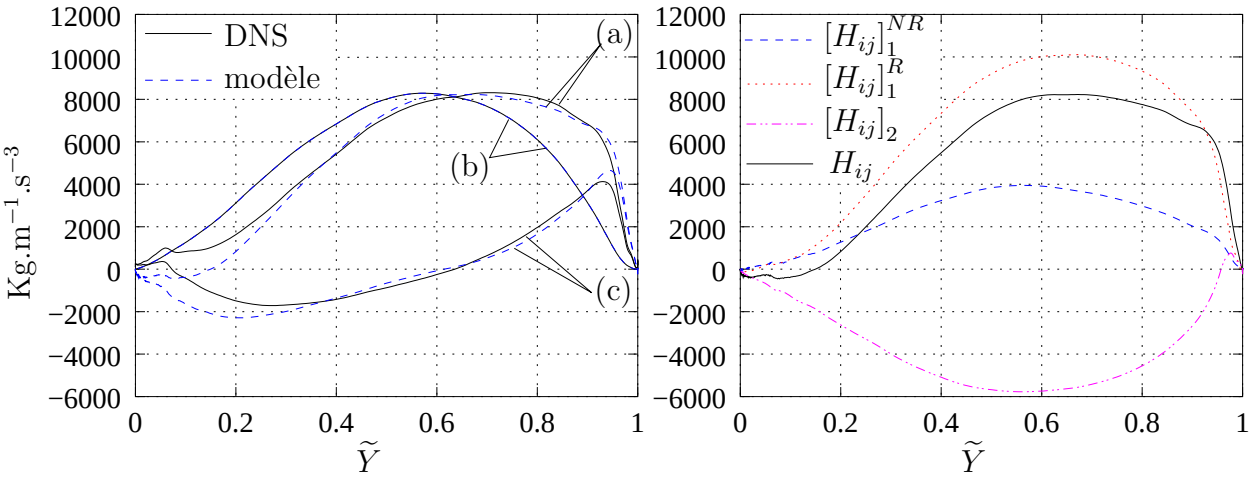


FIG. 7.4 – Validation du modèle pour le terme de corrélation vitesse-pression par comparaison avec la base de données DNS - C_3=0,9 : (a)=$-2\overline{u''\partial p/\partial x}$=$H_{ij}$, (b)=$-2\overline{u''}\partial\overline{p}/\partial x$, (c)=$-2\overline{u''\partial p'/\partial x}$

Les graphiques de gauche des figures 7.3 et 7.4 comparent les termes H_{ij} obtenus par le modèle à ceux extraits de la base de données. Les résultats de la figure 7.3 ont été obtenus avec une valeur nulle de la constante C_3 issue de la relation 7.20 ; alors que les résultats de la figure 7.4 ont été obtenus avec $C_3 = 0.9$.

Là encore, on constate que la partie du terme H_{ij} liée au gradient de pression moyen

est plus importante que celle liée au gradient des fluctuations de pression dans la plus grande partie de la flamme même si cette dernière n'est pas négligeable.

Les graphiques de droites des figures 7.3 et 7.4 montrent les contributions des parties non-réactives $[H_{ij}]_1^{NR}$, réactives $[H_{ij}]_1^R$ et d'isotropisation $[H_{ij}]_2$ dans le terme global H_{ij}. Nous pouvons remarquer, dans ces graphiques, l'importance du terme d'isotropisation de l'écoulement et notamment celle du terme d'isotropisation des effets de production de turbulence par la flamme lorsque $C_3 = 0.9$ (isotropisation de $[H_{ij}]_1$). Le modèle pour le terme H_{ij} retenant la valeur $C_3 = 0.9$ est en très bon accord avec les résultats de la base de données, seule une très petite différence est observée du côté des gaz brûlés.

7.6 Conclusions

Une fermeture générale des termes représentant les interactions pression-chimie des équations de transport des flux turbulents de scalaires et des tensions de Reynolds est proposée dans ce chapitre. Cette méthode est applicable au prémélange partiel et plutôt pour des régimes de combustion où la chimie est rapide car une relation de flamme laminaire est utilisée. Cependant, la méthode peut-être utilisée avec des modèles de combustion turbulente qui peuvent représenter le régime des "flammes épaissies" comme le modèle LW-P. La méthode est basée sur l'utilisation d'une PDF écrite comme une somme de distributions de Dirac, qui permet de relier les termes de pression directement au taux de production chimique. Une généralisation de la méthode déjà utilisée pour les écoulements inertes pour analyser les effets de retour à l'isotropie est utilisée pour représenter les fluctuations de pression conditionnées par la masse volumique. Le modèle est testé avec succès en prémélange parfait grâce à une base de données DNS 3D de flamme plane prémélangée turbulente.

Le modèle de combustion LW-P présenté dans les chapitres précédents a été implanté dans le logiciel généraliste de mécanique des fluides *Code-Saturne* développé par EDF [1]. *Code-Saturne* est un logiciel de résolution des équations de Navier-Stokes pour les

écoulements de fluide incompressible (faible nombre de Mach) basé sur une approche de discrétisation de type volume fini. Des détails concernant ce code de calcul et l'implantation du modèle LW-P sont présentés en annexe B

Troisième partie

Résultats des Simulations Numériques

Chapitre 8

Simulation du Premier Ordre d'un Ecoulement Turbulent Réactif Stabilisé en Aval d'un Elargissement Brusque

Les résultats numériques présentés dans ce chapitre ont été obtenus avec le modèle de combustion turbulente LW-P du premier ordre. Une comparaison est effectuée entre les résultats obtenus avec un modèle de relaxation linéaire des fluctuations scalaires et la fermeture généralisée de la dissipation scalaire moyenne décrite au chapitre 6. Le modèle de turbulence associé est le modèle $k - \epsilon$. Une partie des résultats de ces travaux a été présentée au colloque ICDERS de 2005 [78] et a fait l'objet d'un article publié dans "Combustion Science and Technology" [79] reporté en annexe C.

La géométrie utilisée pour cette première application est fournie par le banc d'essai ORACLES (One Rig for Accurate Comparisons with Large Eddy Simulation) mis en place au Laboratoire de Combustion et Détonique de Poitiers et qui permet d'étudier la combustion turbulente de mélanges de propane et d'air stabilisée en aval d'un élargissement brusque. Une première étude expérimentale de l'écoulement réactif dans cette géométrie a été effectuée par M. Besson [7]. Dans la mesure où la chambre de combustion est alimentée par deux canaux distincts, ORACLES est prévu pour que la combustion puisse avoir lieu

en prémélange partiel.

Dans un premier temps, la simulation numérique des écoulements dans les canaux d'entrée est effectuée. Les résultats obtenus nous permettent d'appliquer correctement les conditions aux limites du domaine de calcul utilisé pour les simulations de la chambre de combustion. Dans un second temps, la simulation numérique de l'écoulement dans la chambre de combustion est effectuée pour différentes conditions de fonctionnement. Tout d'abord, le modèle $k - \epsilon$ est utilisé pour la simulation d'un écoulement non réactif. Ensuite, le modèle LW-P du premier ordre est utilisé pour simuler des écoulements réactifs parfaitement et partiellement mélangés.

8.1 Description de la Configuration ORACLES

Le banc d'essai ORACLES est constitué d'une chambre de combustion de section rectangulaire alimentée par deux canaux notés (1) et (2) où s'écoulent des mélanges d'air et de propane, comme illustré par la figure 8.1. Les richesses de ces deux mélanges, en amont de la chambre de combustion, peuvent être différentes.

Le dispositif expérimental comporte quatre parties principales :

- les lignes d'alimentation et les chambres de mélange,
- la section d'établissement des écoulements incidents,
- la chambre de combustion,
- le système d'évacuation.

Les deux premières parties permettent de contrôler très précisément le mélange de propane et d'air des deux canaux et le champ de vitesse à l'entrée de la chambre de combustion. En particulier, les canaux d'entrée sont suffisamment longs pour que la turbulence de l'écoulement juste en amont de la chambre de combustion soit pleinement développée. La chambre de combustion de section rectangulaire est constituée d'un matériau réfractaire afin de limiter les pertes thermiques au niveau des parois. Différents systèmes de fenêtres, fentes et trous fournissent des accès pour des faisceaux laser ou des sondes dans la chambre de combustion. Enfin, les gaz brûlés sont refroidis et filtrés avant d'être rejetés dans l'atmosphère.

Les dimensions précises de la partie utile du banc d'essai sont données sur le schéma 8.2.

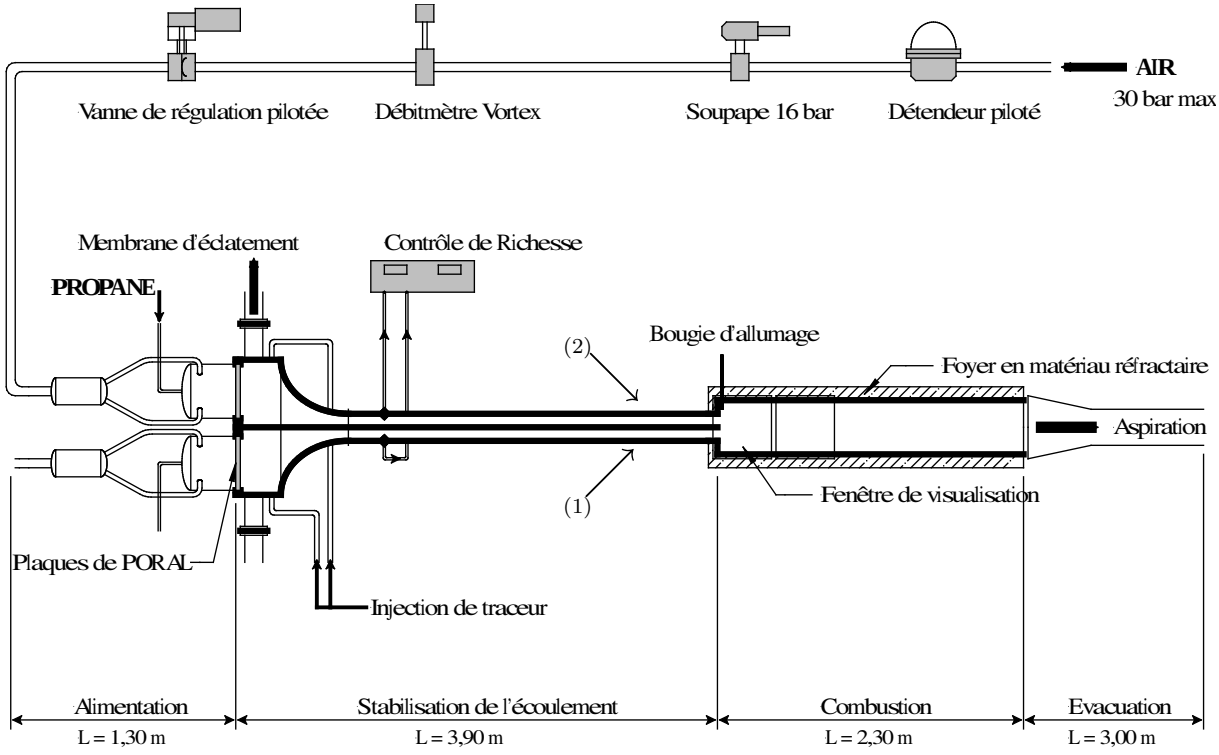


FIG. 8.1 – Représentation schématique et dimensions caractéristiques du banc ORACLES

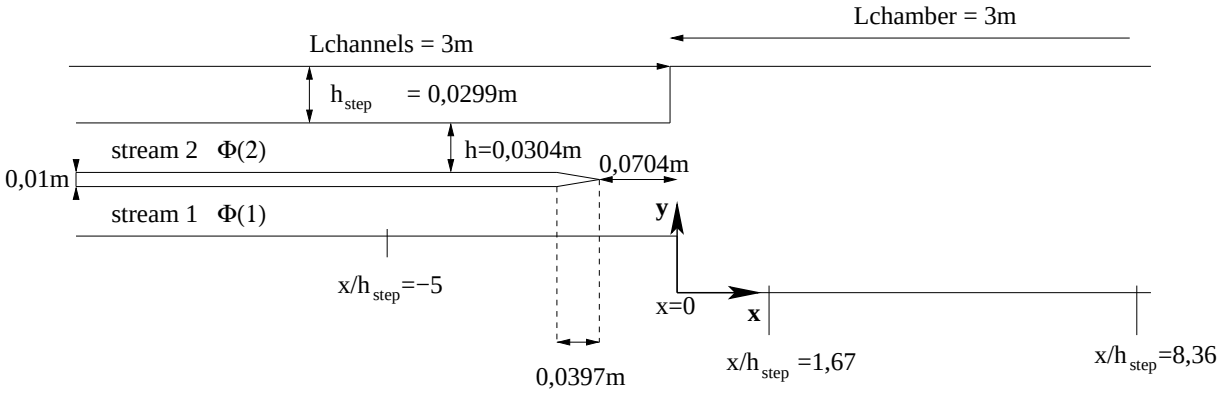


FIG. 8.2 – Dimensions caractéristiques au niveau de l'élargissement brusque

Le maillage structuré utilisé pour les simulations numériques est trop long pour être représenté ici complètement et seule la partie du maillage comprenant les entrées et l'élargissement brusque est représentée sur la figure 8.3. La chambre de combustion est maillée jusqu'à un mètre après l'élargissement brusque ; les canaux d'entrée sont maillés

jusqu'à 20 *cm* avant l'élargissement brusque ; le maillage complet comporte environ 50000 mailles hexaèdriques.

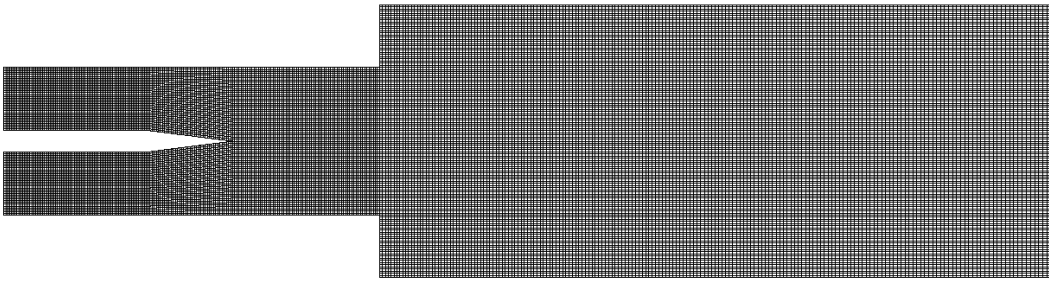


FIG. 8.3 – Maillage utilisé pour les simulations numériques

Dans les travaux antérieurs à la présente étude, Besson et al. [7] puis Nguyen et al. [66] se sont intéressés à différentes conditions de fonctionnement du banc d'essai. Ils ont fait varier le nombre de Reynolds des écoulements, $Re = \overline{u}_{axe}h/\nu$ ($\overline{u}_{axe}$ est la vitesse moyenne sur l'axe des canaux d'entrée), en modifiant les débits d'entrée des gaz frais. Par exemple pour des débits massiques en entrée de chaque canal de 52,8 et 100 g/s, le nombre de Reynolds est respectivement de 25000 et 45000. Ils ont également étudié l'influence de la richesse sur les écoulements, en gardant la richesse du mélange constante dans les deux canaux. Enfin, ils ont étudié des écoulements où les richesses dans les deux canaux d'entrée sont différentes.

Les écoulements sont ensemencés par des gouttelettes d'huile lorsqu'ils sont inertes ou par des particules de dioxyde de titane TiO_2 dans le cas des écoulements réactifs. Les mesures du champ de vitesse sont effectuées par Vélocimétrie Doppler Laser. Des mesures du profil transversal de la température moyenne ont été effectuées à l'aide de thermocouple de type S (Platine/Platine-Rhodié 10%) par Besson [6]. Des visualisations des flammes turbulentes en lumière directe sont aussi disponibles pour deux temps d'expositions différents ($1/50s$ et $1/500s$) comme le montre la figure 8.4.

Rappelons que les spectres d'énergie issus des mesures de vitesse et les visualisations directes à court temps d'exposition ont révélé la présence d'un mouvement cohérent à grande échelle de l'écoulement dans la chambre de combustion en aval de l'élargissement brusque. Pour comparer nos résultats numériques de calcul stationnaire aux données expérimentales, nous avons donc choisi des conditions de fonctionnement pour lesquelles

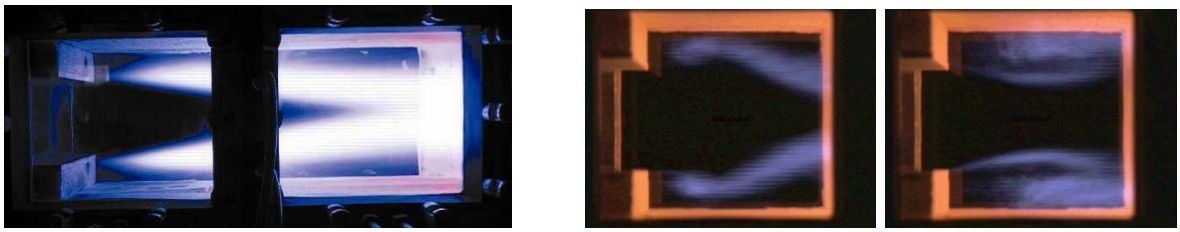


FIG. 8.4 – Visualisation directe des fronts de flammes pour un temps d'exposition de $1/50s$ (gauche) et $1/500s$ (droite)

la contribution du mouvement cohérent reste énergétiquement faible comparée à celle due aux fluctuations stochastiques turbulentes. Ces résultats expérimentaux correspondent aux conditions de fonctionnement étudiées par Besson lorsque le nombre de Reynolds est le plus élevé : Re=45000. Dans ces conditions, le débit massique dans chaque canal d'entrée est de 100 g/s. Les conditions aux limites pour le champ de vitesse sont fournies par une mesure des composantes longitudinale et transversale de ce champ dans les deux canaux d'entrée, en amont de l'élargissement brusque et donc de la chambre de combustion.

La structure moyenne de l'écoulement dans la chambre de combustion est représentée schématiquement sur la figure 8.5. L'élargissement brusque 2-D des canaux d'alimentation génère des zones de recirculation en aval de l'élargissement. Le gradient de vitesse moyenne créé entre ces zones et l'écoulement issu des canaux d'alimentation, induit dans la chambre de combustion des couches où le cisaillement est important. Les zones de recirculation permettent également lorsque l'écoulement est réactif, de stabiliser les flammes turbulentes dans la chambre de combustion. Lorsque les mélanges issus des deux canaux d'alimentation ont une richesse différente, une couche où le mélange est partiel existe à partir de la pointe de la plaque séparatrice des deux canaux.

8.2 Conditions aux Limites et Ecoulements Non Réactifs

Pour connaître les conditions limites à appliquer à l'entrée du domaine, un calcul préliminaire des écoulements dans les canaux d'entrée a aussi été effectué. Le maillage 2D utilisé pour ce calcul a une longueur totale de un mètre. Une première simulation

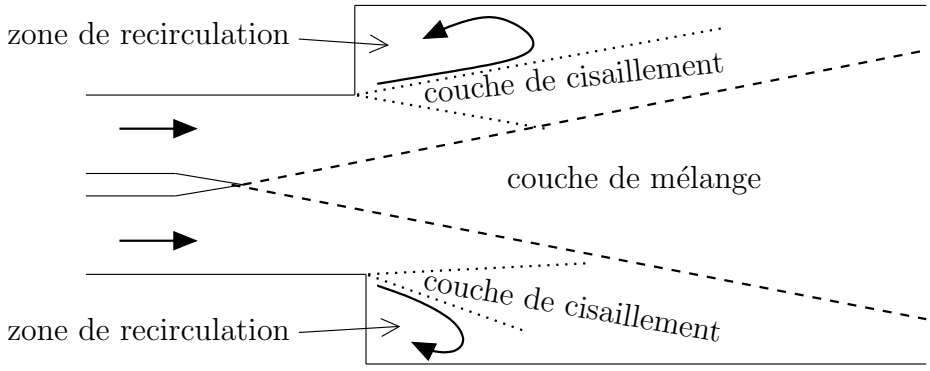


FIG. 8.5 – Représentation schématique de la structure moyenne de l'écoulement

numérique est effectuée en imposant en condition limite d'entrée de ce canal un débit de 100 g/s. Une seconde simulation est effectuée en imposant en condition limite d'entrée les profils des composantes du champ de vitesse moyen, d'énergie cinétique turbulente et de dissipation obtenus en sortie du canal lors de la première simulation. Ce procédé est répété jusqu'à l'obtention en sortie de profils des composantes du champ de vitesse, d'énergie cinétique turbulente et de dissipation identiques à ceux imposés en condition limite d'entrée. Deux simulations ont suffi pour obtenir cet écoulement turbulent pleinement développé. Les profils résultants de ce calcul préliminaire sont utilisés pour définir les conditions limites du domaine de calcul utilisé lors de la simulation des écoulements dans la chambre de combustion.

Les profils expérimentaux et numériques des composantes longitudinale ($\widetilde{u}$) et transversale ($\widetilde{v}$) du champ de vitesse moyen ainsi que le profil d'énergie cinétique turbulente (k) en entrée du domaine de calcul (x/h_{step}=-5) sont représentés sur la figure 8.6. Les longueurs sont adimensionnées par la hauteur de la marche h_{step} définie sur la figure 8.2. La distance x/h_{step}=-5 correspond aux conditions limites d'entrée du domaine de calcul de l'écoulement dans la chambre de combustion.

La figure 8.6 met en évidence une asymétrie entre les deux profils expérimentaux de vitesse moyenne longitudinale dans les deux canaux d'entrée. Cette différence est prise en compte dans les simulations numériques en imposant un débit massique très légèrement différent dans les deux canaux. Les conditions aux limites du calcul sont ainsi en très bon accord avec les mesures expérimentales. Tenant compte des conditions limites amont ainsi

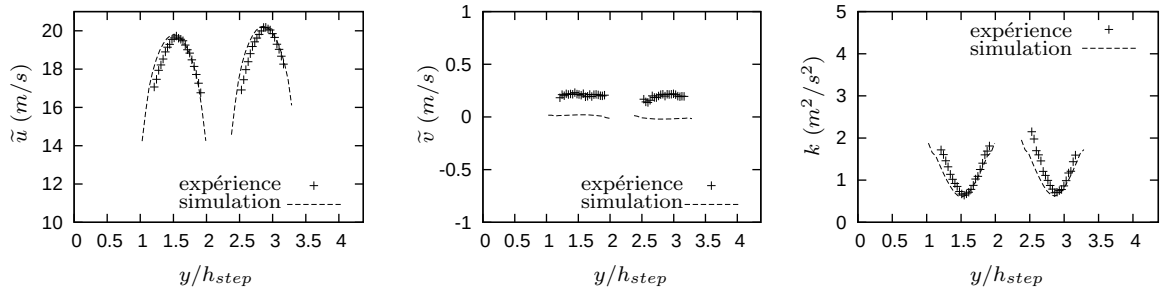


FIG. 8.6 – Composantes du champ de vitesse moyenne ($\widetilde{u}$, $\widetilde{v}$) et énergie cinétique turbulente k à x/h_{step}=−5

définies nous avons procédé dans un premier temps à un calcul de l'écoulement d'un fluide inerte dans la chambre de combustion.

Dans ce cas la figure 8.7 montre les profils des composantes de vitesse moyenne et d'énergie cinétique turbulente k au niveau de l'élargissement brusque x/h_{step}=0 et dans la chambre de combustion à x/h_{step}=1, 67 et x/h_{step}=8, 36. On observe sur cette figure que les profils de vitesse obtenus par la simulation numérique au niveau de l'élargissement brusque sont en accord avec les résultats expérimentaux, alors que l'énergie cinétique turbulente est légèrement sous-évaluée par le calcul. L'utilisation d'un modèle $k-\epsilon$ avec des corrections prenant en compte la diminution du nombre de Reynolds au niveau de la pointe de la plaque séparatrice des deux canaux permettrait sans doute d'améliorer l'estimation de l'énergie cinétique turbulente induite par le cisaillement en aval de cette plaque.

Les profils de vitesse expérimentaux et numériques dans la chambre de combustion sont très proches même si les zones de recirculation sont un peu sous-estimées par les simulations. Cette caractéristique est un défaut bien connu du modèle $k-\epsilon$ qui ne permet pas d'effectuer un calcul très précis des distances de recollement derrière une marche [35]. On note néanmoins que la différence de débit de 2 g/s entre les deux canaux d'entrée induit une différence relativement importante des longueurs des deux zones de recirculation comme le montre la figure 8.8.

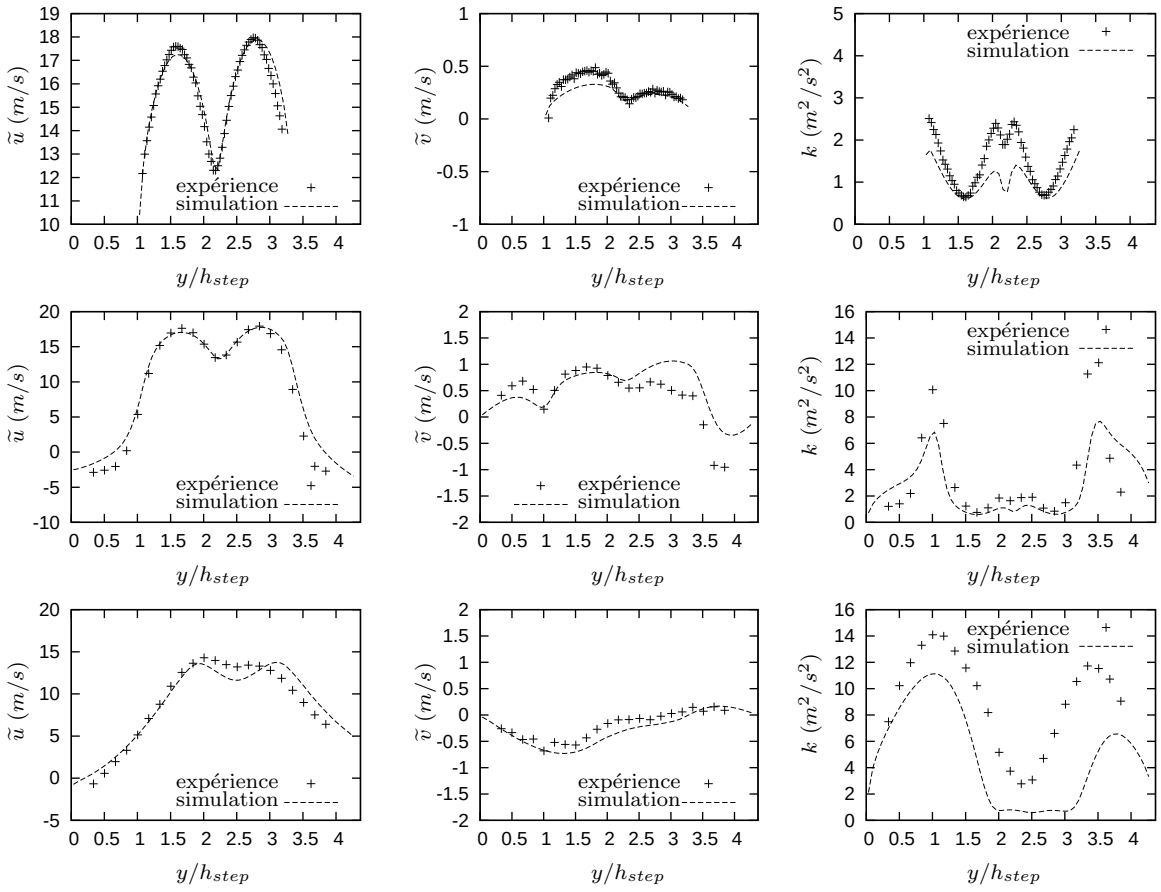


FIG. 8.7 – Composantes du champ de vitesse moyenne ($\widetilde{u}$, $\widetilde{v}$) et énergie cinétique turbulente k à x/h_{step}=0 (courbes du haut), à x/h_{step}=1,67 (courbes du centre) et à x/h_{step}=8,36 (courbes du bas)

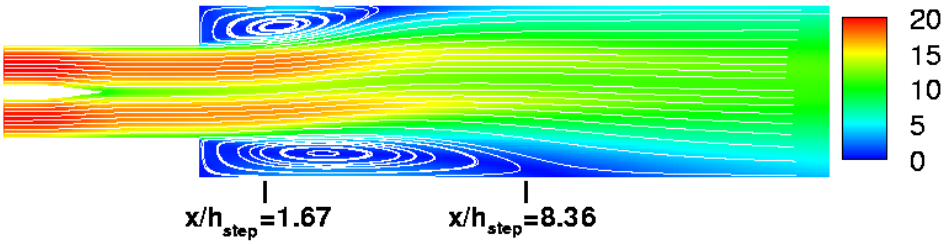


FIG. 8.8 – Ecoulement non-réactif : champ de vitesse moyenne (m/s) et ligne de courant

8.3 Simulation d'un Ecoulement Réactif Parfaitement Prémélangé

Pour valider le modèle LW-P, la première étape consiste à simuler un écoulement parfaitement prémélangé. Dans ce cas, comme cela a été décrit au cours du chapitre 4, la PDF du modèle LW-P est constituée de deux pics de Dirac seulement et les fractions massiques des espèces et la température ne sont fonction que de la fraction massique de combustible Y ; la fraction de mélange ξ est constante. Les débits massiques du mélange propane-air sont de 100 g/s dans chaque canal. La richesse du mélange est la même dans les deux canaux soit $\Phi(1)=\Phi(2)=0,8$. Les constantes de l'expression du taux de réaction chimique instantané (4.1) sont fixées à T_a=20000K pour la température d'activation et $K=8,10^8 s^{-1}$ ($=500\exp(T_a/1400)$) pour le coefficient pré-exponentiel.

Les conditions aux limites pour le champ de vitesse en entrée sont toujours asymétriques. Les profils de vitesse moyenne calculés en amont de la chambre de combustion sont en bon accord avec les profils expérimentaux comme le montre la figure 8.9. En revanche, les profils d'énergie cinétique turbulente calculés en amont de la chambre de combustion sont moins satisfaisants que dans le cas d'un écoulement non-réactif. Il faut noter que les niveaux d'énergie cinétique turbulente calculés en amont de la chambre de combustion pour cet écoulement réactif sont identiques à ceux déjà calculés pour un écoulement de fluide inerte alors que les niveaux d'énergie cinétique turbulente mesurés aux mêmes endroits ont augmenté. Cette augmentation d'énergie cinétique turbulente mesurée dans les canaux est essentiellement due aux fluctuations engendrées par le mouvement cohérent à grande échelle de la flamme.

Les profils des composantes de vitesse moyenne et d'énergie cinétique turbulente dans la chambre de combustion sont représentés sur la figure 8.10. Deux calculs numériques différents sont comparés : le premier calcul est effectué en utilisant une fermeture habituelle de relaxation linéaire pour la dissipation du scalaire réactif, fourni par la relation (6.3) et le second est effectué en utilisant la fermeture généralisée, proposée par la relation (6.4).

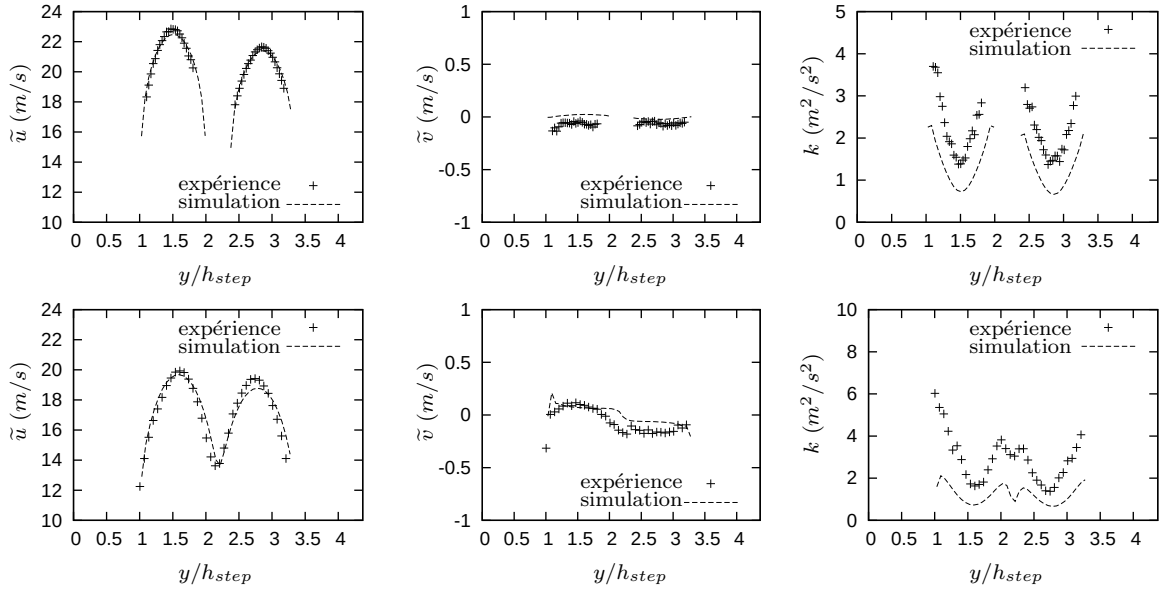


FIG. 8.9 – Composantes du champ de vitesse moyenne ($\widetilde{u}$, $\widetilde{v}$) et énergie cinétique turbulente k pour $\Phi(1)$=$\Phi(2)$=$0,8$ à x/h_{step}=-5 (courbes du haut) et à x/h_{step}=0 (courbes du bas)

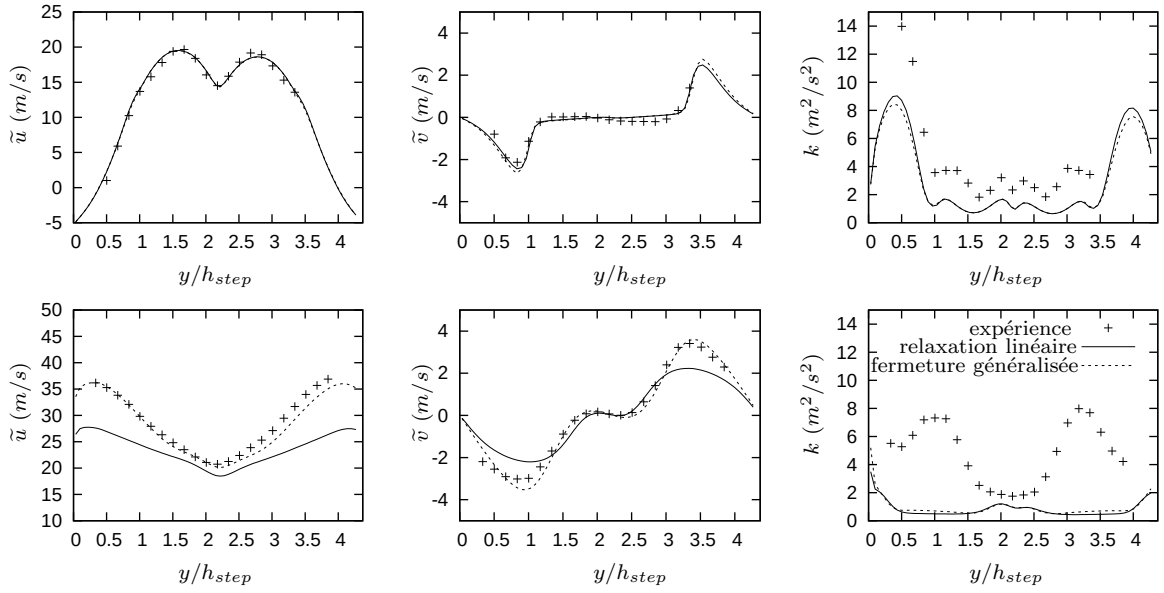


FIG. 8.10 – Composantes du champ de vitesse moyenne ($\widetilde{u}$, $\widetilde{v}$) et énergie cinétique turbulente k pour $\Phi(1)$=$\Phi(2)$=$0,8$ à x/h_{step}=$1,67$ (courbes du haut) et à x/h_{step}=$8,36$ (courbes du bas)

On observe sur la figure 8.10 que l'accélération derrière la flamme, à x/h_{step}=$8,36$, induite par l'expansion des gaz brûlés, est en très bon accord avec les résultats expérimentaux

lorsque la fermeture généralisée pour la dissipation est utilisée. En revanche, lorsque le modèle de relaxation linéaire pour la dissipation est utilisé seul l'accélération de l'écoulement est beaucoup moins importante. Cette caractéristique a déjà été observée dans des simulations du même écoulement qui prenaient en compte les pertes thermiques aux parois et une cinétique chimique détaillée [76]. L'utilisation de la fermeture généralisée pour la dissipation définie par la relation 6.4 conduit donc à une meilleur évaluation du champ de vitesse. Néanmoins ce modèle associé à la représentation des flux turbulents par des hypothèses gradients $(k-\epsilon)$ ne permet pas de prédire l'accroissement d'énergie cinétique turbulente que l'on mesure. De fait, l'énergie cinétique turbulente calculée est ici simplement détruite par la dilatation associée à l'expansion thermique des gaz. Un modèle de combustion turbulente du second ordre est nécessaire pour prendre en compte le phénomène de production de turbulence par la flamme.

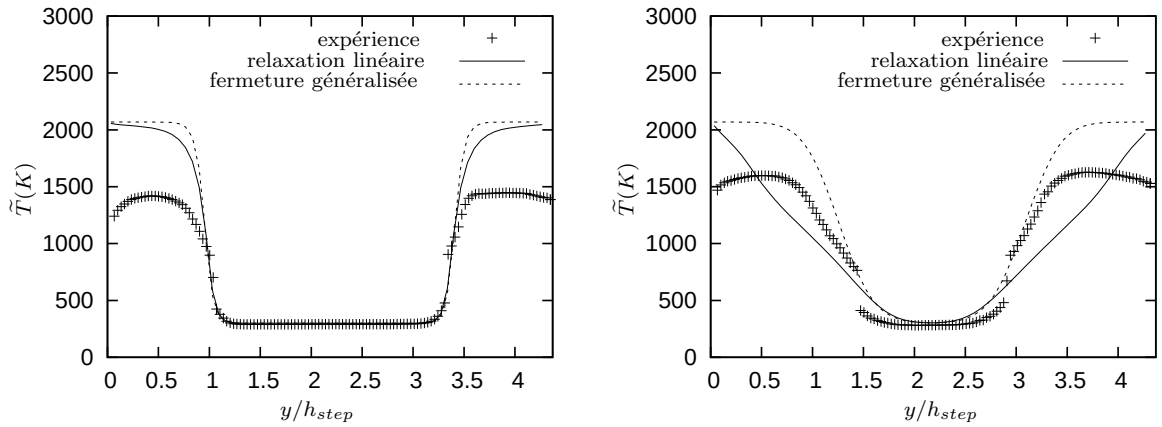


FIG. 8.11 – Température moyenne à x/h_{step}=1, 67 et à x/h_{step}=8, 36

La figure 8.11 donne les profils expérimentaux et numériques de température moyenne à x/h_{step}=1, 67 et à x/h_{step}=8, 36. On constate que les niveaux maxima de température moyenne calculés sont plus élevés que ceux obtenus par les mesures. Ce défaut est dû aux hypothèses utilisées dans nos simulations qui considèrent qu'il n'y a pas de pertes thermiques aux parois et que la cinétique chimique peut être représentée par une réaction globale, comme cela a été montré par Ribert et al. [76]. Cependant, comme le principal objectif de notre travail est d'étudier des écoulements partiellement mélangés, ce qui nécessite l'utilisation de deux grandeurs caractéristiques, l'utilisation d'une nouvelle

variable supplémentaire pour prendre en compte les pertes aux parois compliquerait notablement le modèle LW-P présenté dans cette étude. Les calculs présentés ici seront donc tous faits en supposant l'écoulement adiabatique.

Malgré ce défaut dans l'évaluation numérique de la température maximum, on constate que la position de flamme turbulente est bien prédite. Là encore, l'emploi de la fermeture généralisée pour la dissipation scalaire conduit à de bien meilleurs résultats que la fermeture utilisant la relaxation linéaire. Les gradients maxima de température sont assez bien restitués lorsque l'on utilise la fermeture généralisée pour la dissipation et ceci aux deux distances en aval de l'élargissement brusque x/h_{step}=1, 67 et x/h_{step}=8, 36.

Comme le montrent les figures 8.12 et 8.13, la flamme turbulente moyenne calculée en utilisant seulement le modèle de relaxation linéaire de la dissipation est très différente de celle obtenue en utilisant la fermeture généralisée.

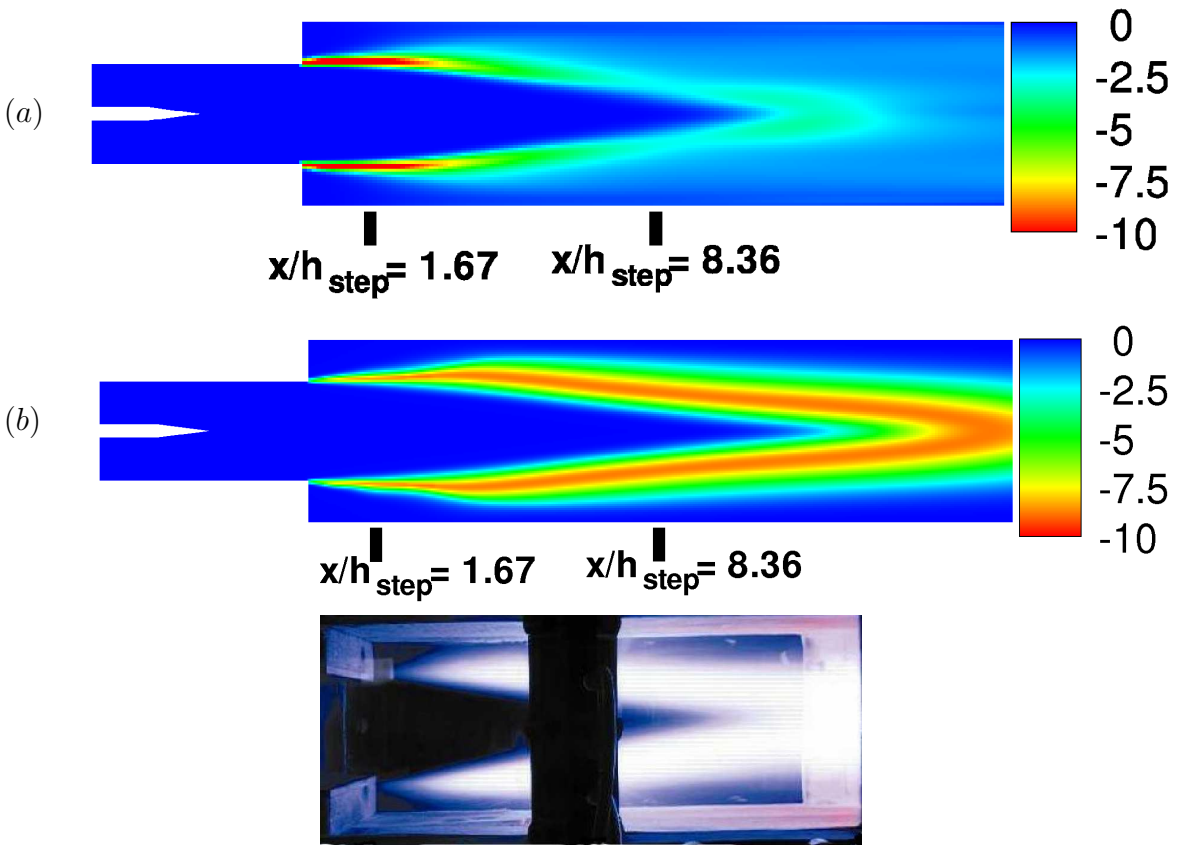


FIG. 8.12 – Taux de réaction moyen (s^{-1}) (relaxation linéaire : haut, fermeture généralisée : bas) et visualisation directe de la flamme (temps de pose 1/50s)

Le terme source moyen illustré par la figure 8.12 (a), obtenu en utilisant la relaxation linéaire est le plus grand juste après l'élargissement brusque, là où le cisaillement est très fort, mais apparaît très faible au milieu de la chambre de combustion. En revanche, lorsque l'on utilise la fermeture généralisée le terme source moyen calculé est réparti de manière relativement uniforme sur toute la largeur de la chambre de combustion et représente une flamme qui se referme nettement. Il est clair que cette dernière évaluation par le calcul est plus proche de la réalité, quand on la compare avec la visualisation directe de la flamme. De plus, les champs de fraction massique moyenne obtenus par ces deux simulations et donnés par la figure 8.13 montrent que la flamme moyenne ("flame brush") est beaucoup plus épaisse lorsque le modèle de relaxation linéaire est utilisé. Dans ce cas, le taux de réaction chimique moyen est plus faible dans la chambre de combustion et le mélange brûle de façon moins intense. En conséquence, l'expansion des gaz brûlés est moins forte et donc l'accélération plus faible. Cette caractéristique explique la différence entre les profils numériques de vitesse en aval de la flamme lorsque les différentes fermetures pour la dissipation sont utilisées.

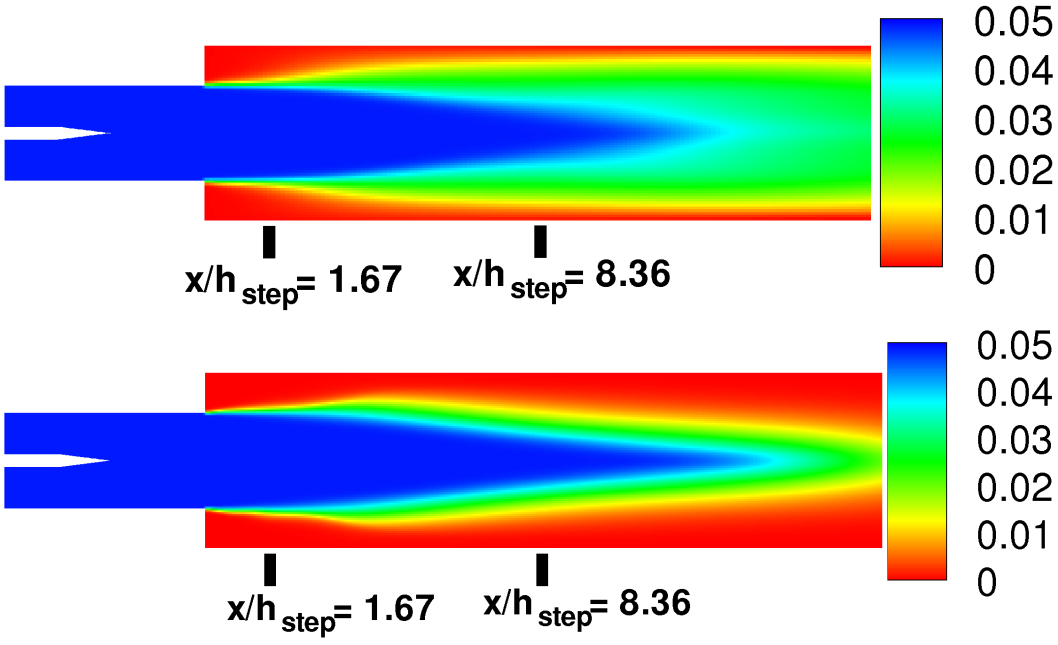


FIG. 8.13 – Fraction massique de combustible moyenne (relaxation linéaire : haut, fermeture généralisée : bas)

8.4 Ecoulements Réactifs Partiellement Prémélangés

Nous considérons maintenant le cas des écoulements partiellement prémélangés. La richesse est désormais différente dans les deux canaux d'entrée. Deux cas sont étudiés : tout d'abord le cas où la richesse du mélange dans le canal du haut est $\Phi(2)=0,9$ et celle du mélange dans le canal du bas $\Phi(1)=0,3$; dans un deuxième cas $\Phi(2)=0,9$ et $\Phi(1)=0,7$. Les taux de réaction chimique moyens obtenus dans ces deux situations sont présentés sur la figure 8.15. Pour chacune des deux situations, deux simulations numériques sont effectuées, une en utilisant un modèle de relaxation linéaire pour les deux dissipations réactives ϵ_Y et $\epsilon_{\xi Y}$ (cf Eq.(6.6)) et l'autre en utilisant les fermetures généralisées données par les relations 6.17.

Les résultats montrent que plus l'écart de richesse entre les deux canaux est grand plus l'écoulement moyen est asymétrique et plus l'épaisseur de la couche de mélange (ligne blanche) est importante. Dans le premier cas, la richesse du canal du bas $\Phi(1)=0,3$ (a_1, b_1) est même trop faible pour que le mélange issu de ce canal s'enflamme ; cette caractéristique est également observée expérimentalement comme le montre la figure 8.14.

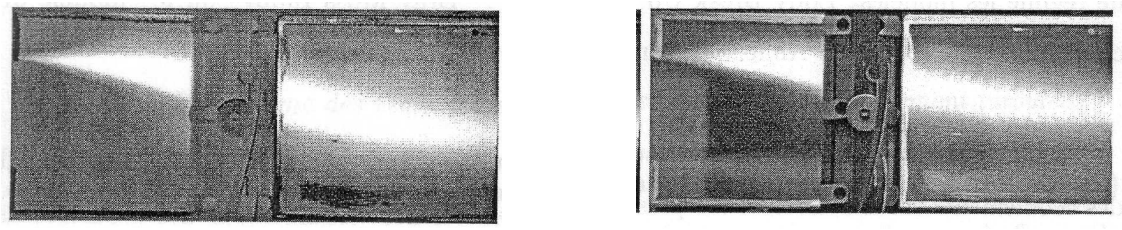


FIG. 8.14 – Visualisation directe de la flamme (temps de pose 1/50s) avec $\Phi(2)$=0.9 et $\Phi(1)$=0.3 (gauche) et $\Phi(1)$=0.7 (droite)

La figure 8.16 montre les profils des composantes de vitesse moyenne $\widetilde{u}$, $\widetilde{v}$ dans la chambre de combustion à $x/h_{step} = 1,67$ et à $x/h_{step} = 8,36$ obtenus à partir des deux simulations. Comme prévu l'accélération dans les gaz brûlés est plus importante pour les richesses les plus élevées. On constate que l'accélération des gaz brûlés observée dans les simulations qui utilisent le modèle de relaxation linéaire est sous-estimée par rapport à l'expérience alors que l'accélération observée dans les simulations qui utilisent les fermetures généralisées est en très bon accord avec les résultats expérimentaux. Pour ces

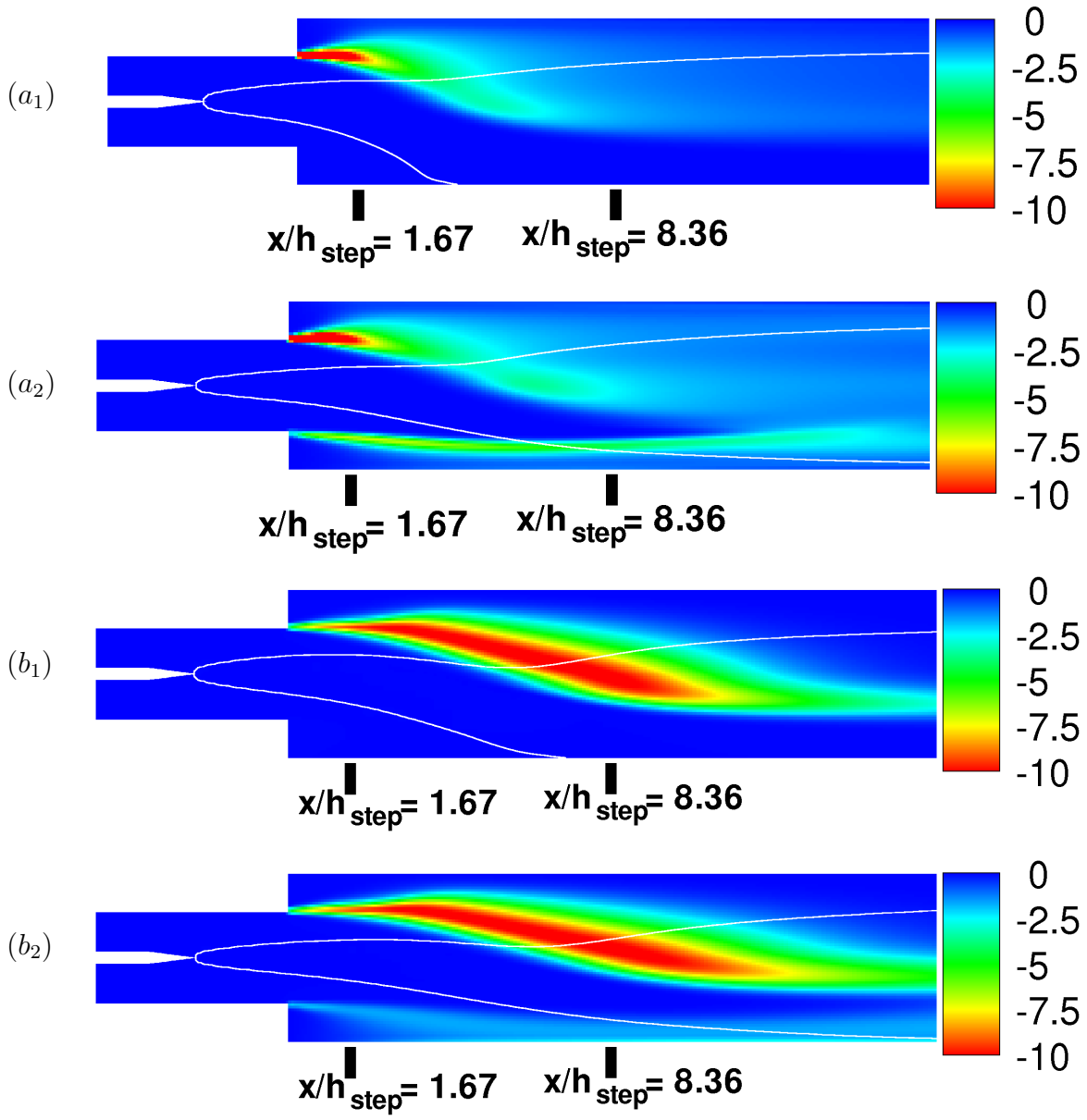


FIG. 8.15 – Taux de réaction moyen (s^{-1}). Iso-ligne $\widetilde{\xi''^2}$=1.10^{-8} (ligne blanche). a_1 : $\Phi(1)$=0,3, $\Phi(2)$=0,9 et relaxations linéaires, a_2 : $\Phi(1)$=0,7, $\Phi(2)$=0,9 et relaxations linéaires, b_1 : $\Phi(1)$=0,3, $\Phi(2)$=0,9 et fermetures généralisées, b_2 : $\Phi(1)$=0,7, $\Phi(2)$=0,9 et fermetures généralisées.

écoulements partiellement prémélangés, il est particulièrement intéressant de considérer le paramètre de covariance normalisée G, défini par :

$$G = \overline{\rho\xi''Y''} / \left(\overline{\rho\xi''^2} \cdot \overline{\rho Y''^2} \right)^{1/2} \tag{8.1}$$

Dans le modèle LW original basé sur une PDF constituée de deux distributions de Dirac, ce paramètre est égal à l'unité, c'est-à-dire que la covariance est directement reliée aux produits des variances des deux variables. Dans notre cas, en utilisant le modèle LW-P basé sur une PDF constituée de quatre distributions de Dirac, la covariance est une quantité indépendante déterminée avec une équation de transport.
La figure 8.17 montre clairement que le paramètre G peut être différent de l'unité dans les régions de l'écoulement où la flamme interagit avec la couche de mélange. Le signe de G change même à la traversée de la flamme. Le changement de signe de la covariance signifie que la pente d de la droite (D), définie par la relation (4.32) (voir figure 4.2), devient négative à la traversée de la flamme. Cet effet résulte de la compétition entre mélange et réaction chimique dans le domaine de définition de la PDF. Pour des mélanges suffisamment pauvres, près de $\widetilde{\xi} = \xi(1)$, les fluctuations de ξ autour de la valeur moyenne sont supposées être essentiellement positives quelle que soit la valeur de Y et la covariance est donc principalement pilotée par le mélange. Ceci explique les valeurs positives de la covariance observées dans la partie basse de la couche de mélange. A l'opposé, la covariance est plutôt pilotée par les processus chimiques au voisinage des conditions stœchiométriques $\xi(2)$ conduisant à une pente d négative, comme le montre la figure 8.18.

8.5 Conclusions

Les résultats numériques obtenus avec le modèle LW-P basé en particulier sur l'utilisation d'une PDF constituée de quatre distributions de Dirac sont en très bon accord qualitatif avec les observations expérimentales dans le cas d'un écoulement réactif de propane et d'air stabilisé en aval d'un élargissement brusque d'un canal 2-D. Un très bon accord est également obtenu entre mesure et simulation numérique.

Nous avons par ailleurs montré que le choix du modèle pour représenter le phénomène de dissipation du scalaire réactif a un effet très important sur les résultats des simulations

numériques. En particulier, l'utilisation du modèle de fermeture généralisée proposé au chapitre 6 a considérablement amélioré le calcul du champ de vitesse en aval de la zone de flamme. Toutefois, l'utilisation de ce modèle ne conduit pas à une meilleure prédiction de l'énergie cinétique turbulente en aval de la flamme. Comme nous l'avons indiqué la destruction de la turbulence par la flamme à laquelle conduisent les simulations est une conséquence de l'utilisation d'un modèle du premier ordre. Les résultats obtenus avec le même modèle, mais étendu au second ordre, sur la même configuration sont présentés au chapitre 10.

Avant de tester le modèle LW-P du second ordre, nous avons voulu l'évaluer, toujours au premier ordre mais dans une configuration où la combustion se produit dans un gradient de richesse plus important que celui induit par la configuration ORACLES. En effet les flammes turbulentes de la configuration ORACLES se stabilisent au voisinage des recirculations dans des zones où le prémélange est parfait. Ces zones sont en dehors de la couche de mélange issue des deux canaux d'entrée. De plus l'étendue de la zone où la combustion s'effectue réellement en régime de prémélange partiel est trop petite pour tester pleinement les capacités du modèle LW-P. Les mesures effectuées par Degardin et al. [81] au CORIA sur la géométrie d'une flamme en V turbulente, décrite au chapitre 9, nous ont fourni toutes les données expérimentales nécessaires à l'étude numérique du modèle LW-P dans un écoulement présentant un fort gradient de richesse.

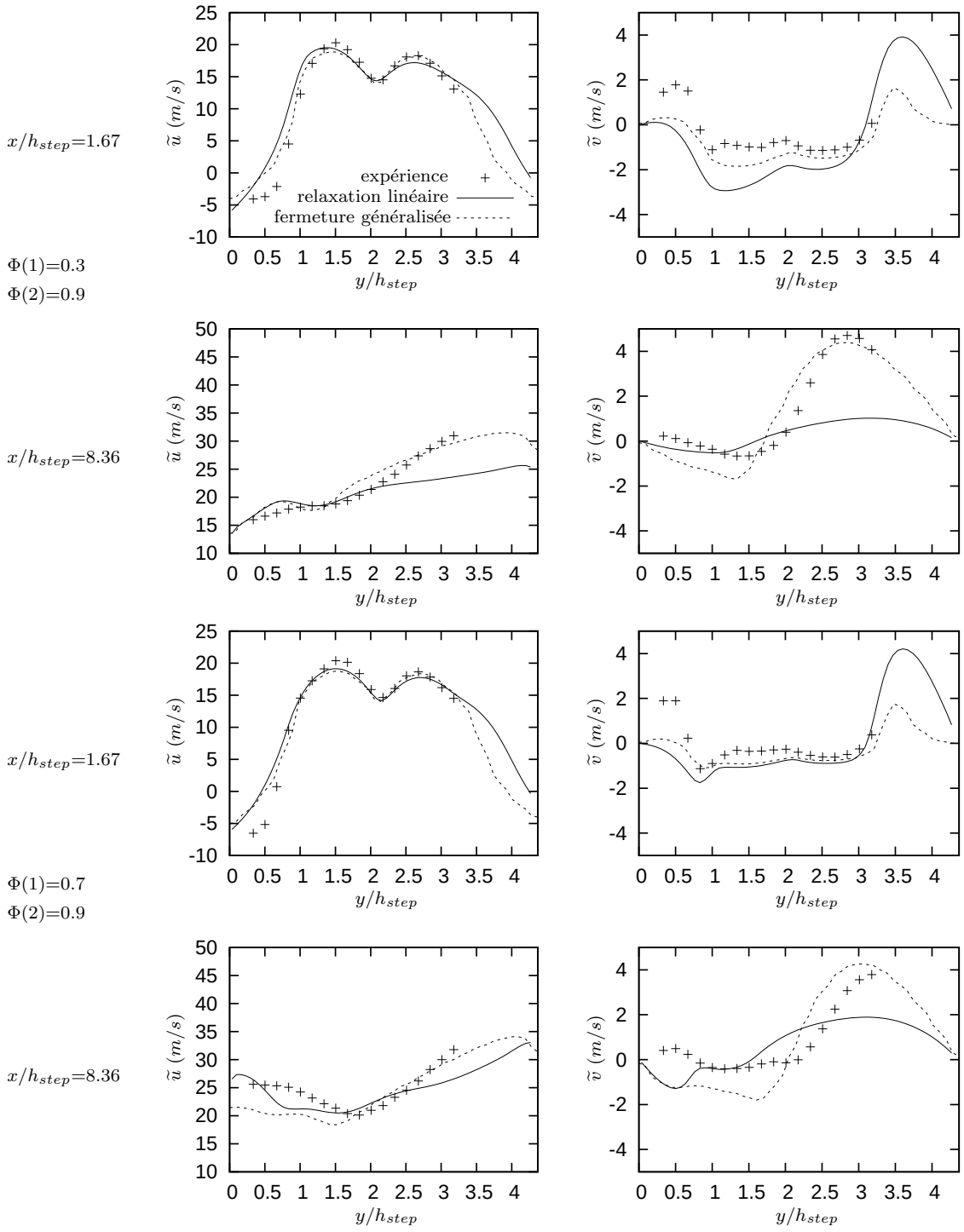


FIG. 8.16 – Composantes de la vitesse moyenne ($\widetilde{u}$, $\widetilde{v}$) pour $\Phi(1)$=0,3 et $\Phi(2)$=0,9 à x/h_{step}=1,67 (courbes du haut) et à x/h_{step}=8,36 (2^{ndes} courbes à partir du haut) et pour $\Phi(1)$=0,7 et $\Phi(2)$=0,9 à x/h_{step}=1,67 ($3^{\text{èmes}}$ courbes) et à x/h_{step}=8,36 (courbes du bas)

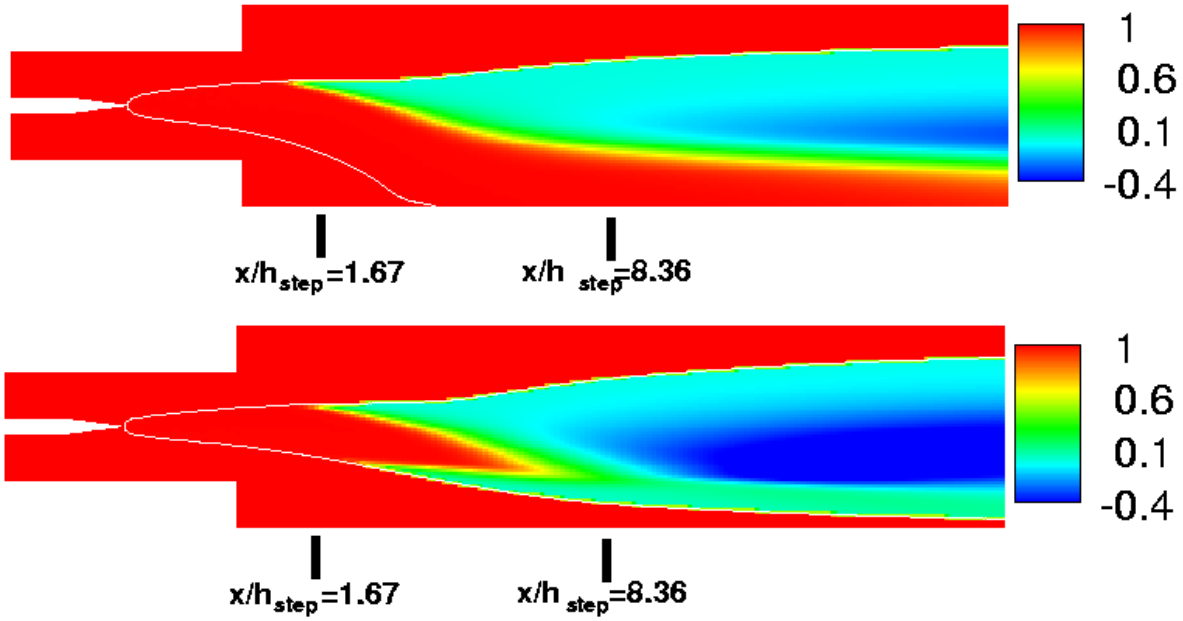


FIG. 8.17 – Paramètre G obtenu pour $\Phi(1)=0,3$ et $\Phi(2)=0,9$ (haut) et pour $\Phi(1)=0,7$ et $\Phi(2)=0,9$ (bas)

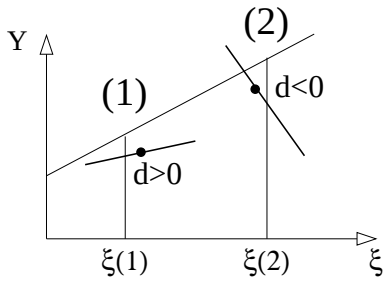


FIG. 8.18 – Exemple de pente d de la droite(D) dans l'espace des compositions

Chapitre 9

Simulation d'une Combustion dans un Ecoulement Turbulent Stratifié : Flamme en V

Les résultats numériques présentés dans ce chapitre ont été obtenus avec le modèle LW-P du premier ordre, associé au modèle de turbulence $k - \epsilon$. La géométrie utilisée pour les simulations correspond au dispositif expérimental décrit et étudié par O. Degardin [26]. Ce banc d'essai a été mis en place au CORIA à Rouen ; il permet d'obtenir un écoulement bidimensionnel vertical d'un mélange de méthane et d'air à richesse stratifiée. Une flamme en V turbulente est stabilisée au sein de cet écoulement à l'aide d'un fil chaud. Diverses méthodes de diagnostics optiques ont été mises en œuvre pour caractériser cette flamme : ADL et PIV pour le champ de vitesse, Tomographie Laser pour visualiser l'écoulement réactif, PLIF sur acétone pour mesurer les quantités scalaire et Diffusion Rayleigh pour le champ de température [27]. La confrontation entre les résultats expérimentaux et numériques obtenus sur cette géométrie a fait l'objet d'un travail commun entre le CORIA pour la partie expérimentale et le LCD pour la partie numérique. Ces travaux ont été présentés à la 11$^{\text{ème}}$ "International Conference on Numerical Combustion" en 2006 [80] et ont fait l'objet d'un projet d'article soumis à "Combustion and Flame" qui est actuellement en cours de révision. Seuls les résultats numériques issus de ces travaux sont présentés dans ce chapitre.

Après une présentation générale du banc d'essai et des méthodes de diagnostics optiques utilisées pour les mesures, nous présentons les conditions aux limites correspondant aux simulations que nous avons effectuées. Par ailleurs, des calculs préliminaires de flamme laminaire 1-D ont été effectués pour adapter avec précision la loi d'Arrhénius de la réaction globale à la plage de richesse possible dans ces écoulements. Enfin, nous décrivons les résultats des simulations numériques et les comparons aux résultats expérimentaux obtenus au CORIA. Ces résultats sont en particulier analysés dans des cas où la stratification de l'écoulement et donc les hétérogénéités de richesse du mélange sont importantes.

9.1 Dispositif Expérimental et Diagnostics Optiques

Le dispositif expérimental est constitué d'un tube vertical de section rectangulaire ($80 \times 80\ mm^2$) dans lequel une flamme turbulente est stabilisée. La stabilisation est obtenue grâce à un fil chauffé de 0,8 mm de diamètre et placé dans le plan de sortie du tube ($x = 0, z = 0$), comme indiqué sur la figure 9.1. Ce dispositif a aussi été employé par Degardin et al. [27] pour étudier la structure des flammes laminaires stratifiées.

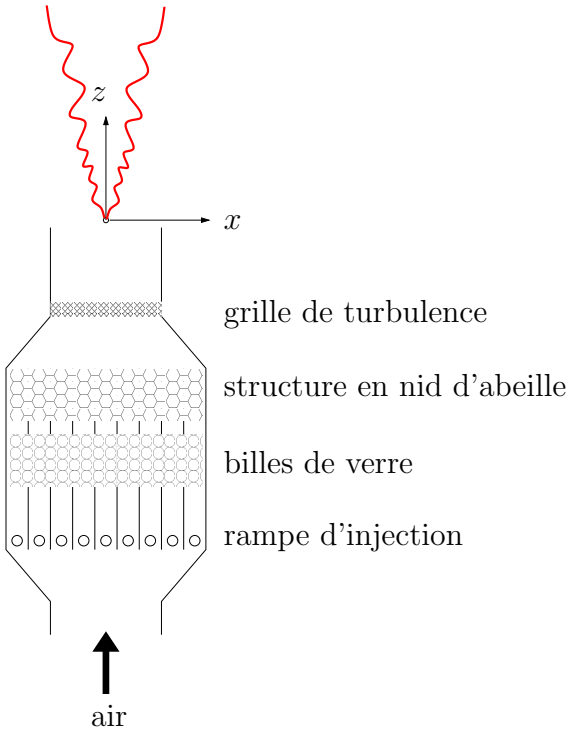


FIG. 9.1 – Schéma du dispositif expérimental

Le débit d'air entrant est de $80Nm^3/h$. Des filtres à particules en série (micronique et submicronique) permettent d'éviter la diffusion de Mie de petites particules en suspension dans l'air qui risqueraient de perturber les mesures par diffusion Rayleigh. L'air débouche dans une chambre d'injection et de mélange constituée de neuf compartiments verticaux disposant, à leur base, d'une rampe d'injection constituée de 13 injecteurs de gaz de $0{,}62mm$ de diamètre. Des mélanges de richesses différentes sont ainsi créés dans chaque compartiment. Chaque mélange est ensuite homogénéisé avec des billes de verre puis l'écoulement total résultant est laminarisé à l'aide d'une structure en nid d'abeille, avant d'être conduit à la zone d'étude par un convergent. Grâce à ce dispositif, différents profils de richesses peuvent être créés en entrée de la zone d'étude (sortie du tube vertical). Deux grilles de turbulence peuvent être ajoutées en sortie du convergent, $70mm$ avant le fil chaud ($z = -70mm$). Ces différentes conditions de stratification permettent de caractériser l'influence des grandes et des petites échelles de fluctuations de richesse sur des flammes turbulentes.

Les profils de richesse à deux dimensions générés dans cette étude ont un maximum au centre de l'écoulement (x=0) et diminuent de façon continue jusqu'à l'extrémité du tube, comme le montre la figure 9.2.

Nous référencerons les différents cas étudiés en appelant H les situations où les conditions d'entrée sont homogènes et S celles où les conditions d'entrée sont stratifiées. La seconde lettre correspond à la grille de turbulence utilisée soit E ou B. Dans un cas homogène ces lettres sont suivies de la valeur de la richesse de l'écoulement considéré. Dans un cas stratifié ces lettres sont suivies de la valeur de la richesse moyenne maximum (au centre du tube) puis de la valeur de la richesse moyenne minimum (à la périphérie du tube). Les différents cas étudiés sont répertoriés dans le tableau 9.1.

Les caractéristiques de la turbulence obtenues avec les grilles E et B sont décrites dans le tableau 9.2. L'écoulement turbulent non-réactif dans le tube a été caractérisé par ADL par Renou et al. [74] dans une étude précédente. Les conclusions principales de cette étude préliminaire sont les suivantes :

– les couches limites induites par les parois sont très fines et n'influencent pas la structure de la flamme ;

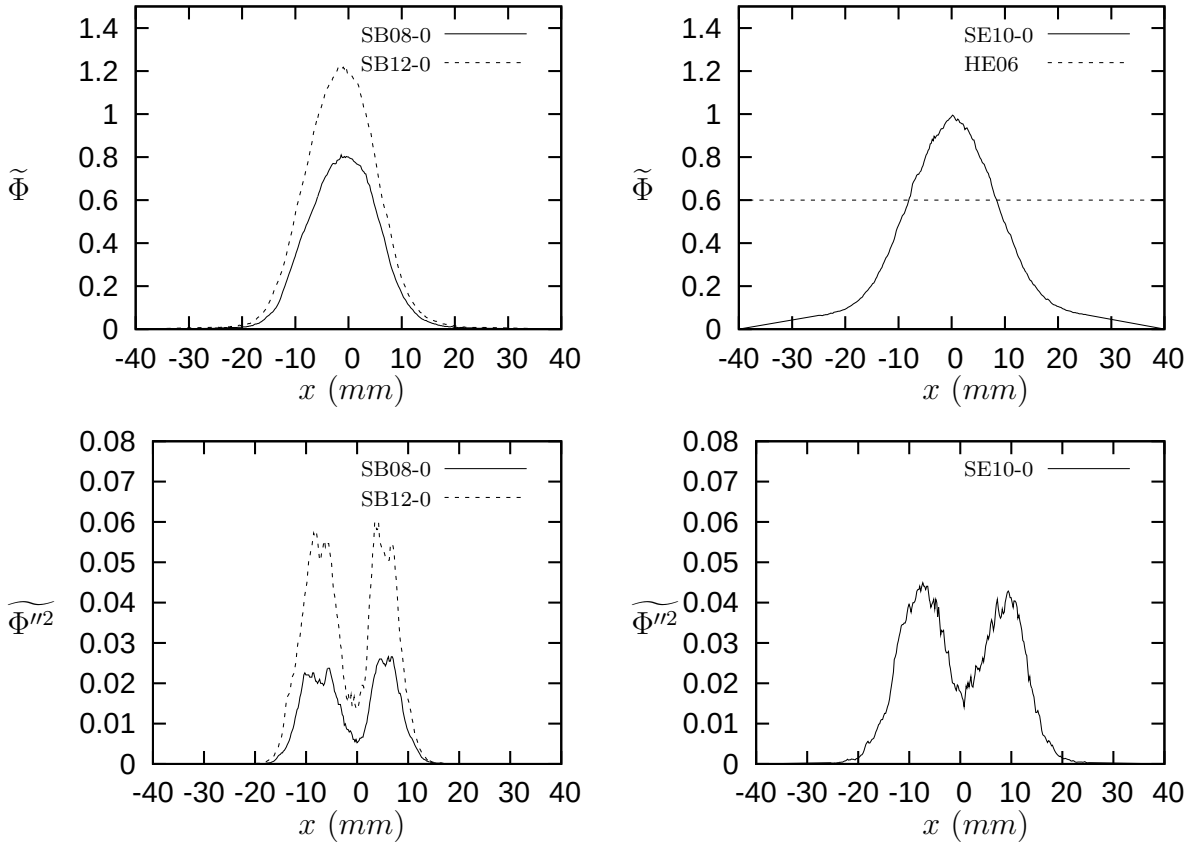


FIG. 9.2 – Richesse moyenne et variance associée obtenues pour un écoulement sans combustion avec la grille B (gauche) et la grille E (droite) à z=42.5 mm du fil chaud (mesure réalisée par PLIF sur acétone)

Nom	Cas	Grille de turbulence	$\Phi(\xi)$	$\Phi_{rod}(\xi_{rod})$	$\Phi_{mini}(\xi_{mini})$
HE06	Homogène	E	0.6 (0.034)	-	-
SE10-0	Stratifié	E	-	1.0 (0.055)	0
SB08-0	Stratifié	B	-	0.8 (0.045)	0
SB12-0	Stratifié	B	-	1.2 (0.065)	0

TAB. 9.1 – Conditions de stratifications en richesse (fraction de mélange) au centre du tube et à la périphérie. Φ_{rod} et Φ_{mini} sont respectivement les valeurs de la richesse au niveau du fil chaud et à la périphérie du tube.

– la turbulence peut être considérée comme homogène et isotrope.

	Grille B	Grille E
$\overline{u}$	3.75	3.14
$\sqrt{\overline{u'^2}}$	0.139	0.237
$\sqrt{\overline{u'^2}}/\overline{u}$ (%)	3.7	7.5

TAB. 9.2 – Conditions d'écoulement moyennes dans la zone d'étude (z=0 mm à 110 mm). $\overline{u}$ est la vitesse moyenne et $\sqrt{\overline{u'^2}}$ l'écart type correspondant.

Les mesures de vitesse, de température et de fraction de mélange permettent de tester avec précision les capacités prédictives des modèles utilisés dans les simulations numériques. Les champs de vitesse ont été évalués par une méthode de vélocimétrie par imagerie de particules (PIV) en utilisant une nappe laser d'une épaisseur de 0,6 mm obtenue à l'aide d'un laser Nd-YAG (BigSky Laser $2 \times 120mJ$). L'écoulement est ensemencé par des particules d'oxyde de zirconium, la lumière diffusée est collectée par une caméra CCD (Lavision Flowmaster 12 bits 1280×1024 pixel^2). La caméra est munie d'un objectif Nikkon de 50 mm (f/1.2). Les données ont été analysées à l'aide du logiciel Davis 6.2 (LaVision).
La température et la fraction molaire de combustible sont mesurées simultanément par diffusion Rayleigh et PLIF (Planar Laser Induced Fluorescence) sur acétone. Des détails concernant cette technique ont déjà été publiés par Degardin et al. [27]. Le dispositif permettant ces mesures simultanées est représenté sur la figure 9.3.

Pour que l'acétone soit efficace comme traceur du combustible, la concentration de l'acétone dans l'écoulement (mesurée par PLIF) doit être une fonction la plus linéaire possible de la concentration de combustible. Pour cela, il faut tout d'abord que la décomposition de l'acétone soit équivalente à celle du méthane tout en ayant une influence négligeable sur la structure de la flamme méthane-air. Il faut également que les diffusivités de l'acétone et du combustible soient similaires, ce qui est le cas lorsque l'on considère du méthane pur. Finalement, le méthane est ensemencé avec 5% en volume d'acétone, ce qui permet d'optimiser le signal de fluorescence tout en minimisant l'impact dû à la présence d'acétone dans le mélange sur la combustion du méthane. Pour des conditions stœchiométriques,

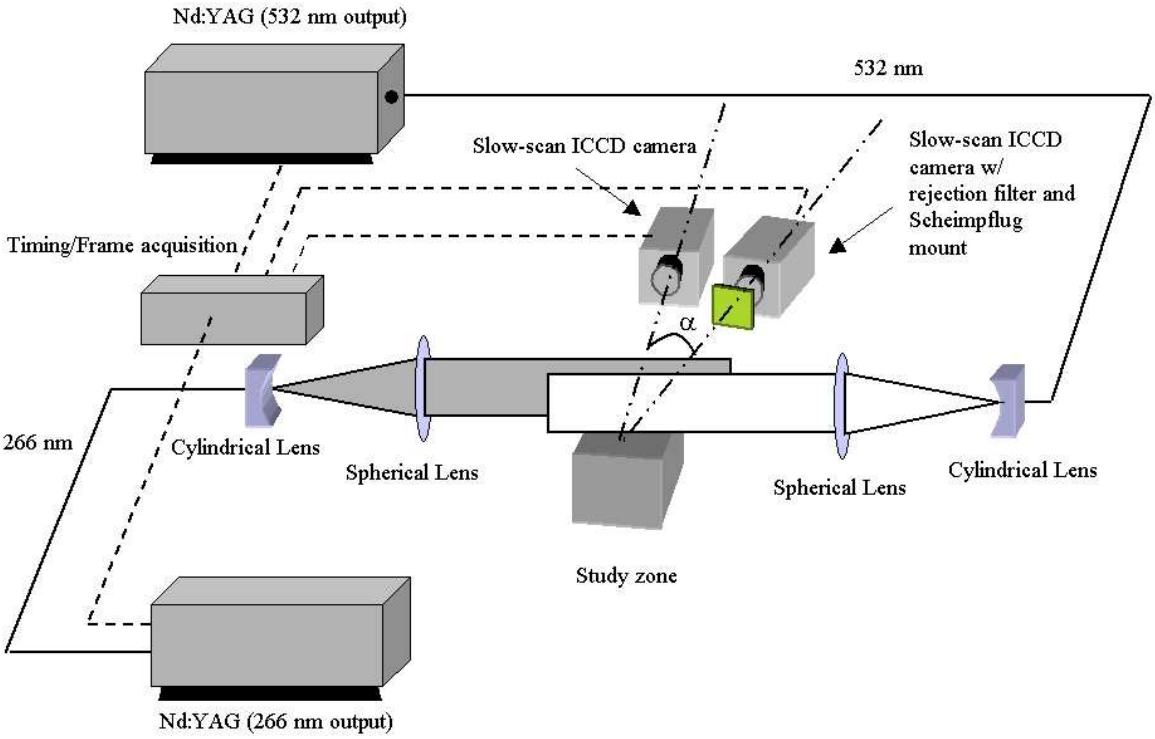


FIG. 9.3 – Dispositif optique utilisé pour les mesures simultanées de PLIF sur acétone et de diffusion Rayleigh [27]

cet ensemencement correspond à $0,1\%$ en volume d'acétone dans le mélange méthane-air.

Les mesures simultanées de température et de fraction molaire de combustible par diffusion Rayleigh et PLIF sur acétone soulèvent d'importants problèmes dans le cas de combustion de mélange partiel. Tout d'abord, le signal de fluorescence diminue très fortement lorsque la température augmente. Il faut remarquer que la distance nécessaire pour que la température augmente de la température des gaz frais (300K) à la température de pyrolyse de l'acétone (1000K) peut ne pas être négligeable, particulièrement dans le cas d'un mélange homogène pauvre ou d'un mélange stratifié. De plus, l'acétone présent dans le mélange et nécessaire pour effectuer la mesure par PLIF, peut perturber les mesures de température obtenues par diffusion Rayleigh, et ceci même lorsque la concentration en acétone est très faible. Les mesures simultanées par diffusion Rayleigh et PLIF sur acétone permettent de corriger à la fois l'effet de la température sur les mesures de fraction molaire

de combustible et l'effet de l'acétone sur les mesures de température. L'équipe du CORIA [27] a procédé au développement d'outils numériques permettant d'effectuer ce type de correction par le biais d'un processus itératif.

9.2 Conditions des Simulations Numériques

9.2.1 Domaine de Calcul et Conditions aux Limites

Le maillage 2D utilisé pour les simulations est non-structuré, il est composé d'environ 21000 cellules et représente la moitié du domaine physique, comme le montre la figure 9.4. Les limites du domaine de calcul sont les suivantes :

- l'entrée amont se situe en bas du maillage 5 mm au dessous du fil chaud ($z = -5mm$) et représente la moitié de la largeur du tube ($40mm$) ;
- la sortie aval est en haut du maillage à $80mm$ au dessus du fil chaud ($z = 80mm$) ;
- le côté gauche du maillage représente la symétrie de l'écoulement ($x = 0$) ;
- le côté droit au dessous du fil chaud ($z < 0$) représente la paroi du tube ;
- le côté droit au dessus du fil chaud ($z > 0$) est une condition particulière qui peut être une entrée ou une sortie ;
- le fil chaud est représenté par un demi cylindre d'un millimètre de diamètre non chauffé.

Dans les simulations numériques de l'écoulement réactif la stabilisation de la flamme est obtenue grâce à la petite zone de recirculation créée par le demi cylindre. La représentation de cette zone est particulièrement critique et susceptible d'influencer très largement le résultat obtenu.

Les conditions limites d'entrée du domaine de calcul doivent être spécifiées très précisément car elles ont une très forte influence sur la combustion qui se développe en aval. Néanmoins, cette tâche est compliquée par différentes contraintes. Tout d'abord, les mesures qui permettent d'obtenir les conditions limites des variables résolues ne sont pas forcément disponibles à la position exacte de la condition limite d'entrée du domaine de calcul. De plus, certaines variables résolues sont très difficiles à mesurer, comme par exemple le taux de dissipation de la turbulence ϵ. Pour imposer les conditions aux limites

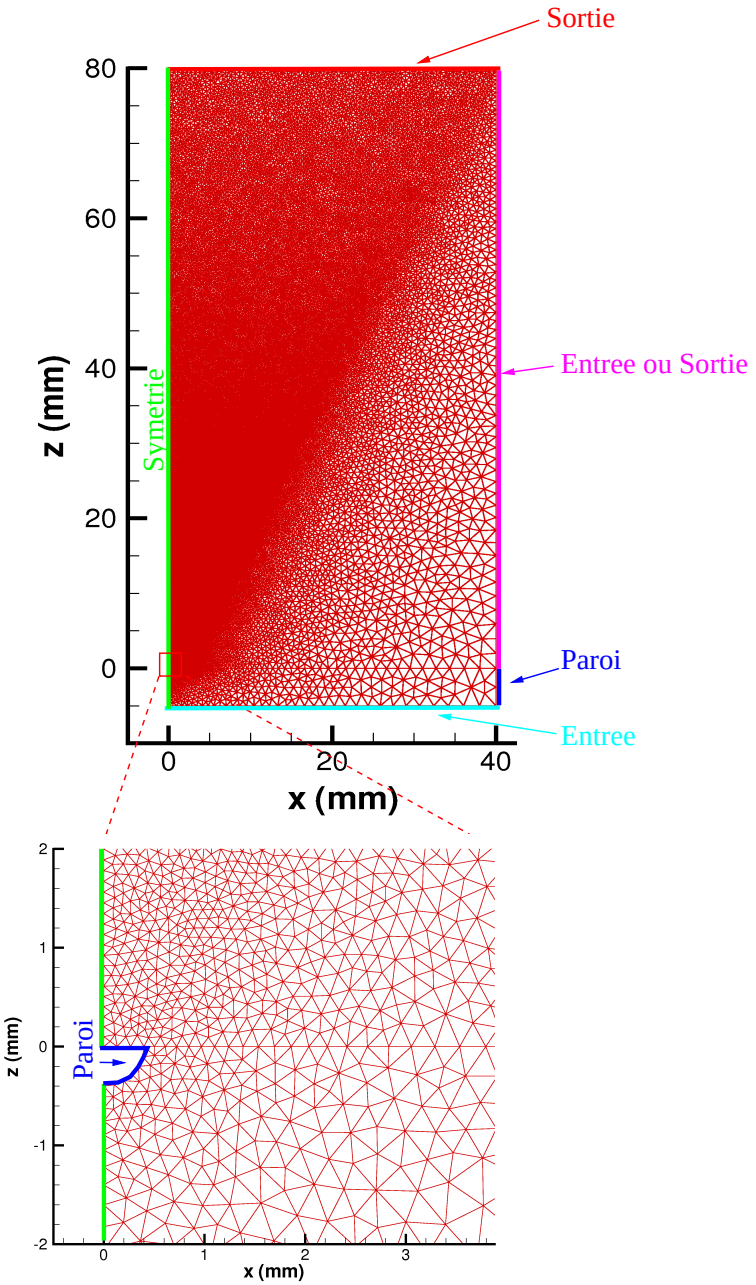


FIG. 9.4 – Maillage non structuré utilisé pour les simulations numériques

les plus réalistes possibles, nous avons tout d'abord comparé les résultats numériques et expérimentaux obtenus dans le cas d'un écoulement non réactif. Ces calculs préliminaires ont été effectués pour chaque cas réactif étudié soit HE06, SE10-0, SB08-0, SB12-0.

Le champ de vitesse moyen et l'énergie cinétique turbulente sont directement extraits des données expérimentales alors que le taux de dissipation ϵ est choisi de telle sorte que

la décroissance de la turbulence mesurée en aval de la grille soit restituée par la simulation numérique.

Les profils d'énergie cinétique turbulente au centre de la veine ($x = 0$), expérimentaux et numériques, correspondant à l'utilisation des grilles E et B, sont présentés sur la figure 9.5. Dans les cas étudiés, la composante longitudinale $\widetilde{u}$ de la vitesse moyenne est de $3,2$ m/s et la composante transversale $\widetilde{v}$ est nulle. L'énergie cinétique turbulente est imposée à partir de mesures ADL disponibles au niveau de la condition limite d'entrée (z=$-5mm$). Pour la grille E : k=$0,15$ m^2/s^2 et pour la grille B : k=$0,058$ m^2/s^2. Les taux de dissipation ϵ qui permettent de retrouver la bonne décroissance de turbulence pour les grilles E et B sont respectivement ϵ=10 m^2/s^3 et ϵ=$2,3$ m^2/s^3 (cf. 9.5).

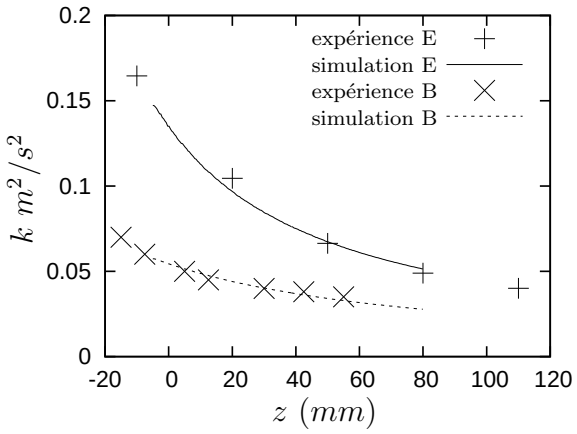


FIG. 9.5 – Décroissance de la turbulence pour les grilles B et E. La dissipation moyenne ϵ à l'entrée du domaine de calcul a été ajustée pour restituer les caractéristiques expérimentales de décroissance de la turbulence.

Enfin, les conditions aux limites d'entrée pour les scalaires sont obtenues directement à partir des données expérimentales. Rappelons que pour un mélange de gaz frais les scalaires résolus sont reliés de la façon suivante : $\widetilde{Y} = \widetilde{\xi}$ et $\widetilde{Y''^2} = \widetilde{\xi''^2} = \widetilde{Y''\xi''}$. Les profils de richesse moyenne et de variance de richesse obtenus à deux distances différentes du fil chaud dans le cas des simulations des écoulements non réactifs sont présentés sur les figures 9.6 et 9.7.

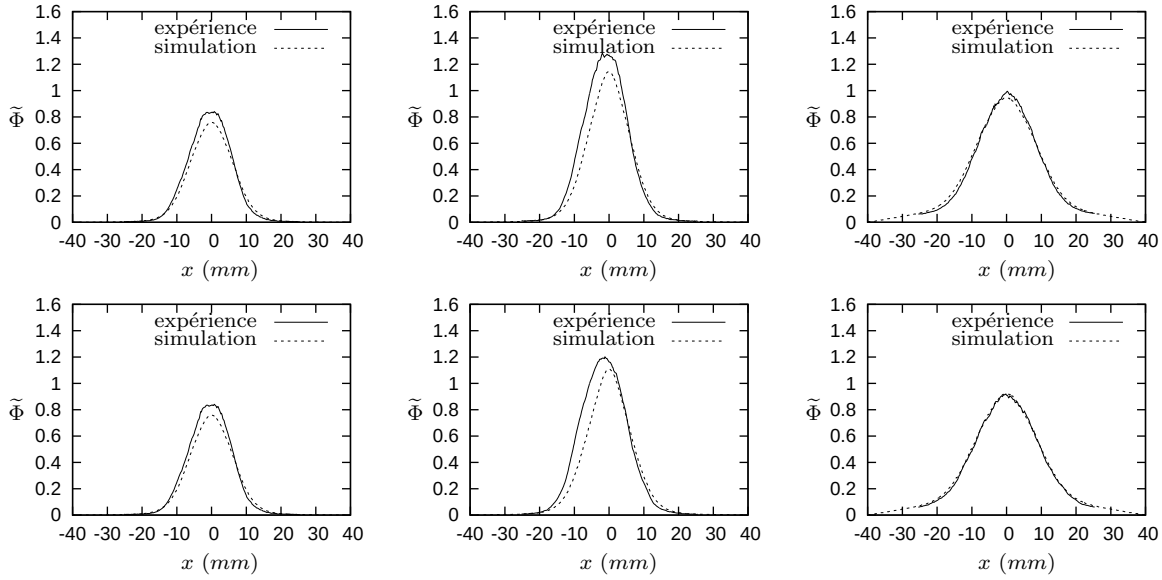


FIG. 9.6 – Richesse à z=42.5 mm (haut) et z=70 mm (bas), dans des conditions non réactives pour les cas SB08-0 (gauche), SB12-0 (centre), SE10-0 (droite).

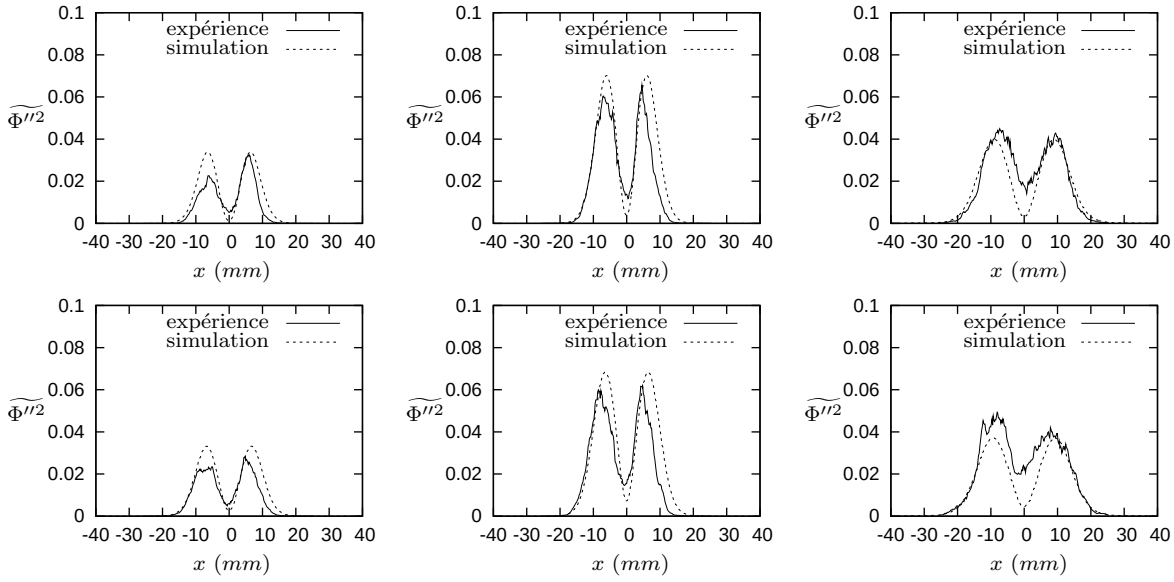


FIG. 9.7 – Variance de richesse à z=42.5 mm (haut) et z=70 mm (bas), dans des conditions non réactives pour les cas SB08-0 (gauche), SB12-0 (centre), SE10-0 (droite).

9.2.2 Temps Caractéristique Chimique du Méthane

Le temps caractéristique chimique associé au mélange méthane-air utilisé est pris en compte dans les simulations numériques par l'intermédiaire du taux de consommation de combustible. Ce taux de consommation de combustible est exprimé par la loi d'Arrhénius pour la réaction globale (4.1) et rappelée ici :

$$\omega = \rho\Omega = \rho K\left(\xi\right)\left(Y - Y_{\min}\left(\xi\right)\right)\exp\left[-T_a/T\right]$$

Dans cette relation, le coefficient pré-exponentiel K et la température d'activation T_a doivent être déterminés en fonction du temps caractéristique chimique du mélange réactif considéré. Dans le cas que nous traitons dans cette étude, il s'agit d'un mélange de méthane et d'air dont la composition peut être fortement variable. Ces hétérogènéités de composition s'accompagnent d'hétérogènéités du temps caractéristique chimique. Pour prendre en compte ces fluctuations du temps caractéristique chimique nous avons choisi d'utiliser un coefficient pré-exponentiel qui est une fonction de la richesse.

Les valeurs du coefficient pré-exponentiel K et de la température d'activation T_a sont déterminées en analysant les résultats de calculs de flammes laminaires 1-D basés sur un mécanisme cinétique détaillé. Le logiciel utilisé est le module PREMIX des librairies CHEMKIN II [38] avec le schéma GRI-2.11 de Bowman et al [14]. Le coefficient pré-exponentiel K est déterminé de telle sorte que l'évolution du taux de consommation de combustible ω en fonction de la fraction massique de combustible obtenue avec le schéma cinétique détaillé soit du même ordre de grandeur que celle obtenue avec la réaction globale (4.1). La température d'activation est quant à elle déterminée de façon à retrouver, avec le schéma cinétique détaillé et avec la réaction globale, la même pente du taux de consommation de combustible du côté des gaz brûlés $d\omega/dY \mid_{Y=0}$. La température d'activation est constante et prise égale à 25000 K. La tabulation du coefficient pré-exponentiel obtenue ainsi que l'inverse du temps chimique correspondant sont présentés sur la figure 9.8. Les taux de réaction chimique $\omega = f(Y)$ obtenus avec le schéma cinétique détaillé et la réaction globale sont tracés pour différentes valeurs de la richesse sur la figure 9.9.

Les taux de réaction chimique $\omega = f(Y)$ obtenus avec le schéma cinétique détaillé est en très bon accord avec la réaction globale lorsque la richesse est inférieure à la

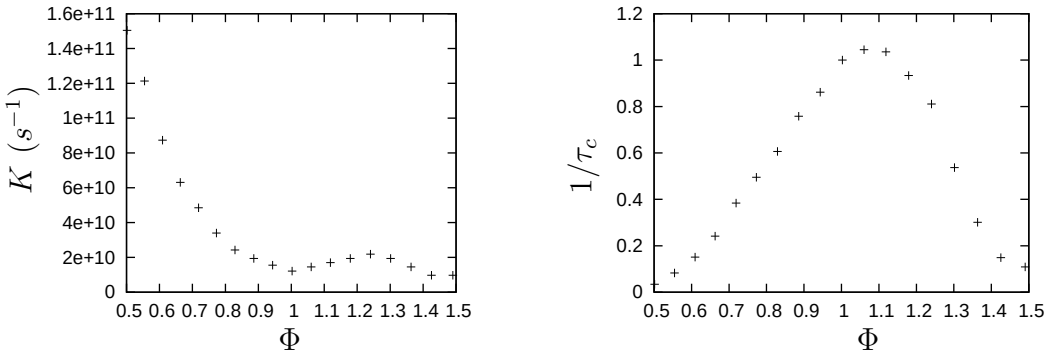


FIG. 9.8 – Coefficient pré-exponentiel K (gauche) et l'inverse du temps chimique ($1/\tau_c$=$K \exp(T_a/T_{ad})$) du mélange méthane-air adimensionné par la valeur à la stœchiométrie (droite) en fonction de la richesse

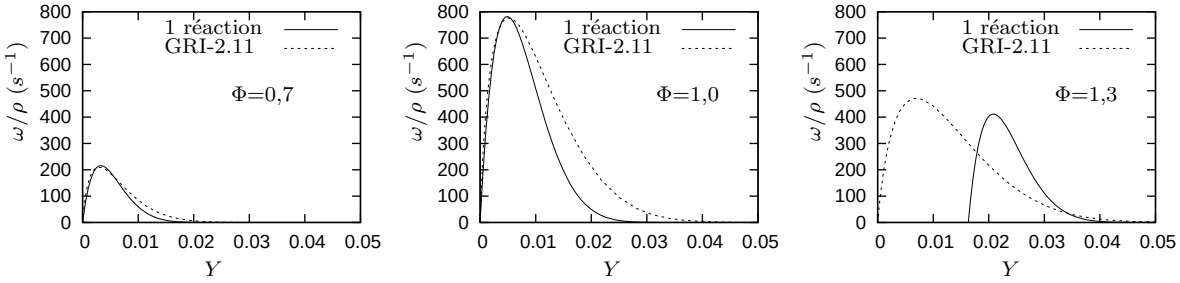


FIG. 9.9 – Taux de réaction chimique en fonction de la fraction massique de combustible ω / ρ = $f(Y)$ obtenus avec l'expression 4.1 pour la réaction globale et avec le schéma cinétique détaillé GRI-2.11, Φ=0,7 (gauche), Φ=1,0 (centre) et Φ=1,3 (droite).

stœchiométrie. En revanche, pour des mélanges riches, les taux de réaction obtenus sont très différents. Cette différence est due à l'utilisation d'un schéma cinétique détaillé qui permet au combustible de réagir lorsque qu'il n'y a plus d'oxygène alors que ce n'est pas possible en considérant une réaction globale. Ce résultat montre que la fraction massique de combustible n'est pas représentative du processus de combustion à travers la flamme pour des mélanges riches et dans ces conditions elle ne peut plus être utilisée comme variable d'avancement. Malgré le bon accord obtenu pour $\omega = f(Y)$ entre le schéma cinétique détaillé et la réaction globale lorsque le mélange est pauvre, la fraction massique de combustible ne représente pas complètement les processus de combustion à travers la flamme car certaines réactions chimiques très importantes (les réactions qui produisent des

polluants) ne se produisent qu'après la disparition complète du combustible. L'utilisation de la fraction massique de combustible comme variable d'avancement n'est justifiée ici que par sa simplicité lorsqu'elle est associée a une réaction globale.

La loi d'Arrhénius pour la réaction globale que nous utilisons est exprimée par la relation (4.1) et est rappelée ici :

$$\omega = \rho\Omega = \rho K\left(\xi\right)\left(Y - Y_{\min}\left(\xi\right)\right)\exp\left[-T_a/T\right]$$

Cette forme pour exprimer la réaction globale est différente de celle donnée par la relation suivante, précédemment utilisée dans les travaux de Ribert et al [75] et Robin et al. [79] :

$$\omega = \rho Y Y_{O_2} B \exp\left[-T_a/T\right] \tag{9.1}$$

Cette dernière forme pour la réaction globale pose d'importants problèmes lorsqu'on s'intéresse à des situations proches des conditions stœchiométriques pour lesquelles les gradients de richesse sont importants. En effet, lorsque la richesse est proche de l'unité, la fraction massique de combustible et la fraction massique de dioxygène s'annulent simultanément dans les gaz brûlés. Dans ce cas, le taux de réaction chimique $\omega = f(Y)$ obtenu par la réaction globale ne peut pas correspondre à celui obtenu avec le schéma cinétique détaillé. La figure 9.10 montre l'intérêt d'utiliser la relation (4.1) plutôt que la relation (9.1) pour représenter le taux de réaction chimique $\omega = f(Y)$ dans des conditions proches de la stœchiométrie.

9.3 Simulations Numériques des Ecoulements Réactifs

Ces simulations numériques ont été conduites en parallèle avec les études expérimentales de Degardin et al. dans le but d'évaluer l'influence des hétérogénéités de richesse sur les flammes en V turbulentes. L'analyse des phénomènes physiques mis en jeu par la combustion stratifiée indique clairement la nécessité de connaître simultanément l'avancement de la réaction et la composition du mélange. Le modèle de combustion LW-P proposé dans la partie précédente doit être validé avec des données expérimentales suffisamment précises et pour des configurations où les variations de richesse sont significatives. Ainsi,

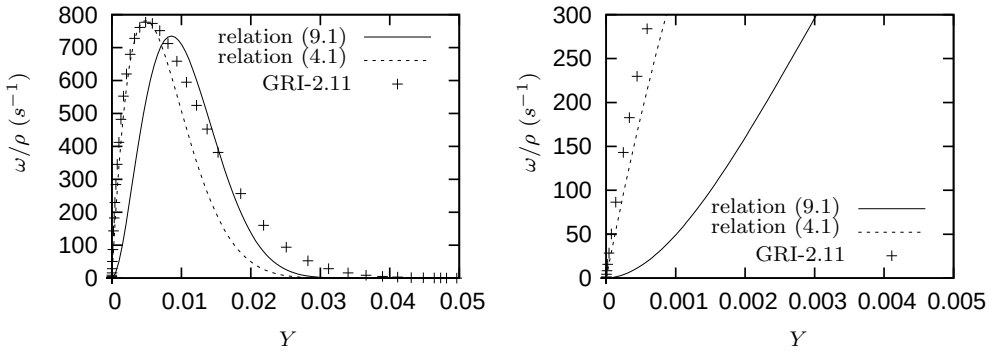


FIG. 9.10 – $\omega\ /\ \rho\ =\ f(Y)$ pour Φ=1 dans le cas d'une réaction globale en utilisant l'expression (4.1), dans le cas d'une réaction globale en utilisant l'expression (9.1) et dans le cas du schéma cinétique détaillé GRI-2.11, la figure de droite est un agrandissement de la figure de gauche pour de faibles valeurs de Y.

le rôle important joué par la fermeture de la dissipation-croisée $\epsilon_{Y\xi}$ va pouvoir être mis en évidence.

Les résultats expérimentaux et numériques sont comparés pour les cas d'un mélange initial homogène ou stratifié décrit dans le tableau 9.1. Nous avons d'abord étudié la combustion d'un mélange homogène dans le but d'obtenir un cas de référence et de permettre des comparaisons directes avec les cas où le mélange est stratifié. Dans un premier temps, nous comparons les résultats numériques et expérimentaux, dans le but d'évaluer les capacités prédictives du modèle. Ces comparaisons sont effectuées sur les profils de vitesses moyennes et fluctuantes, la température et l'avancement de la réaction. Dans un second temps, nous utilisons les résultats des simulations obtenus dans différentes conditions de stratification pour évaluer les corrélations difficilement accessibles à la mesure. On peut s'attendre à ce que ces quantités, en particulier le taux de réaction chimique moyen $\overline{\omega}$ et la covariance $\widetilde{Y''\xi''}$, soient fortement dépendantes du taux d'hétérogénéité de richesse de l'écoulement amont.

9.3.1 Comparaison des Simulations Numériques avec les Données Expérimentales

Prémélange Parfait

Les résultats numériques sont tout d'abord comparés aux résultats expérimentaux pour des flammes turbulentes parfaitement prémélangées. Dans ce cas, la PDF du modèle LW-P se réduit à deux pics de Dirac et les équations scalaires résolues sont celles pour la fraction massique de combustible (1.25) et pour sa variance (1.33). Le principal objectif de cette première comparaison est de valider la représentation de la chimie dans le modèle LW-P en étudiant les profils de vitesse et les profils des scalaires à la traversée de la flamme turbulente. La dissipation scalaire est modélisée par la fermeture généralisée donnée par l'équation (6.4) qui a déjà été validée au chapitre 8.

Le champ de vitesse obtenu par la simulation numérique est comparé aux données expérimentales à trois différentes distances du fil chaud, ces champs sont donnés sur la figure 9.11. Ces comparaisons sont effectuées là où les données expérimentales sont disponibles. Les propriétés principales du champ de vitesse réactif sont bien restituées par les simulations numériques, en particulier l'accélération provoquée par l'expansion des gaz brûlés et la déflection du champ de vitesse produite par le passage entre gaz frais et gaz brûlés.

Toutefois, on observe une petite différence de vitesse longitudinale juste en aval du fil chaud. Dans les expériences, la diminution de vitesse engendrée par le fil chaud est moins importante que celle observée dans les simulations. Cette différence peut être expliquée par la forme du fil chaud qui est un demi cylindre dans les simulations et provoque donc une zone de recirculation plus importante que le cylindre complet réel. L'accélération des gaz brûlés n'est pas suffisamment forte à cette faible valeur de la richesse pour compenser la différence de vitesse observée. Une différence similaire a été observée dans les travaux de Bell et al. [5] entre les mesures et les résultats de la simulation numérique directe d'une flamme en V turbulente stabilisée par un fil chaud.

Les mesures expérimentales fournissent également le champ de température moyen au sens de Reynolds soit $\overline{T}$ et le champ de la variable d'avancement moyenne au sens

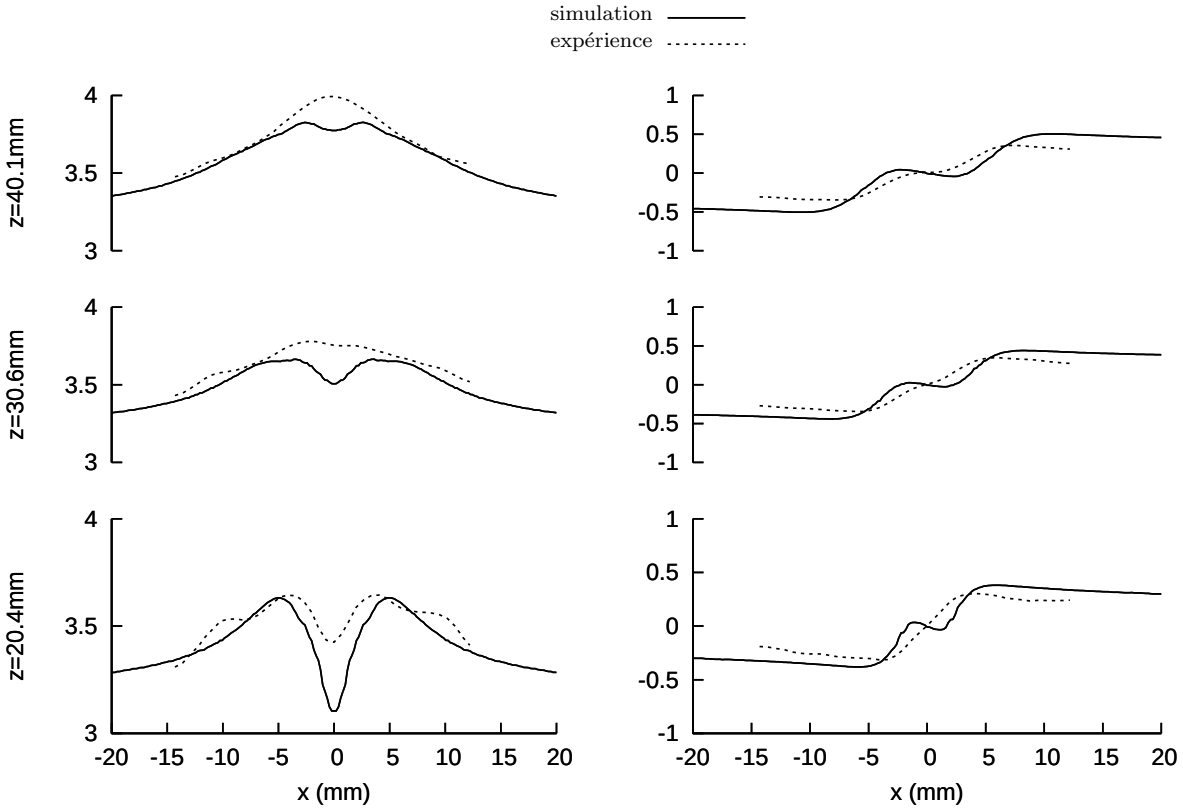


FIG. 9.11 – Vitesse moyenne longitudinale (gauche) et transversale (droite) en $m.s^{-1}$ à trois distances différentes du fil chaud z=20.4, 30.6 et 40.1 mm pour des conditions d'un mélange homogène, cas HE06.

de Reynolds également soit $\overline{c}$, qui représente la température réduite. Les simulations numériques fournissent les champs de température et d'avancement moyen au sens de Favre soit $\widetilde{T}$ et $\widetilde{c}$. La variable d'avancement c est définie de la façon suivante :

$$c = \frac{Y - Y_{\min}(\xi)}{Y_{\max}(\xi) - Y_{\min}(\xi)} \qquad Y_{\max}(\xi) = \xi \qquad Y_{\min}(\xi) = \frac{\xi - \xi_{st}}{1 - \xi_{st}} \tag{9.2}$$

Dans les simulations, l'emploi de la PDF jointe de la fraction massique et de la fraction de mélange permet donc d'obtenir n'importe quelles quantités moyennes (fonction de ξ et Y seulement) au sens de Reynolds $\overline{q}$ à partir des quantités au sens de Favre par la relation suivante :

$$\overline{q} = \frac{\widetilde{T^* q}}{\widetilde{T^*}} = \frac{\int q\, T^*(\xi, Y_f)\, \widetilde{P}(\xi, Y_f)\, d\xi\, dY_f}{\int T^*(\xi, Y_f)\, \widetilde{P}(\xi, Y_f)\, d\xi\, dY_f} \quad \text{avec} \quad T^* = T/M_m \tag{9.3}$$

La figure 9.12 montre les profils de la variance et de la variance maximale possible obtenus par les simulations numériques. On peut donc conclure que le régime de combustion

obtenu avec notre modélisation de la flamme en V turbulente stabilisée dans le domaine de calcul est le régime de flammelettes.

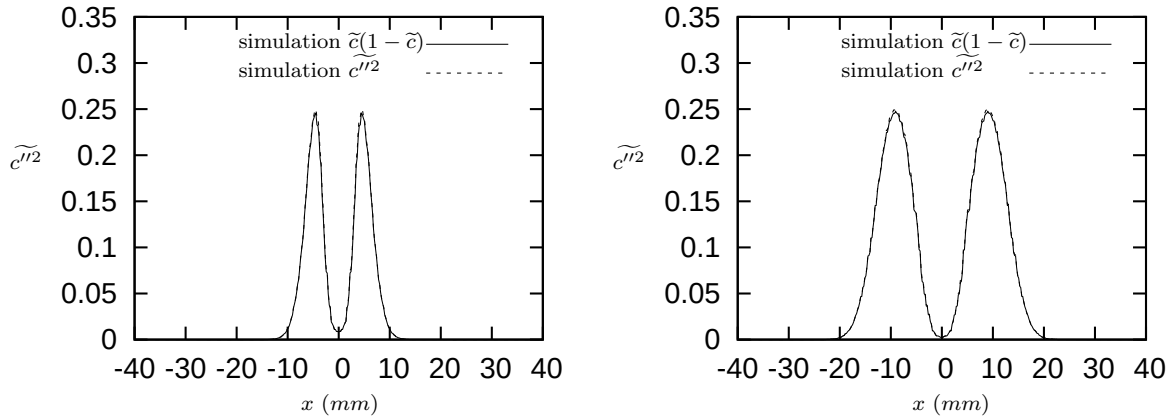


FIG. 9.12 – Variance de la variable d'avancement à z=42.5 mm (gauche) et 70 mm (droite) pour des conditions d'un mélange homogène, cas HE06.

Le champ expérimental de la variable d'avancement moyenne peut être obtenu par deux techniques différentes suivant que les images tomographiques sont binarisées ou non binarisées avant le procédé de moyenne. La figure 9.13 compare le résultat de la simulation avec les résultats expérimentaux obtenus en utilisant ces deux méthodes de traitement des images.

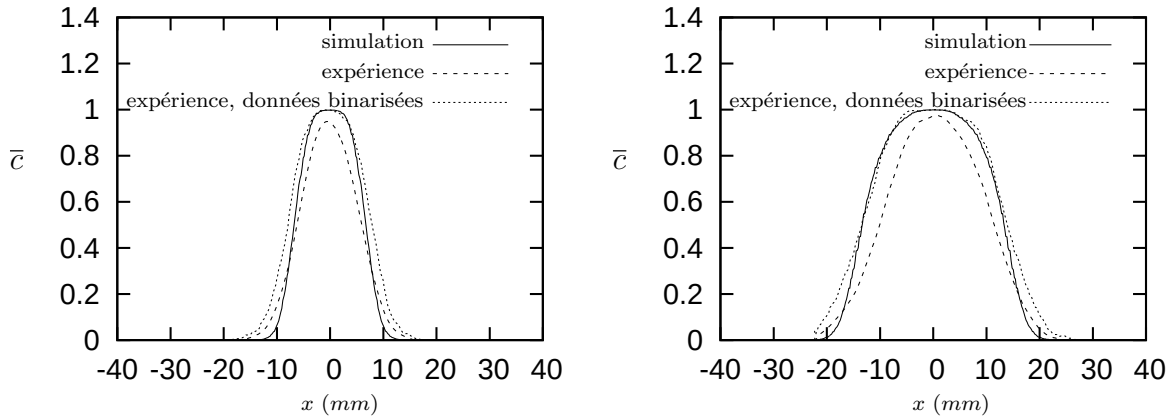


FIG. 9.13 – Variable d'avancement moyenne à z=42.5 mm (gauche) et 70 mm (droite) pour des conditions d'un mélange homogène, cas HE06.

Quel que soit le procédé expérimental utilisé pour traiter les images, la simulation numérique

donne de très bon résultats, en accord avec les données expérimentales. Toutefois, les résultats de la simulation sont plus proches des données expérimentales obtenues lorsque les images tomographiques sont binarisées.

Prémélange Partiel

Nous considérons maintenant le cas plus général d'un régime de combustion turbulente partiellement prémélangée en utilisant le modèle LW-P pour calculer l'écoulement réactif avec des conditions aux limites stratifiées. Dans le cas SE10-0 étudié ici, la richesse varie de l'unité au centre du tube à zero au bord. Les profils de vitesse moyenne longitudinale et transversale sont tracés sur la figure 9.14. Les simulations numériques permettent de très bien retrouver les vitesses moyennes expérimentales.

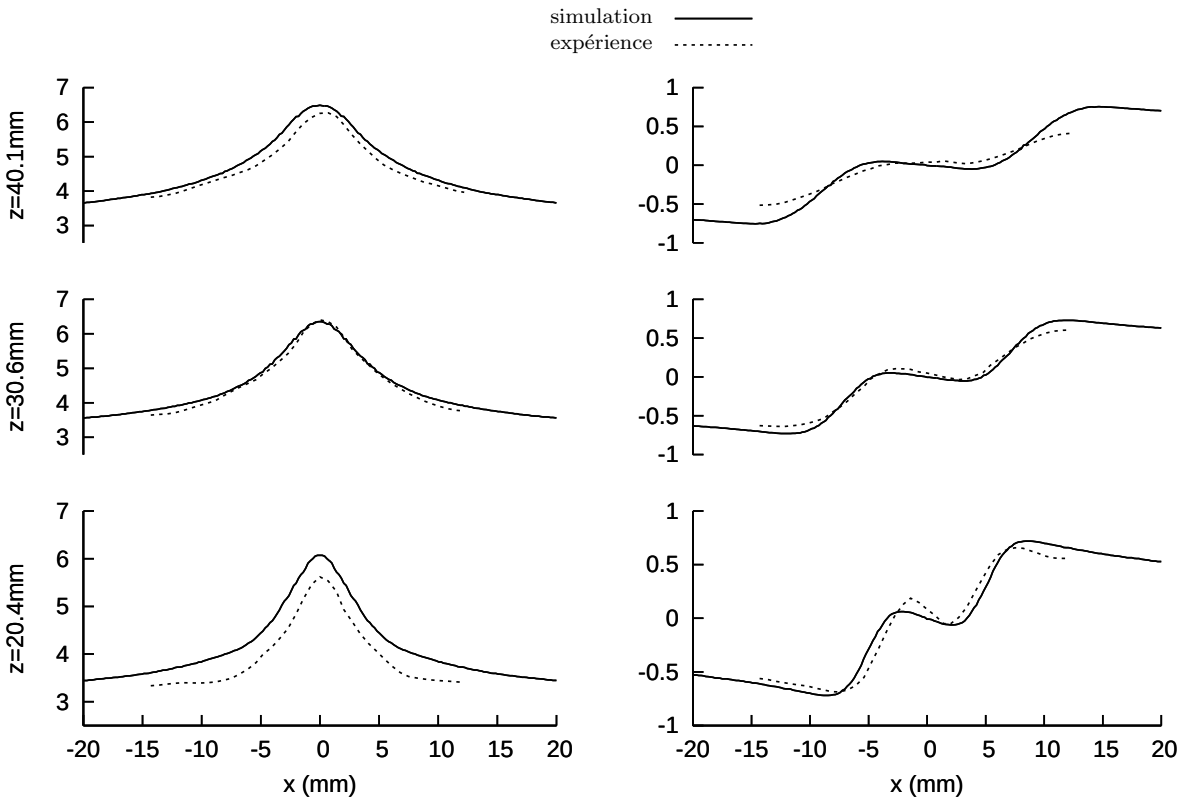


FIG. 9.14 – Composante longitudinale de la vitesse moyenne (gauche) et composante transversale (droite) en $m.s^{-1}$ à trois différentes distances du fil chaud z=20.4, 30.6 et 40.1 mm pour des conditions d'un mélange stratifié, cas SE10-0.

Il est intéressant de remarquer qu'il n'y a pas, ni dans les simulations, ni dans les expériences, de diminution de la vitesse en aval du fil chaud. En fait, dans ces conditions stratifiées, l'expansion des gaz brûlés n'est pas la même le long de la direction transversale et les valeurs importantes de la richesse autour du fil chaud conduisent à une accélération plus forte à cet endroit que sur les bords de l'écoulement. En conséquence, la vitesse moyenne longitudinale obtenue en aval du fil chaud est davantage contrôlée par l'expansion des gaz brûlés proches de la stœchiométrie que par la zone de recirculation créée par le fil chaud. Cette zone de recirculation nécessaire à la stabilisation de la flamme est beaucoup plus petite dans ces conditions stratifiées que dans le cas du mélange homogène étudié précédemment.

Les profils de la variable d'avancement moyenne, expérimentaux et calculés, sont présentés sur la figure 9.15 pour deux différentes distances du fil chaud.

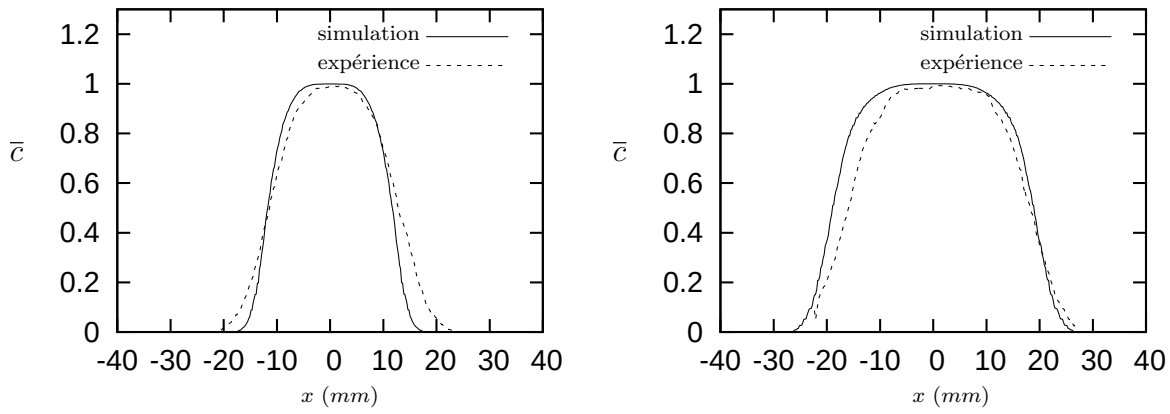


FIG. 9.15 – Variable d'avancement moyenne (données binarisées) à z=42.5 mm (gauche) et 70 mm (droite) pour des conditions d'un mélange stratifié, cas SE10-0.

Les profils expérimentaux présentés sur cette figure sont obtenus par le procédé de binarisation des images tomographiques. Comme le montre cette figure, l'accord entre les résultats expérimentaux et numériques est bon, ce qui démontre la capacité du modèle LW-P à simuler les écoulements réactifs partiellement prémélangés.

Dans le paragraphe qui suit, les simulations numériques sont utilisées pour mettre en évidence la réponse de la flamme à différentes conditions de stratifications de richesse.

9.3.2 Analyse d'une Flamme Turbulente Stratifiée

Les simulations effectuées en utilisant le modèle LW-P ont donné des résultats satisfaisants aussi bien dans des conditions homogènes (HE06) que stratifiées (SE10-0). Les comparaisons avec les données expérimentales présentées jusqu'à présent correspondent à l'utilisation de la grille de turbulence E.

Nous considérons maintenant les résultats des simulations obtenus dans les conditions stratifiées pauvres (SB08-0) et riches (SB12-0) en utilisant la grille de turbulence B. Les profils de la variable d'avancement obtenus dans ces conditions sont comparés aux données expérimentales sur les figures 9.16 et 9.17.

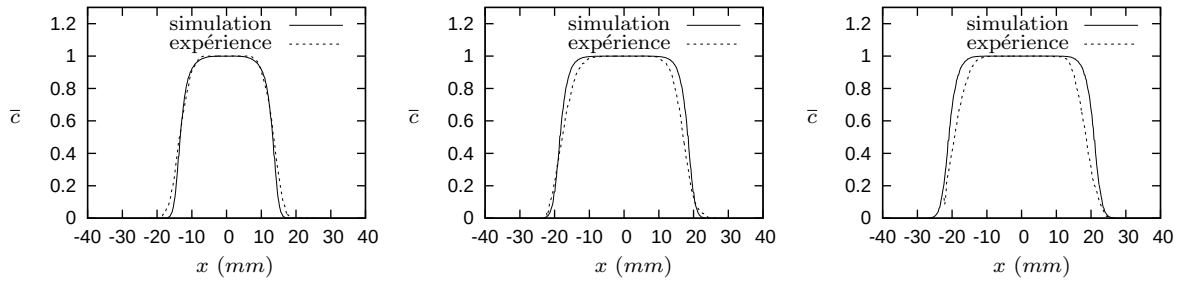


FIG. 9.16 – Variable d'avancement moyenne (données binarisées) à z=42.5 mm (gauche), 60 mm (centre) et 70 mm (droite) pour des conditions d'un mélange stratifié, cas SB08-0.

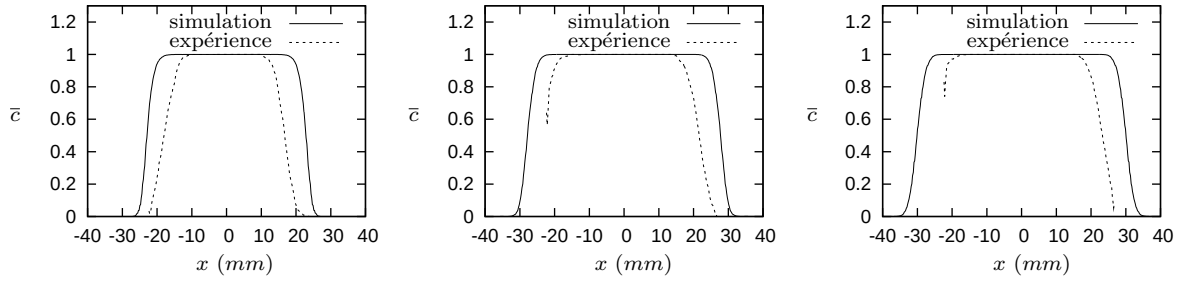


FIG. 9.17 – Variable d'avancement moyenne (données binarisées) à z=42.5 mm (gauche), 60 mm (centre) et 70 mm (droite) pour des conditions d'un mélange stratifié, cas SB12-0.

Les résultats obtenus dans les conditions pauvres SB08-0 sont en très bon accord avec les données expérimentales alors que dans les conditions riches SB12-0 les résultats sont un peu moins satisfaisants. En fait, dans ce dernier cas on remarque que le développement

de la flamme en V est tout de même correctement calculé par le modèle numérique car l'écart observé entre les profils expérimentaux et numériques reste constant. Par ailleurs, l'ouverture de la flamme est surévaluée uniquement à proximité de la zone de stabilisation de la flamme, là où la richesse est élevée. Cette caractéristique de l'écoulement est probablement due à l'utilisation d'une réaction globale qui ne permet pas de retrouver la composition des gaz brûlés correspondant à l'équilibre chimique. Cette approximation n'a pas de conséquence importante dans des conditions pauvres telles que les conditions SB08-0 car la différence de composition des gaz brûlés correspondant à la réaction globale irréversible (CO_2 et H_2O) et correspondant à l'équilibre chimique est très faible dans ce cas. En revanche, pour des mélanges de composition proche de la stœchiométrie tels que dans les conditions SB12-0, la différence entre la température adiabatique correspondant à l'équilibre chimique et correspondant à des gaz complètement brûlés (ne contenant plus que CO_2 et H_2O) peut être plus importante et conduire à une surestimation de l'expansion et donc de l'angle d'ouverture de la flamme.

Les champs de la variable d'avancement moyenne $\overline{c}$ et de sa variance $\overline{c''^2}$ sont représentés sur les figures 9.18 et 9.19. Les développements des flammes en V en aval du fil chaud dans les conditions SB08-0 et SB12-0 sont significativement différents. Pour expliquer cette différence nous nous appuyons sur les champs de fraction de mélange donnés par la la figure 9.20, nos conclusions sont les suivantes :

- A proximité du fil chaud, le champ de fraction de mélange est fortement affecté par l'expansion de la flamme ; les gradients de fraction de mélange et de la variable d'avancement tendent à suivre la même direction, la flamme se propage donc à travers le gradient de richesse.
- En aval du fil chaud, à la distance approximative de z=15mm, le flamme moyenne coupe la ligne stœchiométrique, ce qui conduit à une forte déviation du front de flamme moyen.

Cette caractéristique est aussi clairement visible sur les champs de fraction massique de combustible donnés par la figure 9.21 et les champs du taux de réaction chimique moyen donnés par la figure 9.22. On peut voir également sur la figure 9.21 l'excès de combustible présent au centre de l'écoulement (x=0) lorsque le mélange est riche.

Comme nous l'avons vu au cours du chapitre précédent pour les cas où le mélange est pauvre, la covariance $\widetilde{Y''\xi''}$ joue un rôle important lors de la combustion en prémélange partiel. Les champs de covariance obtenus dans les cas SB08-0 et SB12-0 sont représentés sur la figure 9.23.

La pente d de la droite (D) utilisée pour répartir les distributions de Dirac de la PDF du modèle LW-P dans l'espace des compositions (voir figure 4.2) est directement reliée à cette covariance par la relation 4.32, rappelée ici :

$$d = \frac{\widetilde{\xi''Y''}}{\widetilde{\xi''^2}}$$

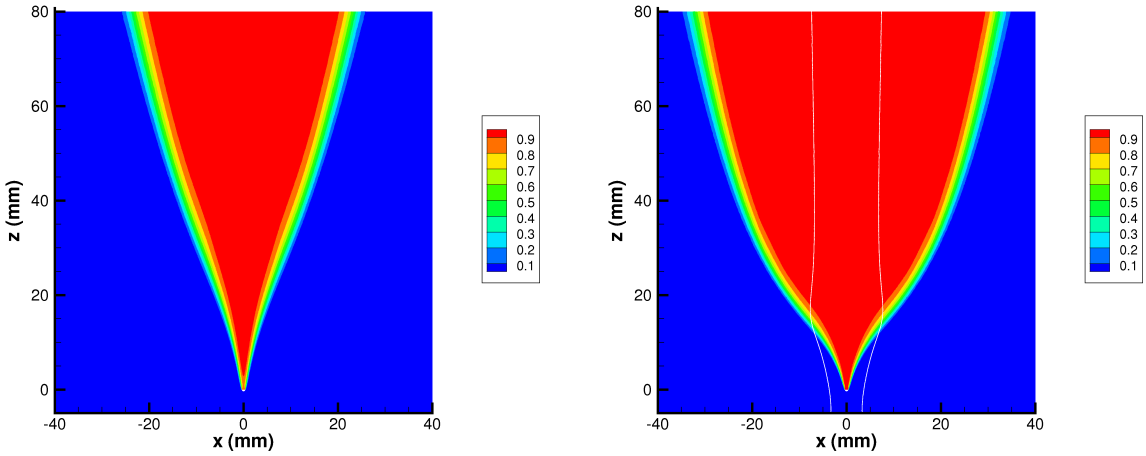


FIG. 9.18 – Champ de la variable d'avancement moyenne $\overline{c}$ pour des conditions d'un mélange stratifié SB08-0 et SB12-0. La ligne stœchiométrique $\widetilde{\xi}$=ξ_{st} est visualisée.

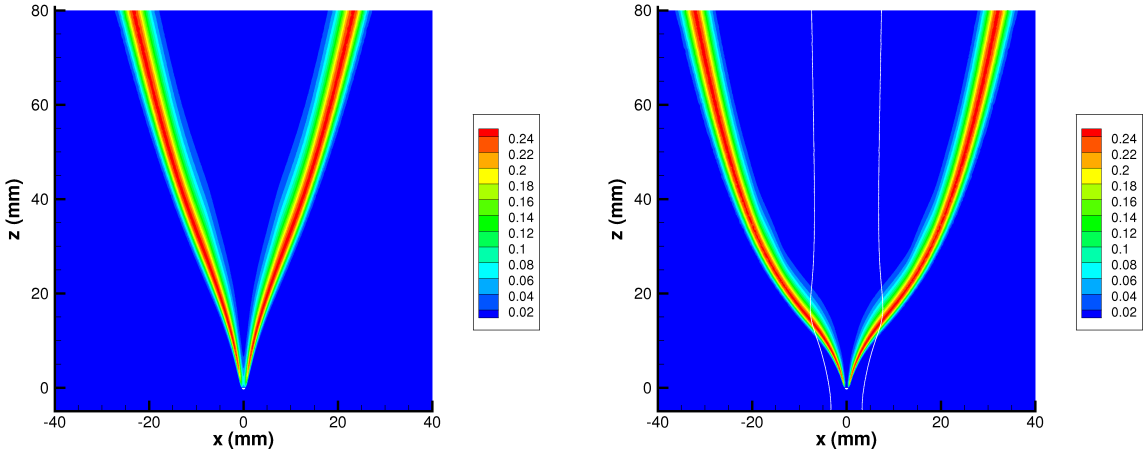


FIG. 9.19 – Champ de variance de la variable d'avancement $\overline{c''^2}$ pour des conditions d'un mélange stratifié SB08-0 et SB12-0. La ligne stœchiométrique $\widetilde{\xi}$=ξ_{st} est visualisée.

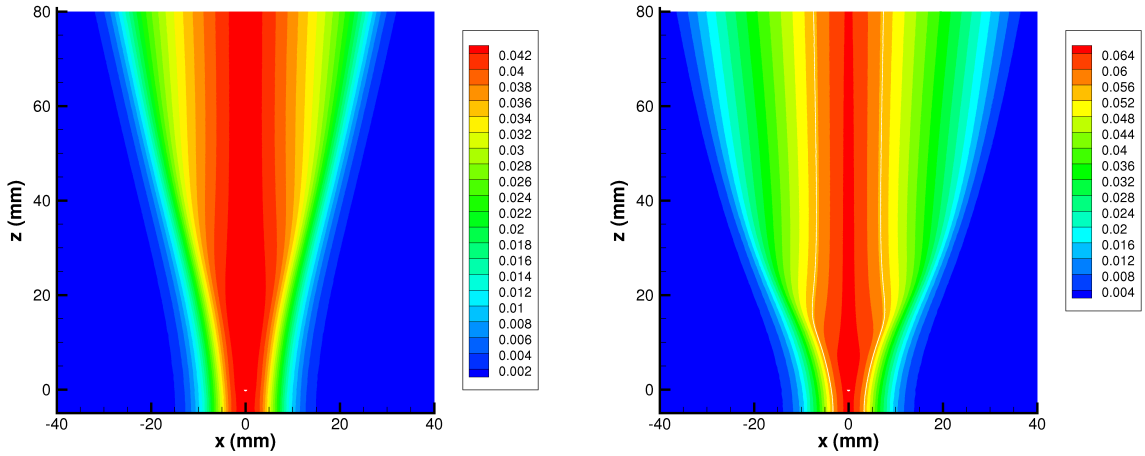


FIG. 9.20 – Champ de fraction de mélange moyenne $\widetilde{\xi}$ pour des conditions d'un mélange stratifié SB08-0 et SB12-0.

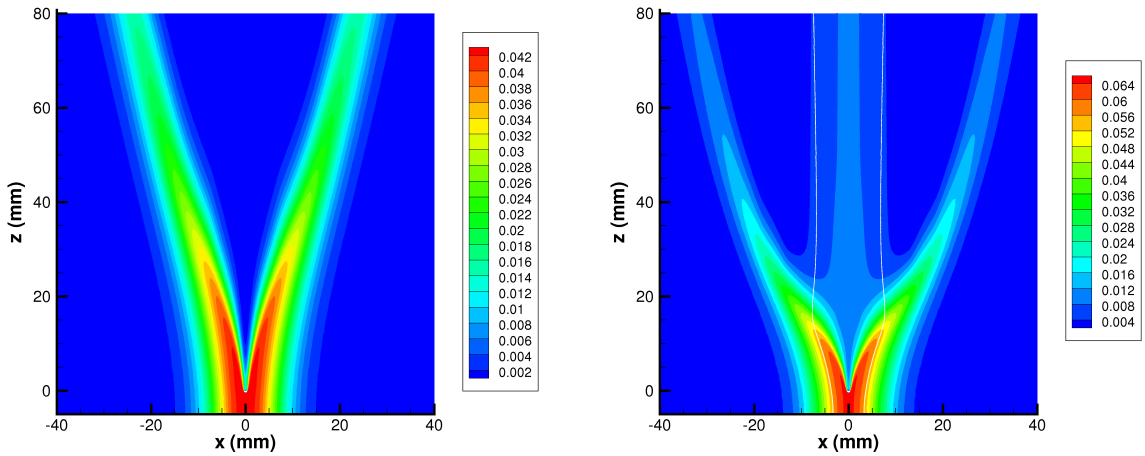


FIG. 9.21 – Champ de fraction massique de combustible moyenne $\widetilde{Y}$ pour des conditions d'un mélange stratifié SB08-0 et SB12-0. La ligne stœchiométrique $\widetilde{\xi}$=ξ_{st} est visualisée.

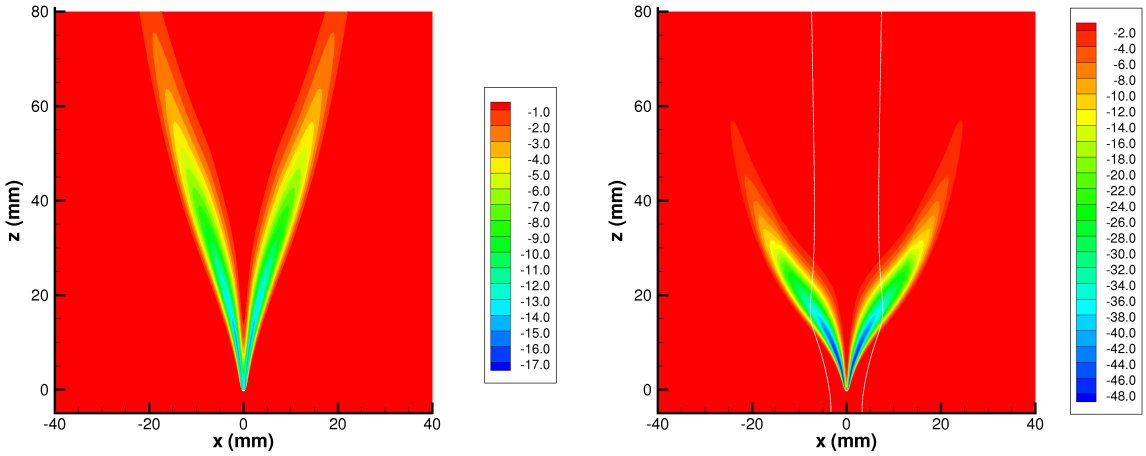


FIG. 9.22 – Taux de réaction chimique moyen $\overline{\omega}$ / $\overline{\rho}$ (s^{-1}) pour des conditions d'un mélange stratifiés SB08-0 et SB12-0. La ligne stœchiométrique $\widetilde{\xi}$=ξ_{st} est visualisée.

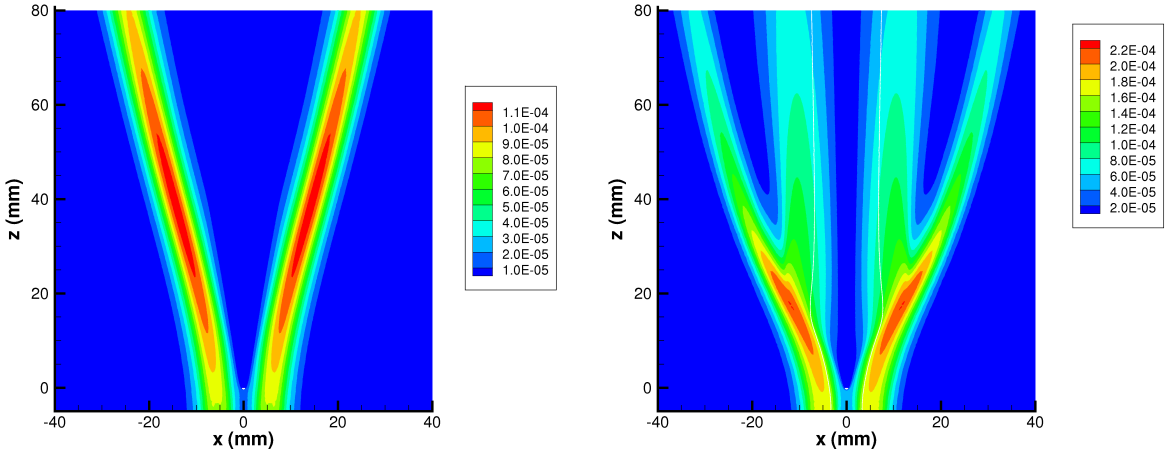


FIG. 9.23 – Champ de covariance $\widetilde{\xi''Y''}$ pour des conditions d'un mélange stratifié SB08-0 et SB12-0. La ligne stœchiométrique $\widetilde{\xi}$=ξ_{st} est visualisée.

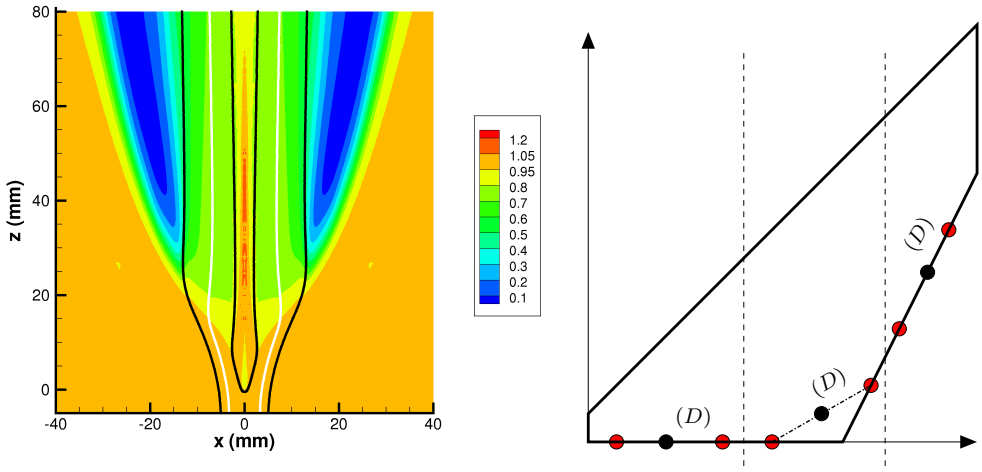


FIG. 9.24 – Coefficient directeur d de la droite (D) dans le cas SB12-0 (gauche), la ligne stœchiométrique $\widetilde{\xi}=\xi_{st}$ (ligne blanche) et les deux iso-lignes $\xi_1=\xi_{st}$ et $\xi_2=\xi_{st}$ (lignes noires) sont également tracées. Exemples de positions de la droite (D) dans les gaz brûlés (droite).

L'évolution de cette pente d dans le domaine de calcul est représentée sur la figure 9.24 et peut être expliquée de la façon suivante. Les fluctuations de richesse dans les gaz frais suivent la droite mélange ($Y=\xi$), la pente d est donc égale à l'unité dans ces conditions. Ensuite, la pente d diminue à la traversée de la flamme jusqu'à devenir nulle dans les gaz brûlés pauvres car il n'y a plus de combustible ($Y=0$ et $Y''=0$) alors que les fluctuations de fraction de mélange sont toujours possibles : $\widetilde{\xi''Y''}=0$ et $\widetilde{\xi''^2}\neq 0$. En revanche, lorsque le mélange est riche, le combustible est toujours présent dans les gaz brûlés, la pente d est donc différente de zéro et peut même devenir supérieure à l'unité. Finalement, la pente d évolue de façon continue de la droite de mélange (gaz frais) à la droite de combustion complète qui a une pente nulle dans les gaz pauvres et une pente égale à $(\xi-\xi_{st})/(1-\xi_{st})$ dans les gaz riches. Les différentes positions possibles de la droite (D) dans les gaz brûlés sont reportées sur la figure 9.24.

Les lignes iso-valeurs noires visualisées sur le champ de d de la figure 9.24 représentent les lignes stœchiométriques des fractions de mélanges ξ_1 et ξ_2 utilisées pour la construction de la PDF.

9.4 Conclusions

L'application du modèle LW-P de combustion turbulente présenté dans les chapitres 4, 5 et 6 à une flamme en V stratifiée stabilisée par un fil chaud a montré sa capacité à calculer un écoulement réactif partiellement prémélangé. La flamme turbulente en V que nous avons étudié [27, 81] est caractérisée par de forts gradients de richesse moyenne et de grandes échelles de fluctuations de richesse. Les nouvelles fermetures pour les taux de dissipation scalaire associées à une description simple mais précise du temps caractéristique chimique ont permis au modèle de traiter avec succès aussi bien des conditions stratifiées pauvres que riches. Les simulations numériques ont aussi été utilisées pour analyser l'évolution de certaines quantités statistiques, difficiles d'accès du point de vue expérimental.

L'étude préliminaire de flamme laminaire 1-D qui a permis de prendre en compte précisément les temps chimiques a révélé les limites de l'utilisation de la fraction massique de combustible comme variable d'avancement de la réaction pour des mélanges riches. De plus, les simulations numériques ont montré qu'il est nécessaire de prendre en compte l'équilibre chimique pour prédire l'expansion de l'écoulement avec suffisamment de précision, pour des conditions où la richesse est proche de la stœchiométrie (SB12-0). L'utilisation d'un mécanisme cinétique plus complexe que la réaction globale irréversible que nous utilisons ici doit alors être envisagée.

Chapitre 10

Simulation du Second Ordre d'un Ecoulement Turbulent Réactif Stabilisé en Aval d'un Elargissement Brusque

L'évaluation des performances des modèles du second ordre pour les écoulements turbulents réactifs de géométries proches des cas pratiques sont assez rares. En ce qui concerne les écoulements réactifs turbulents bidimensionnels comportant des recirculations et pouvant être considérés comme représentatifs des écoulements pratiques où les flammes se stabilisent, on peut citer les travaux de Bailly et al. [3] et Bigot et al. [9]. Ce chapitre décrit une nouvelle contribution à ce type de recherche en présentant l'évaluation des performances du modèle LW-P du second ordre lors ce son application à la géométrie ORACLES. Les travaux que nous présentons font donc suite à ceux de Bailly et al. [3] et Bigot et al. [9] qui ont validé leur modèle du second ordre en l'applicant aux géométries expérimentales de Shepherd et al. [86] et de Besson et al. [7]. La configuration de Shepherd et al. est une chambre de combustion où une flamme turbulente est stabilisée sur une marche et le dispositif de Besson et al. [7] est le banc d'essai ORACLES qui a déjà été décrit au chapitre 8. Les modèles de combustion turbulente utilisés par Bailly et al. [3] et Bigot et al. [9] décrits dans le chapitre 3 sont basés sur une approche BML et ne

peuvent donc représenter que la combustion en régime de flammelettes. Le modèle LW-P utilisé ici est applicable à tous les régimes de combustion et permet une description précise des variations du temps chimique, ce qui est une caractéristique importante de la combustion de prémélange partiel. Le modèle LW-P est aussi basé sur des fermetures des termes de dissipation des scalaires permettant de retrouver les cas limites des régimes de flammelettes et de flammes épaissies (cf chapitre 6). Concernant les fermetures des équations pour les flux turbulents des scalaires et les tensions de Reynolds, Bailly et al. [3] et Bigot et al. [9] ont modélisé les termes de pression en ne tenant compte que des effets de l'interaction du gradient de pression moyen et des fluctuations de masse volumique, négligeant en cela le rôle des fluctuations de pression. Une fermeture plus générale est utilisée ici, elle a été validée grâce à une base de donnée DNS 3D et permet de représenter les interactions pression-chimie (cf chapitre 7).

Le modèle LW-P du second ordre est validé en l'appliquant aux écoulements dans la configuration ORACLES où le prémélange réactif peut être partiel. Les détails concernant la configuration ORACLES ont été présentés au paragraphe 8.1. Les conditions limites des simulations et les comparaisons des résultats expérimentaux et numériques dans le cas d'un écoulement non réactif ont déjà été étudiées au paragraphe 8.2. La simulation d'un écoulement non réactif en utilisant le modèle de turbulence du second ordre $R_{ij} - \epsilon$ donne des résultats tout à fait similaires à ceux obtenus avec le modèle $k - \epsilon$. Nous nous concentrons ici sur l'étude des deux phénomènes dus à la combustion turbulente que le modèle LW-P du second ordre est susceptible de pouvoir représenter : la production de turbulence par la flamme et le transport turbulent à contre-gradient. Les résultats de ces travaux ont été présentés au colloque ICDERS en 2007 [82].

10.1 Production de Turbulence par la Flamme

Nous avons montré au chapitre 8 que le modèle LW-P du premier ordre est capable de représenter qualitativement la flamme turbulente stabilisée dans la chambre de combustion ORACLES. La figure 10.1 représente le taux de réaction chimique moyen obtenu pour un mélange homogène (Φ=0, 8) en utilisant le modèle LW-P du premier ordre, c'est-à-dire comportant une fermeture de type loi gradient pour les flux turbulents scalaires, associée

au modèle $R_{ij} - \epsilon$ LRR pour la turbulence proposé par Launder Reece et Rodi [46].

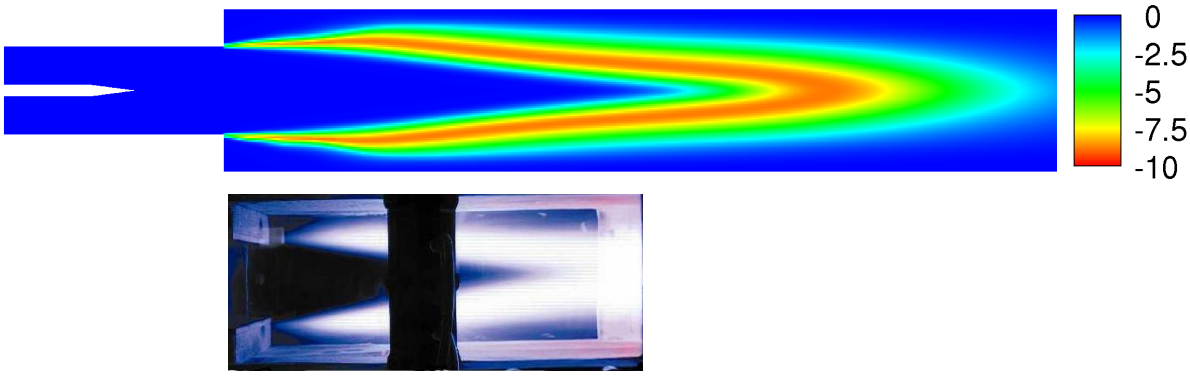


FIG. 10.1 – Taux de réaction moyen (s^{-1}) pour $\Phi(1)$=$\Phi(2)$=$0,8$ (LW-P premier ordre et $R_{ij} - \epsilon$ LRR) et visualisation directe de la flamme (temps de pose 1/50s)

L'accélération des gaz brûlés dans la chambre de combustion obtenue par les simulations qui utilisent ce modèle du premier ordre est en très bon accord quantitatif avec les données expérimentales comme le montre la figure 10.2. En revanche, les profils d'énergie cinétique à ces différentes distances montrent clairement que le modèle LW-P du premier ordre sous-estime de façon significative l'accroissement de l'énergie cinétique turbulente en aval de la flamme, cela même en utilisant le modèle de turbulence $R_{ij} - \epsilon$ LRR. La figure 10.2 montre les profils de vitesse moyenne longitudinale et d'énergie cinétique turbulente dans la chambre de combustion aux distances longitudinales $x/h_{step} = 7,02,\ 8,36$ et $9,70$. Cette simulation numérique utilisant le modèle LW-P avec une fermeture du premier ordre ne permet pas de retrouver les maxima d'énergie cinétique turbulente observés expérimentalement. En revanche les vitesses moyennes calculées sont en très bon accord avec les données expérimentales. De fait, les niveaux élevés d'énergie cinétique turbulente sont dus à la génération de turbulence par la flamme, mécanisme que le modèle LW-P du premier ordre ne peut pas représenter.

Un second calcul du même écoulement a été effectué en utilisant le modèle LW-P avec une fermeture du second ordre complète. La principale caractéristique de ce modèle du second ordre est la modélisation des termes de pression H_{ij}, H_i^{ξ} et H_i^{Y} intervenant dans les équations de transport pour les tensions de Reynolds et les flux turbulents par les relations (7.16), (7.17), (7.18) et (7.20). Ces expressions des termes de pression ont été testées en

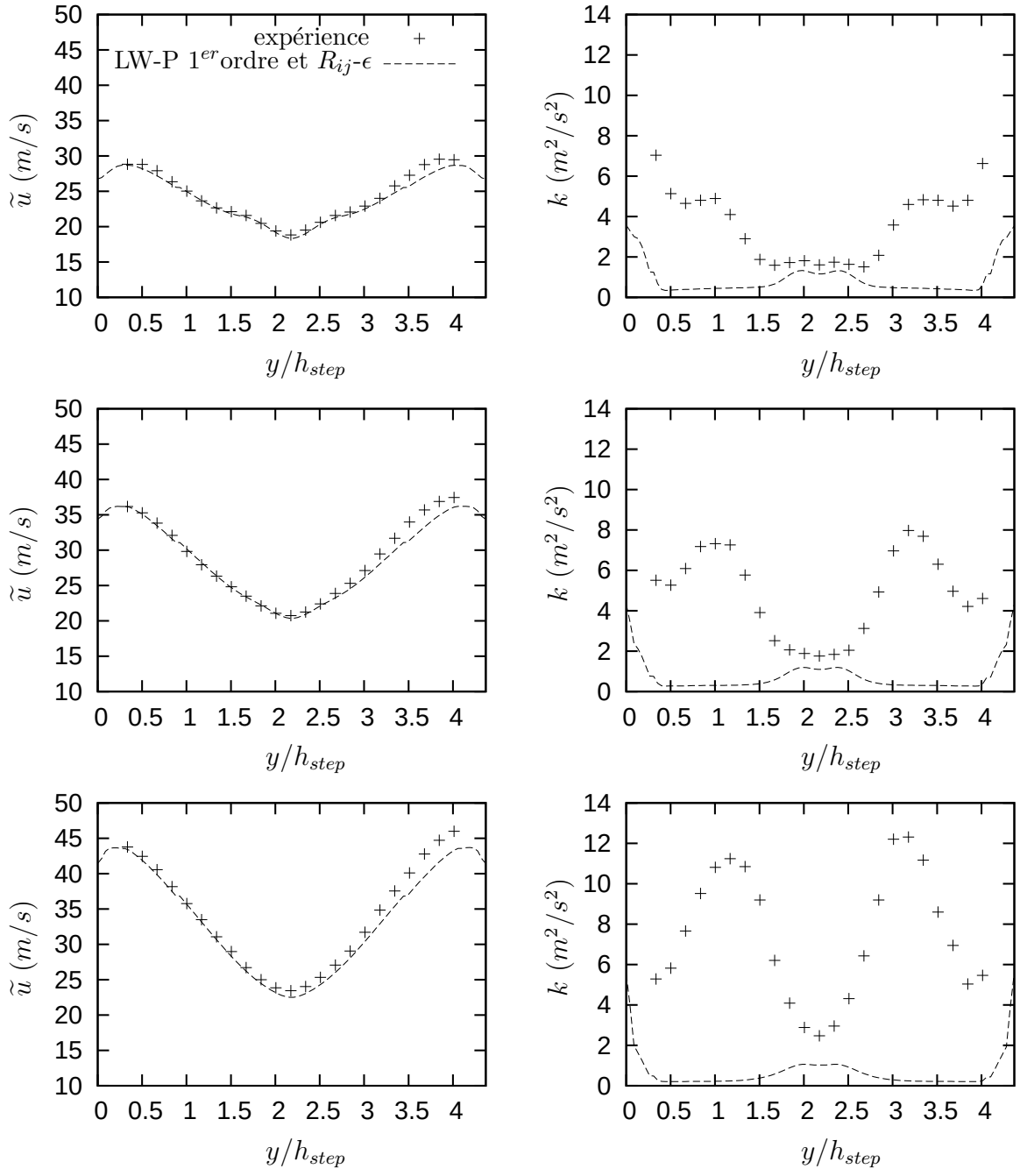


FIG. 10.2 – Vitesse moyenne longitudinale $\widetilde{u}$ et énergie cinétique turbulente k pour $\Phi(1)=\Phi(2)=0,8$ à $x/h_{step} = 7,32$ (courbes du haut), à $x/h_{step} = 8,36$ (courbes du milieu) et à $x/h_{step} = 9,70$ (courbes du bas), simulation utilisant le modèle LW-P premier ordre associé au modèle classique $R_{ij} - \epsilon$ LRR.

utilisant une base de données DNS 3D d'une flamme plane turbulente et nous avons montré que les résultats numériques sont en très bon accord avec ceux issus de cette base [83]. Toutefois, l'utilisation de ces fermetures dans des simulations où la flamme moyenne est résolue sur un nombre de mailles limité, conduit à certaines difficultés numériques liées aux calculs des gradients des quantités conditionnées. Ainsi, la partie non réactive du gradient de pression conditionné, équation (7.10), pour le calcul de la configuration ORACLES est simplement évaluée par le gradient de pression moyen $\partial\overline{p}/\partial x_i$. Ceci permet d'éviter le calcul du gradient de vitesse conditionnée en chaque état q : $\partial\overline{u}_{iq}/\partial x_k$.

Le champ d'énergie cinétique turbulente obtenu avec le modèle LW-P du premier ordre associé au modèle classique $R_{ij}-\epsilon$ LRR est comparé sur la figure 10.3 au champ d'énergie cinétique turbulente obtenu avec le modèle LW-P du second ordre complet. Les résultats de ces deux simulations montrent que le modèle du second ordre complet conduit à une augmentation de la turbulence dans la flamme turbulente moyenne et à une élévation des niveaux d'énergie cinétique turbulente en aval de la zone de réaction.

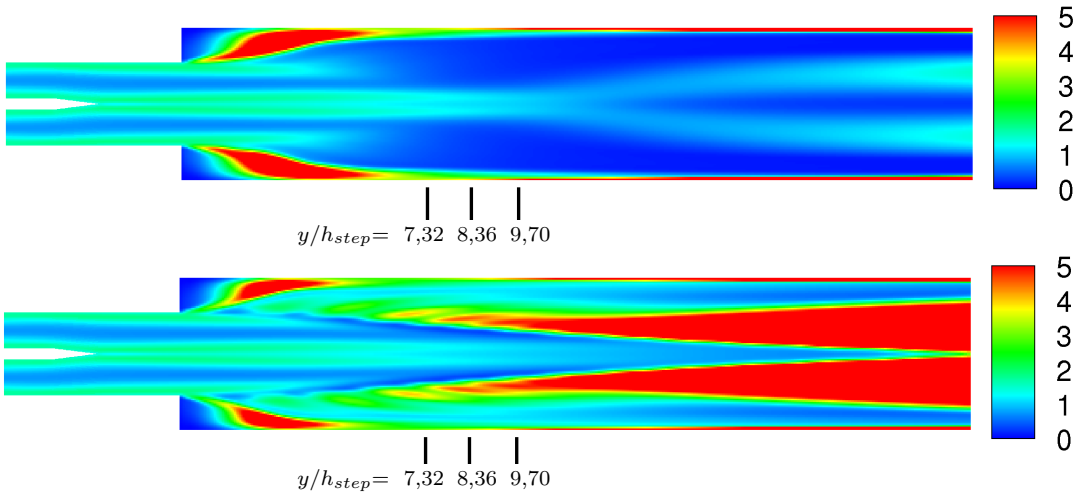


FIG. 10.3 – Energie cinétique turbulente $\widetilde{k}$ $(m^2.s^{-2})$ obtenue pour $\Phi(1)$=$\Phi(2)$=$0,8$ en utilisant le modèle LW-P du premier ordre associé au modèle classique $R_{ij}-\epsilon$ LRR (en haut) et le modèle LW-P du second ordre complet (en bas).

Les profils de vitesse moyenne longitudinale et les profils d'énergie cinétique turbulente obtenus pour ces deux simulations sont comparés aux données expérimentales sur la figure 10.4.

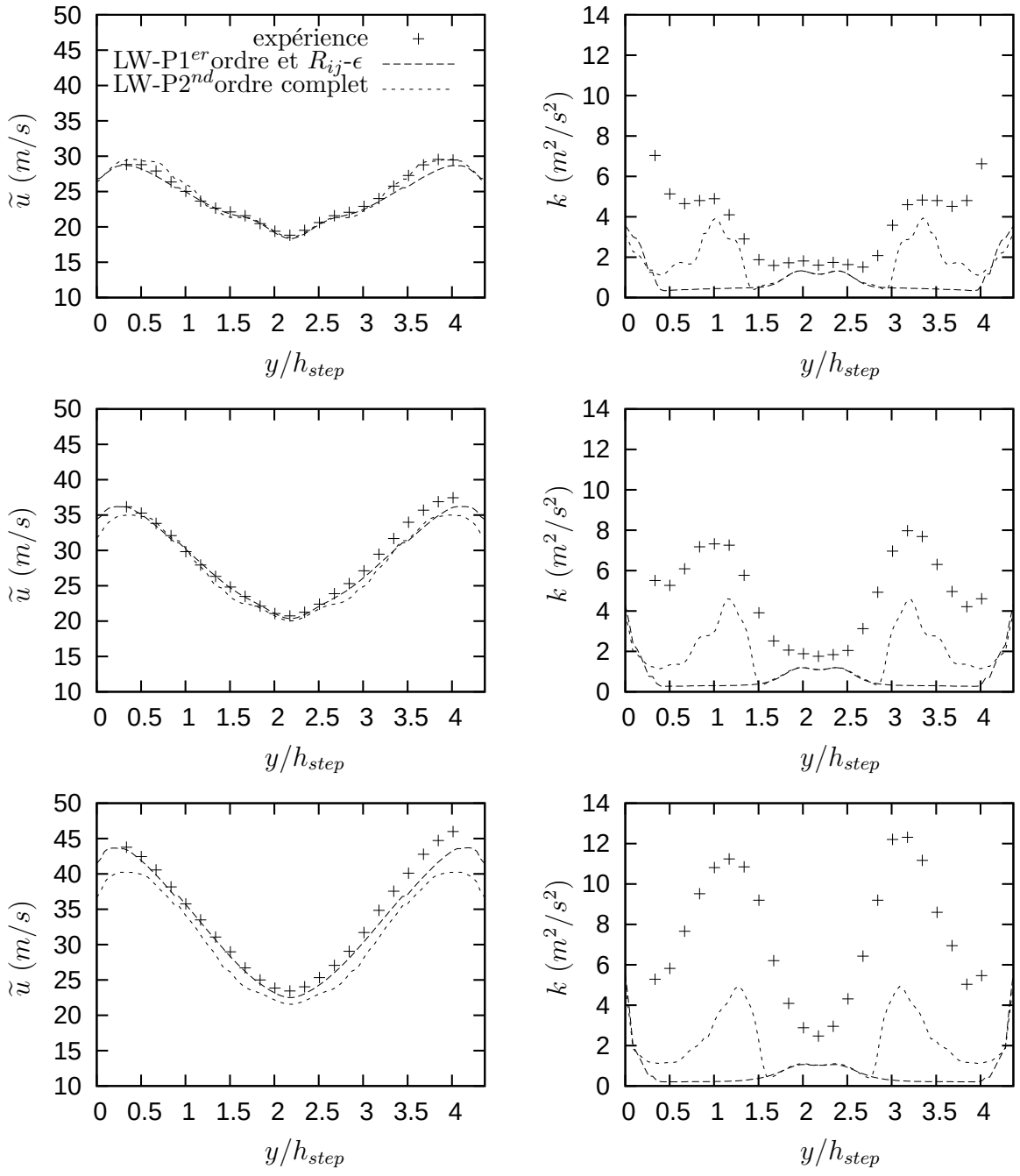


FIG. 10.4 – Vitesse moyenne $\widetilde{u}$ et énergie cinétique turbulente k pour $\Phi(1)$=$\Phi(2)$=$0,8$ à $x/h_{step} = 7,32$ (courbes du haut), à $x/h_{step} = 8,36$ (courbes du milieu) et à $x/h_{step} = 9,70$ (courbes du bas), obtenues en utilisant le modèle LW-P du premier ordre associé au modèle classique $R_{ij} - \epsilon$ LRR et le modèle LW-P du second ordre complet.

On observe sur cette figure que les niveaux d'énergie cinétique turbulente obtenus par les simulations sont du même ordre de grandeur que ceux fournis par les données expérimentales. Ces résultats établissent, d'un point de vue quantitatif, la capacité du modèle LW-P du second ordre complet à représenter le phénomène de génération de turbulence par la flamme.

10.2 Importance des Zones de Diffusion Gradient et Contre-Gradient

Les résultats de la simulation numérique obtenus avec le modèle du second ordre complet sont maintenant utilisés pour étudier l'évolution des flux turbulents scalaires à la traversée de la flamme turbulente. La figure 10.5 fournit les champs numériques des composantes longitudinales et transversales des flux turbulents $\widetilde{u''Y''}$ et $\widetilde{v''Y''}$ obtenus par la simulation de la combustion d'un mélange homogène à richesse 0,8. Ces flux turbulents scalaires sont comparés à ceux que l'on obtient en supposant des lois gradients soit $D_T \partial \widetilde{Y}/\partial x$ et $D_T \partial \widetilde{Y}/\partial y$.

La composante longitudinale des flux turbulents $\widetilde{u''Y''}$ est négative dans la plus grande partie de la flamme moyenne et du signe opposé à la loi gradient. La composante transversale des flux turbulents $\widetilde{v''Y''}$ est elle aussi opposée à la loi gradient dans la majeure partie de la flamme moyenne excepté pour de faibles valeurs de l'avancement de la réaction (du côté des gaz brûlés). Cette caractéristique est en accord avec les études expérimentales récentes telles que celles réalisées par Kalt et al. [37]. Il a été montré dans ces travaux que la valeur de la variable d'avancement de la réaction pour laquelle on constate un passage d'une zone de diffusion turbulente de type "gradient" à une zone de type "contre-gradient" varie en fonction du facteur d'expansion thermique τ et du rapport u'/S_L. Cette zone de type "gradient" peut être très fine devant le front de flamme mais est indispensable pour que la flamme puisse se propager dans l'écoulement. Compte tenu de la taille importante des cellules du maillage utilisé pour le calcul devant l'épaisseur de cette zone, elle a été artificiellement épaissie en considérant le terme $\overline{c''\partial p/\partial x_i}$ nul pour de faibles valeurs de l'avancement de la réaction ($\widetilde{c} < 0,2$).

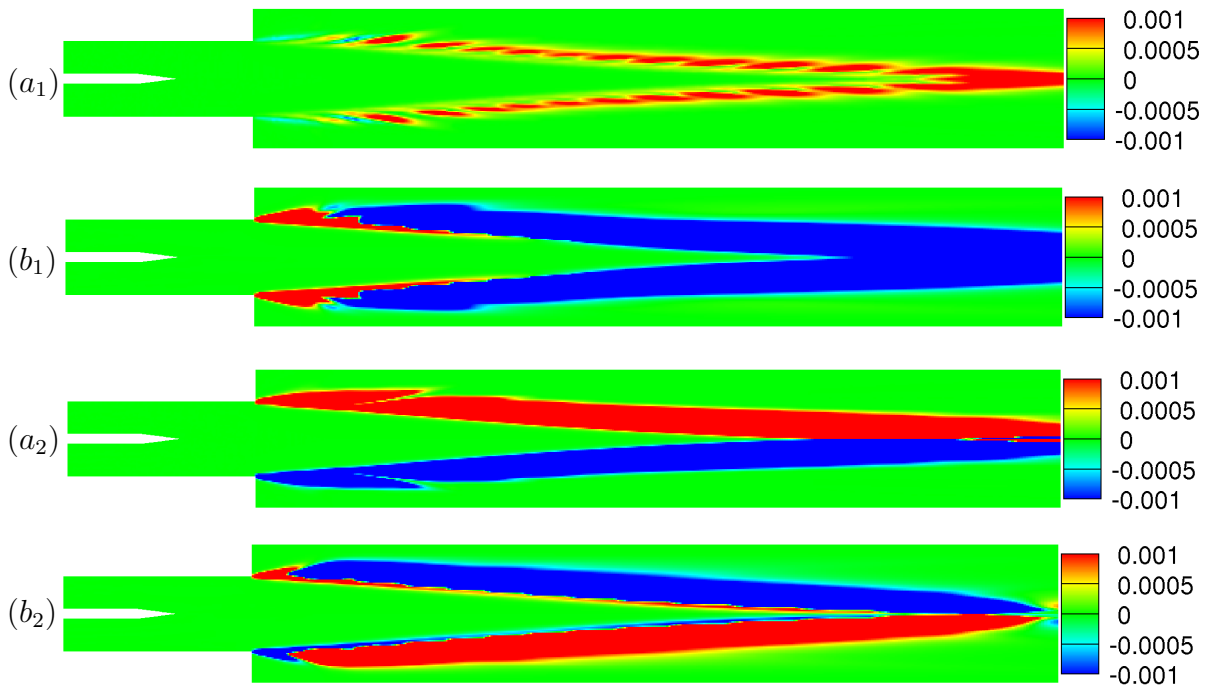


FIG. 10.5 – Composante longitudinale des flux turbulents $\widetilde{u''Y''}$ (2 figures du haut) et composante transversale des flux turbulents $\widetilde{v''Y''}$ (2 figures du bas), en $m.s^{-1}$ obtenues pour $\Phi(1)$=$\Phi(2)$=$0,8$ en utilisant le modèle LW-P du second ordre complet, (a_1) : $D_T\partial\widetilde{Y}/\partial x$, (b_1) : $\widetilde{u''Y''}$, (a_2) : $D_T\partial\widetilde{Y}/\partial y$, (b_2) : $\widetilde{v''Y''}$

Il est également important de noter qu'une zone de diffusion turbulente de type "gradient" est présente juste en aval de l'élargissement brusque, correspondant à la stabilisation de la flamme.

Le modèle LW-P du second ordre complet a également été testé en prémélange partiel lorsque la richesse du canal du haut ($\Phi(2)$) est de $0,9$ et que la richesse du canal du bas ($\Phi(1)$) est de $0,3$ dans le premier cas puis de $0,7$ dans le second cas. La figure 10.6 montre le terme source moyen obtenu dans ces deux cas et les visualisations directes des flammes correspondantes.

Concernant les flux turbulents scalaires obtenus par ces simulations du second ordre complet en prémélange partiel et présentés sur la figure 10.7, nous constatons que le transport turbulent est à contre-gradient dans la flamme turbulente stabilisée dans le

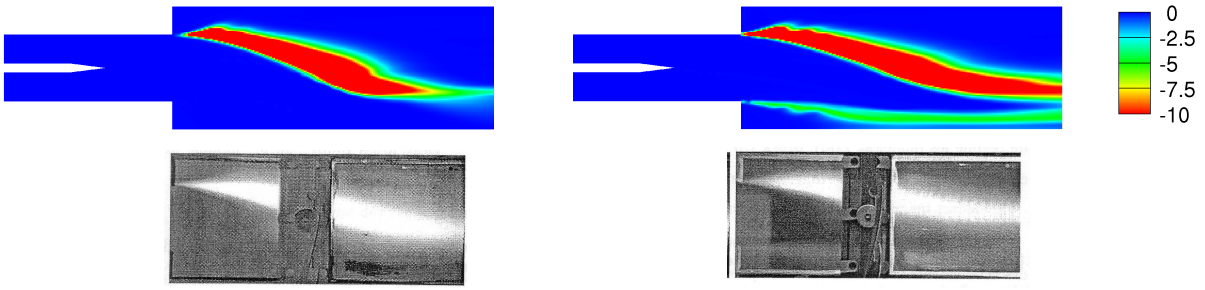


FIG. 10.6 – Terme source moyen obtenu pour $\Phi(1)$=0,9 et $\Phi(2)$=0,3 (gauche) et pour $\Phi(1)$=0,9 et $\Phi(2)$=0,7 (droite) en utilisant le modèle LW-P du second ordre complet.

mélange à richesse 0,9 ; une zone de type "gradient" est toujours présente pour les faibles valeurs de l'avancement de la réaction. En revanche, le transport turbulent est de type "gradient" pour la flamme stabilisée dans le mélange à richesse 0,7.

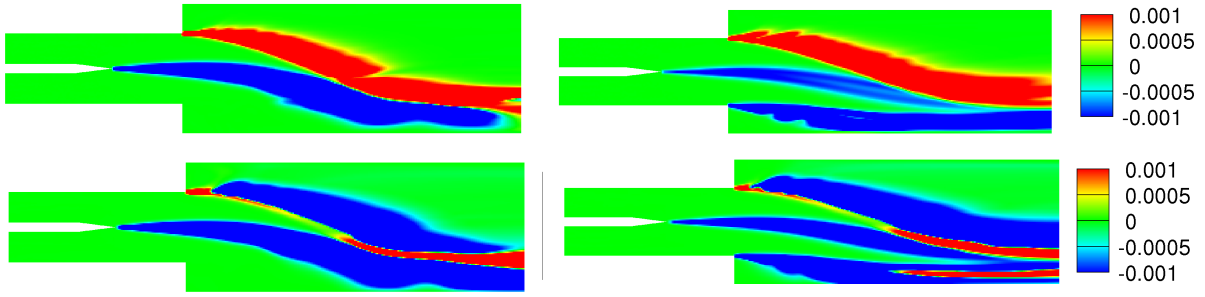


FIG. 10.7 – Composante transversale des flux turbulents : $D_T \partial \widetilde{Y}/\partial y$ (haut) et $\widetilde{v''Y''}$ (bas), en $m.s^{-1}$ obtenue pour $\Phi(1)$=0.9 et $\Phi(2)$=0.3 (gauche) et pour $\Phi(1)$=0.9 et $\Phi(2)$=0.7 (droite) en utilisant le modèle LW-P du second ordre complet.

On remarque également que le transport turbulent dans la couche de mélange en amont de la flamme est de type "gradient" ce qui confirme que le modèle LW-P du second ordre complet se comporte correctement en dehors des zones de combustion.

10.3 Conclusions

Les modèles du premier ordre et les modèles du second ordre non réactifs tels que $k-\epsilon$ et $R_{ij}-\epsilon$ LRR associés à des lois gradients pour exprimer la diffusion turbulente sca-

laire (masse et énergie) ne sont pas appropriés pour représenter certaines caractéristiques importantes des écoulements turbulents réactifs. Le modèle LW-P du second ordre complet a été développé pour pouvoir représenter les phénomènes de diffusion turbulente non-gradient et la production de turbulence par la flamme, en proposant des nouvelles fermetures pour les termes de fluctuations de pression apparaissant dans les équations de transport pour les flux turbulents de masse des scalaires et pour les tensions de Reynolds. Le modèle final a été utilisé pour simuler des écoulements réactifs parfaitement et partiellement prémélangés puis les résultats obtenus ont été comparés avec les données expérimentales dans ces deux conditions. Les simulations ont été effectuées dans une configuration où la combustion a lieu dans un milieu confiné et est stabilisée par un élargissement brusque symétrique (ORACLES).

Les résultats des simulations sont en bon accord qualitatif avec les observations expérimentales pour les écoulements parfaitement et partiellement prémélangés. Les résultats ont montré que les flux turbulents scalaires obtenus par la résolution des équations sont très différents de ceux obtenus par les lois gradients habituellement utilisées et sont même de signe opposé. De plus, une comparaison quantitative de l'augmentation des niveaux d'énergie cinétique turbulente dans ces écoulements réactifs a confirmé la capacité du modèle à représenter la production de turbulence par la flamme.

Conclusion et Perspectives

Le modèle de combustion turbulente LW-P utilisé dans les travaux présentés dans ce mémoire est basé sur une PDF composée de quatre distributions de Dirac réparties dans l'espace des compositions. Par sa simplicité intrinsèque, ce modèle nous a permis de conduire une analyse détaillée des mécanismes physiques induits par la combustion de prémélange partiel en écoulement turbulent. Nous avons développé et validé des méthodes de fermeture pour les équations de transports des deux quantités scalaires utilisées par le modèle LW-P, la fraction de mélange ξ et la fraction massique de combustible Y. De façon plus précise nous avons modélisé les équations pour la fraction de mélange moyenne $\widetilde{\xi}$, la variance correspondante $\widetilde{\xi''^2}$, la fraction massique de combustible moyenne $\widetilde{Y}$, la variance correspondante $\widetilde{Y''^2}$ et la covariance $\widetilde{\xi''Y''}$. Dans les équations de transport des seconds moments $\widetilde{Y''^2}$ et $\widetilde{\xi''Y''}$ apparaissent les termes de dissipation qui représentent le mélange aux petites échelles dans ces écoulements turbulents réactifs partiellement prémélangés. Nous avons montré l'importance de ces termes de dissipation dans la représentation de ces écoulements réactifs et développé des expressions de fermeture qui permettent de retrouver les limites correspondant aux régimes de flammelettes et au régime de flammes épaissies. Ces nouvelles expressions de fermeture, valables aussi bien en prémélange parfait qu'en prémélange partiel, sont ainsi applicables à tous les régimes de combustion, tout comme le modèle LW-P lui-même.

Le modèle LW-P du premier ordre a tout d'abord été validé par un calcul de la configuration ORACLES. Les résultats des simulations numériques de cet écoulement turbulent réactif stabilisé en aval de l'élargissement brusque symétrique d'un canal 2D sont en très bon accord avec les observations et les données expérimentales. Les résultats montrent en particulier que les asymétries de l'écoulement moyen dans la chambre de

combustion observées lors de la combustion d'un mélange issu de deux écoulements de richesses différentes, sont très bien prédites par les simulations numériques. Ces calculs ont aussi permis de retrouver les extinctions qui peuvent avoir lieu dans les zones de l'écoulement où le mélange est en dessous des limites d'extinction en mélange pauvre.
Par ailleurs, les comparaisons quantitatives des champs de vitesse calculés avec les champs de vitesse mesurés ont démontré l'importance des modèles de dissipation des scalaires réactifs utilisés dans les simulations. On peut conclure que les fermetures généralisées pour les dissipations scalaires proposées dans ce mémoire améliorent considérablement le calcul du champ de vitesse en aval de la zone de flamme.

Le modèle LW-P du premier ordre a également été validé en calculant une flamme en V turbulente, configuration où les fluctuations de richesse se produisent dans des régions plus importantes que celles observées dans la configuration ORACLES du LCD. Les résultats de la simulation numérique de cette flamme en V turbulente stratifiée stabilisée par un fil chaud sont en très bon accord avec les mesures expérimentales réalisées au CORIA. Ces comparaisons ont été effectuées sur les champs de vitesse et d'avancement de la réaction obtenus pour différentes conditions de turbulence et de stratification. Le modèle a permis de traiter avec succès aussi bien les conditions stratifiées pauvres que riches. La prise en compte des phénomènes liés aux fluctuations de richesse par une description réaliste des variations du temps chimique de l'écoulement a également permis d'analyser l'évolution de certaines quantités statistiques difficilement accessibles par la mesure.

Nous avons ensuite développé un modèle LW-P du second ordre, à partir d'une PDF jointe $\widetilde{P}(u_i, \xi, Y)$. Ce modèle utilise une forme générale comportant n distributions de Dirac, mais la valeur $n = 4$ a été retenue pour les applications. Une méthode est proposée pour que les paramètres de cette PDF ne dépendent que des premiers et seconds moments scalaires déjà introduits dans le modèle du premier ordre ainsi que des flux turbulents de masse de ces scalaires. Les flux turbulents sont alors résolus par des équations de transport supplémentaires.

Dans ces équations comme dans celles pour les tensions de Reynolds apparaissent des termes représentant les interactions pression-chimie, qui contribuent de façon importante à l'apparition des phénomènes de diffusion turbulente à contre-gradient et de la

production de turbulence par les flammes. Ces termes sont modélisés par des expressions faisant intervenir différentes contributions qui représentent respectivement les effets dus aux variations de masse volumique, les effets dus à la présence de zone réactive et les effets de redistribution d'énergie dans les différentes directions. Cette dernière contribution est modélisée par un mécanisme de retour à l'isotropie, similaire à celui utilisé dans les écoulements à masse volumique constante ($R_{ij} - \epsilon$ LRR) mais généralisé au cas des écoulements réactifs. Ces modèles ont été validés avec succès en prémélange parfait en utilisant une base de donnée obtenue par la simulation directe (DNS) 3-D d'une flamme plane prémélangée turbulente.

Ce modèle LW-P du second ordre a été appliqué au calcul de la combustion dans la configuration ORACLES. Les résultats des simulations sont en bon accord qualitatif avec les observations expérimentales pour les écoulements parfaitement et partiellement prémélangés. Une comparaison quantitative concernant l'accroissement des niveaux d'énergie cinétique turbulente a montré la capacité du modèle à représenter la production de turbulence par la flamme. De plus, les flux turbulents scalaires représentant les transports turbulents de masse et d'énergie obtenus par la résolution des équations sont très différents de ceux obtenus par les lois gradients habituellement utilisées, pouvant même être de signe opposé à celui prévu par ces lois gradients. Après d'autres études toutes faites en écoulement parfaitement prémélangé, ces résultats confirment que les modèles de transport turbulent adaptés aux écoulements non-réactifs tels que $k - \epsilon$ et $R_{ij} - \epsilon$ LRR (Launder Reece et Rodi [46]) associés à des lois gradients pour exprimer la diffusion turbulente scalaire ne sont pas appropriés pour représenter certaines caractéristiques importantes des écoulements turbulents réactifs. Des travaux supplémentaires sont encore nécessaires pour valider ce modèle du second ordre, utilisant d'autres configurations expérimentales que le banc d'essai ORACLES.

L'étude numérique de la flamme en V stratifiée turbulente a également révélé les limites de l'utilisation d'une réaction globale associée à la fraction massique de combustible comme variable d'avancement. En effet, les calculs de flamme laminaire de prémélange méthane-air effectués en utilisant les schémas cinétiques détaillés des librairies CHEMKIN ont montré tout d'abord que la réaction globale ne permet pas de représenter l'évolution

de la fraction massique de combustible lorsque le mélange est riche. De manière générale, la fraction massique de combustible n'est pas représentative de l'évolution des espèces chimiques dans la flamme même pour des mélanges pauvres car certaines réactions chimiques importantes ne se produisent qu'après la disparition complète du combustible. Ces réactions chimiques font notamment intervenir les espèces polluantes dont la prédiction est aussi un objectif majeur des recherches effectuées en matière de combustion. De plus, les simulations numériques de la flamme en V ont montré qu'il est nécessaire de prendre en compte l'équilibre chimique lorsque le mélange est proche de la stœchiométrie pour prédire l'expansion de l'écoulement avec suffisamment de précision. Il faut alors envisager l'utilisation d'un mécanisme cinétique plus détaillé et l'introduction d'une variable d'avancement plus représentative de l'évolution des espèces chimiques dans la flamme. Par exemple, l'utilisation d'une variable d'avancement qui est une fonction des fractions massiques de monoxyde et de dioxyde de carbone associée à une méthode de tabulation ou prenant en compte au moins deux réactions successives semble être une solution mieux adaptée à la description de l'évolution des réactions chimiques.

Le régime de combustion caractérisant les configurations utilisées pour valider les modèles développés au cours de cette thèse est toujours très proche du régime des flammelettes. Comme les modèles sont théoriquement applicables à tous les régimes de combustion, il serait intéressant de les valider dans des configurations où le régime de combustion est le régime des flammes plissées-épaissies voire même le régime des flammes épaissies. Il pourrait alors être envisagé d'améliorer la forme de la PDF en augmentant le nombre de distributions de Dirac réparties dans l'espace des compositions. Une augmentation du nombre de distributions de Dirac dans l'espace des richesses serait particulièrement utile pour représenter de façon plus réaliste le mélange du combustible et de l'oxydant dans les flammes turbulentes non prémélangées.

Enfin, les écoulements étudiés et notamment ceux du dispositif ORACLES présentent des caractéristiques instationnaires importantes qu'il est aujourd'hui envisageable de prédire par la simulation numérique. Ainsi, la méthode instationnaire de simulation numérique URANS disponible dans *Code-Saturne* pourrait être utilisée avec le modèle LW-P pour calculer ce genre d'écoulement. De plus, les modèles développés ici, notamment ceux

concernant les termes de dissipation scalaire, pourraient tout aussi bien être utilisés dans le cadre d'une méthode instationnaire de simulation numérique de type LES, également disponible dans *Code-Saturne*. De telles méthodes instationnaires de simulation numérique nécessitent des modélisations précises des échelles non résolues et les modèles actuellement disponibles reposent généralement sur des lois gradients qui ne prennent pas en compte les effets de production de turbulence par la flamme ou ceux de diffusion non-gradient susceptibles d'être rencontrés dans les écoulements réactifs.

Bibliographie

[1] F. Archambeau, N. Nehitoua, M. Sakiz (2004), "Code saturne : A finite volume code for turbulent flows", *Int. J. Finite Volumes*, vol 1 télécharger Code saturne : http ://rd.edf.com/72494i/Accueil-fr/Recherche-et-Developpement/Pour-la-communaute-scientifique/Telechargements/Code-Saturne.html

[2] P. Bailly (1996), "Contribution à l'étude de l'interaction turbulence-combustion dans les flammes turbulentes de prémélange à l'aide de modèles du second ordre", *Thèse de Doctorat*, Université de Poitiers

[3] P. Bailly, M. Champion, D. Garréton (1997), "Counter-gradient diffusion in a confined turbulent premixed flame" *Phys. Fluids*, 9 :766-775

[4] M. Barrère (1974), "Modèles de combustion", *Revue générale de thermique*, 148 :295-308

[5] J.B. Bell, M.S. Day, L.G. Shepherd, M.R. Johnson, R.K. Cheng, J.F. Grcar, V.E. Beckner, M.J. Lijewski (2005), "Numerical Simulation of a Laboratory-Scale Turbulent V-flame" *Proc. Nat. Academy of Sciences*, 102(29) :10006-10011

[6] M. Besson (2001), "Etude expérimentale d'une zone de combustion en écoulement turbulent stabilisé en aval d'un élargissement brusque symétrique", *Thèse de Doctorat*, Université de Poitiers

[7] M. Besson, P. Bruel, J.L. Champion, B. Deshaies (2000), "Experimental analysis of combusting flows developing over a plane-symmetric expansion", *J. Thermophys. Heat Transfer*, 14 :59-67.

[8] P. Bigot (2000), "Contribution à l'étude de la combustion des mélanges turbulents réactifs à richesse variable : application à la combustion stabisée par un élargissement brusque", *Thèse de Doctorat*, Université de Poitiers

[9] P. Bigot, M. Champion, D. Garreton-Bruguières (1999), "Modeling a turbulent reactive flow with variable equivalence ratio : Application to a flame stabilized by a two-dimensional sudden expansion", *Combust. Sci. and Technol.*, 158 :299-320

[10] R. Borghi, D. Dutoya (1978), "On the scales of the fluctuations in turbulent combustion", 17^{th} *Symp. (Int.) on Combust.*, 235-244, The Combustion Institute, Pittsburgh

[11] R. Borghi (1984), "Mise au point sur la structure des flammes turbulentes", *J. Chimie Phys.*, 81(6) :361-370

[12] R. Borghi (1985), "On the structure and morphology of turbulent premixed flames", *Recent Advances in Aerospace Sci.*, C. Casci, Ed., Plenum Publishing Corporation

[13] J. Boussinesq (1877), "Essai sur la théorie des eaux courantes", *Mémoire*, Académie des Siences, Paris, 23(1) :252-260

[14] C.T. Bowman, R.K. Hanson, W.C. Gardiner, V. Lissianski, M. Frenklach, M. Goldenberg, G.P. Smith, D.R. Crosley, D.M. Golden (1997), *Technical Report Gaz Research Inst.* , Chicago IL, Report No. GRI-97/0020

[15] D. Bradley (1992), 24^{th} *Symp. (Int.) on Combust.*, 235-244, The combustion Institute, Pittsburgh

[16] K.N.C Bray, P.A. Libby, G. Masuya, J.B. Moss (1981), "Turbulence production in premixed turbulent flames", *Combust. Sci. Technol*, 25 :127-140

[17] K.N.C Bray, P.A. Libby, J.B. Moss (1985), "Unified modeling approach for premixed turbulent combustion part I : Generl formulation", *Combust. Flame*, 61 :87-102

[18] K.N.C. Bray, R.S. Cant (1991), "Some applications of Kolmogorov's turbulence research in the field of combustion", *Proc. R. Soc.*, A434 :217-240

[19] K.N.C Bray (1995), "Turbulent Reactive Flows", 2^e *éd. (P.A. Libby et F.A. Williams, Eds) Academic Press*

[20] K.N.C Bray, P. Domingo, L. Vervisch (2005), "Role of the progress variable in models for partially premixed turbulent combustion", *Combust. Flame*, 141 :431-437

[21] K.N.C. Bray, M. Champion, P.A. Libby, N. Swaminathan (2006), "Finite rate chemistry and presumed PDF models for premixed turbulent combustion", *Combust. Flame*, 146 :665-673

[22] S.P. Burke, T.E. Schumann (1928), "Diffusion Flames", *Ind. And Eng. Chemistry*, 20 :998-1004

[23] M. Champion, P.A. Libby (2003), "The influence of a thermally active wall on premixed turbulent combustion", *Combust. Sci. and Technol.*, 175 :2015-2060

[24] B.J. Daly, F.H. Harlow (1970), "Transport equations in turbulence", *Phys. Fluids*, 13 :2634–2649

[25] G. Damköhler (1940), "Influence of turbulence on. flame velocity in gaseous mixtures" *ZH Electrochem.*, 46 :601

[26] O. Degardin (2006), "Effets des Hétérogénéités de Richesse sur la Structure Locale des Flammes Turbulentes", *Thèse de Doctorat*, Université de Rouen (INSA)

[27] O. Degardin, B. Renou, A. Boukhalfa (2006), "Simultaneous measurement of temperature and fuel mole fraction using acetone planar induced fluorescence and Rayleigh scattering in stratified flames" *Exp. Fluids*, 40 :452-463

[28] F. Dinkelacker (2003), "Experimental validation for flame regimes for highly turbulent premixed flames", *Proc. Europ. Comb. Meeting*

[29] L. Djenidi, R.A. Antonia (1997), "Modeling of the Reynolds stress transport equation", *AIAA J.*, 35(3) :450-455

[30] P. Domingo, K.N.C. Bray (2000), "Laminar flamelet expressions for pressure fluctuation terms in second moment models of premixed turbulent combustion", *Combust. Flame*, 121 :555-574

[31] C. Dopazo, E.E. O'Brien (1974), "A probabilistic approach to the auto-ignition of a reactive turbulent mixtures", *Acta Astronautica*, 1 :1239

[32] J.M. Duclos, D. Veynante, T. Poinsot (1993), "A comparison of flamelet models for premixed turbulent combustion", *Combust. Flame*, 95 :101-117

[33] E. Fernández-Tarrazo, A. L. Sánchez, A. Liñán, F.A. Williams (2006), "A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion", *Combust Flame*, 147 :32-38

[34] V.A. Frost (1975), *Fluid Mech. Sov. Res.*, 4(2) :124-133

[35] H. Ha Minh (1999), "La modélisation statistique de la turbulence : ses capacités et ses limitations", *C.R. Acad. Sci. Paris*, Série IIb, 327 :343-358.

[36] W.P. Jones, P. Musonge (1988), "Closure of the Reynolds stress and scalar flux equations", *Phys. Fluids*, 31(12) :3589-3604

[37] P.A.M. Kalt, Y.C. Chen, R.W.Bilger (2002), "Experimental investigation of turbulent scalar flux in premixed stagnation type flames", *Combust. Flame*, 129 :401-415

[38] R.J. Kee, F.M. Rupley, J.A. Miller, (1989), *SANDIA REPORT SAN89-8009 UC-401*

[39] A.R. Kerstein, W. Ashurst, F.A. Williams (1988), "Field equation for interface propagation in an unsteady homogeneous flow field", *Phys. Review*, A 37(7) :2728-2731

[40] A.Y. Klimenko, R.W. Bilger (1999), *Prog. in Energy and Combust. Sci*, 25 :595-687

[41] A.M. Klimov (1963), *Zhur. Prikl. Mekh. i Tekhn. Fiz.*, 3 :49-58

[42] A.N. Kolmogorov (1941), "Dissipation of energy in a locally isotropic turbulence", *Doklady Akad. Nauk SSSR*, 32, 141 (Traduction anglaise dans : *Am. Math. Soc. Translations* 1958, Series 2, Vol 8, p. 87, Providence R.I)

[43] H. Lahjaily (1998), "Introduction de la dilution dans la modélisation de la combustion turbulente pour les mélanges pauvres : application à une flamme stabilisée dans un écoulement à point d'arrêt", *Thèse de Doctorat*, Université de Poitiers

[44] H. Lahjaily, M. Champion, D. Karmed, P. Bruel (1998), "Introduction of dilution in the BML model : Application to a stagnating turbulent flame", *Combust. Sci. and Technol.*, 135 :153-173

[45] B.E. Launder, D.B. Spalding (1974), "The numerical computation of turbulent flows", *Comp. Meth. in Applied Mech. Eng.*, 3 :269-289

[46] B.E. Launder, G.J. Reece, W. Rodi (1975), "Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure" *J. Fluid Mech.*, 68 :537-566

[47] B.E. Launder (1975), "On the effects of a gravitational field on the turbulent transport of heat and momentum", *J. Fluid Mech.*, 67 :569-581

[48] B.E. Launder (1976), "Heat and mass transfert in turbulence", *Topics applied phys.*, 12 (P. Bradshaw Ed.), Springer Verlag

[49] B.E. Launder (1989), "Second-moment closure : present... and future ?", *Int. J. Num. Methods Fluids*, 9 :963-985

[50] P.A. libby, F.A. Williams (1980), "In Turbulent Reacting Flows", *Topics in Applied Physics*, 44 (Springer, Berlin)

[51] P.A. Libby, K.N.C Bray (1981), "Countergradient diffusion in premixed turbulent flames", *AIAA J.*, 19 :205-213

[52] P.A. Libby, F.A. Williams (2000), "Presumed PDF analysis of partially premixed turbulent combustion", *Combust. Sci. Technol.*, 161 :351-390

[53] T. Mantel, R. Borghi (1994), "A new model of premixed wrinkled flame propagation based on a scalar dissipation equation", *Combust. Flame*, 96 :443-457

[54] G. Masuya, P.A. Libby (1981), "Non gradient theory for oblique turbulent flame with premixed reactants", *AIAA J.*, 19 :1590-1599

[55] F.E. Marble, J.E. Broadwell (1977), *Technical report TRW-9-PV*

[56] C. Meneveau, T. Poinsot (1991), "Streching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion", *Combust. Flame*, 86 :311-332

[57] J.B. Moss, K.N.C. Bray (1977), "A unified statistical model of the premixed turbulent flames", *Acta Astronautica*, 4 :291-319

[58] C.M. Müller, H. Breitbach, N. Peters (1994), "Partially premixed turbulent flame propagation in jet flames", 25^{th} *Symp. (Int.) on Combust.*, 1099-1106, The Combustion Institute, Pittsburgh

[59] A. Mura, R. Borghi (2003), "Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion", *Combust. Flame*, 133 :193-196

[60] A. Mura, F. Galzin, R. Borghi (2003), "A unified PDF-Flamelet model for turbulent premixed combustion", *Combust. Sci. and Technol.*, 175 :1573-1609

[61] A. Mura, V. Robin, M. Champion (2007), "Modeling of scalar dissipation in partially premixed turbulent flames", *Combust. Flame*, 149 :217-224

[62] 'A. Mura, V. Robin, M. Champion, K. Tsuboi, T. Hasegawa (2007), "Small scale reactive scalar dynamics in turbulent premixed flame Part I : mean reactive scalar dissipation" 21^{st} *ICDERS*, Poitiers, France

[63] D. Naot, A. Shavit, M. Wolfshtein (1970), "Interactions between components of the turbulent velocity correlation tensor due to pressure fluctuations", *Israel J. Technol.*, 8 :259-269

[64] D. Naot, A. Shavit, M. Wolfshtein (1973), "Two point correlation model and the redistribution of Reynolds stress", *Phys. Fluids*, 16 :738

[65] P.D. Nguyen (2003), "Contribution expérimentale à l'étude des caractéristiques instationnaires des écoulements turbulents réactifs prémélangés stabilisés en aval d'un élargissement brusque symétrique", *Thèse de Doctorat*, Université de Poitiers

[66] P.D. Nguyen, P. Bruel (2003), "Turbulent reacting flow in a dump combustor : Experimental determination of the influence of the inlet equivalence ratio difference on the contribution of the coherent and stochastic mtions to the velocity field dynamics", 41^{st} *Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno

[67] S. Nishiki, T. Hasegawa, R. Borghi, R. Himeno (2002), "Modelling of flame-generated turbulence based on Direct Numerical Simulation databases", 29^{th} *Symp. (Int.) on Combust.*, 2017-2022, The Combustion Institute, Pittsburgh

[68] S. Nishiki, T. Hasegawa, R. Borghi, R. Himeno (2006), "Modelling of turbulent scalar flux in turbulent premixed flames based on DNS databases", *Combust. Theory Modelling*, 10(1) :39-55

[69] S. Paxion, R. Baron, A. Gordner, N. Neuss, P. Bastian, D. Thévenin, G. Wittum (2000), "Development of a parallel unstructured multigrid solver for laminar flame simulations with detailed chemistry and transport", *Notes on Num. Fluid Mech.*, 75 :181-198, E.H Hirschel (Ed.), in : Numerical Flow Simulation II

[70] N. Peters (1986), "Laminar flamelet concepts in turbulent combsution", 21^{st} *Symp. (Int.) on Combust.*, 1231-1250, The Combustion Institute, Pittsburgh

[71] Plion P (2004), "Modifications de la distribution de curl", *note interne*, EDF R&D Département MFTT, HI-81/03/21/P

[72] S.B. Pope, M.S. Anand (1984), "Flamelet and distributed combustion in premixed turbulent flames", *Proc Combust. Inst.*, 20 :403-410

[73] S.B. Pope (1985), "PDF methods for turbulent reactive flows", *Prog, Energy Combust. Sci.*, 11 :119-195

[74] B. Renou, E. Samson, A.M. Boukhalfa (2004), " An experimental study of freely propagating turbulent propane/air flames in stratified inhomogeneous mixtures", *Combust. Sci. Tech.*, 176 :1867-1890

[75] G. Ribert, M. Champion, P. Plion (2004), "Modelling turbulent reactive flows with variable equivalence ratio : application to the calculation of a reactive shear layer", *Combust. Sci. Technol.*, 176 :907-923

[76] G. Ribert, M. Champion, O. Gicquel, N. Darabiha, D. Veynante (2005), "Modeling nonadiabatic turbulent premixed reactive flows including tabulated chemistry", *Combust. Flame*, 141 :271-280

[77] C. Rutland, R.S. Cant (1994), "Turbulent transport in premixed flame", *In : P. Moin, W.C. Reynolds editors. Studying turbulence using numerical databases*, Stanford CTR 75-94

[78] V. Robin, A. Mura, M. Champion, P. Plion (2005), "Relevance of approximated PDF shape for turbulent combustion modeling with variable equivalence ratio", 20^{th} *ICDERS*, Montréal, Canada

[79] V. Robin, A. Mura, M. Champion, P. Plion (2006), "A multi Dirac presumed PDF model for turbulent reactive flows with variable equivalence ratio", *Combust. Sci. Technol.*, 118(10-11) 1843-1870.

[80] V. Robin, A. Mura, M. Champion, O. Degardin, B. Renou, M. Boukhalfa (2006), "Experimental and numerical investigation of a turbulent partially premixed V-shaped flame", 11^{th} *Int. Confer. on Num. Combust.*, Grenade, Espagne

[81] V. Robin, A. Mura, M. Champion, O. Degardin, B. Renou, M. Boukhalfa (2007), "Experimental and numerical analysis of stratified turbulent V-shaped flames", à paraître *Combust. Flame*, doi :10.1016/j.combustflame.2007.10.008

[82] V. Robin, A. Mura, M. Champion (2007), "A second-order model for turbulent reactive flows with variable equivalence ratio", 21^{th} *ICDERS*, Poitiers, France, soumis à *Combust Sci. Technol.*

[83] V. Robin, A. Mura, M. Champion, T. Hasegawa (2007), "A new analysis of the modeling of pressure fluctuations effects on premixed turbulent flames and its validation based on DNS data", 5^{th} *Mediterranean Combustion Symposium*, Monastir, Tunisia, soumis à *Combust Sci. Technol.*

[84] J. Rotta (1951), "Statistiche theorie nichthomogener turbulenz", *Zeitschrift für physik*, 129(1) :547-572, 131(2) :51 :77

[85] R. Schiestel (1998), "Les écoulements turbulents", *modélisation et simulation*, 2^e éd., Hermes

[86] I.G. Shepherd, J.B. Moss, K.N.C Bray (1982), "Turbulent transport in confined premixed flame", 19^{th} *Symp. (Int.) on Combust.*, 423-431, The Combustion Institute, Pittsburgh

[87] D.B. Spalding (1971), "Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames", 13^{th} *Symp. (Int.) on Combust.*, 649-657, The Combustion Institute, Pittsburgh

[88] N. Swaminathan, K.N.C. Bray (2005), "Effect of dilatation on scalar dissipation in turbulent premixed flames", *Combust. Flame*, 143(4) :549-565

[89] H. Tennekes, J.L. Lumley (1974), "A first course on turbulence", *MIT Press*, Cambridge MA, 3^e éd.

[90] A. Trouvé, D. Veynante, K.N.C. Bray, T. Mantel (1994), "The coupling between flame surface dynamics and species mass conservation in premixed turbulent combustion", *In : Center for Turbulence Research*, editor. Proceedings of the summer program, Stanford CTR 95-124

[91] D. Veynante, F. Lacas, S. Candel (1989), "A new flamelet combustion model combining premixed and non premixed turbulent flames", *AIAA J.*, paper 890487

[92] D. Veynante, A. trouvé, K.N.C. Bray, T. Mantel (1997), "Gradient and nountergradient scalar transport in turbulent premixed flames", *J. Fluid Mech.*, 332 :263-293

[93] D. Veynante, L. Vervisch (2002), "Turbulent combustion modeling", *Prog. Energy Combust. Sci.*, 28 :193-266

[94] F.A. Williams (1976), "Criteria for existence of wrinkled laminar flame structure of turbulent premixed flames", *Combust. Flame*, 26 :269-270

[95] V.L. Zimont (1979), "Theory of turbulent combustion of a homogeneous mixture at high Reynolds numbers", *Fiz Goreniya Vzryva*, 15(3) :23 :32

Annexes

Annexe A

La Limite du Régime de Flammelettes

Dans cette annexe, nous détaillons les développements analytiques qui ont conduit aux relations présentées dans le chapitre 6. Ces développements ont pour objectif de démontrer les différentes relations existant entre les dissipations scalaires, les valeurs moyennes de ces scalaires et le taux de réaction chimique dans la limite du régime de flammelettes. Ces démonstrations sont effectuées tout d'abord pour des mélanges parfaits puis pour des mélanges partiels caractérisés par la fraction massique de combustible Y et par la fraction de mélange ξ.

La forme de l'espace des compositions est rappelée sur la figure suivante :

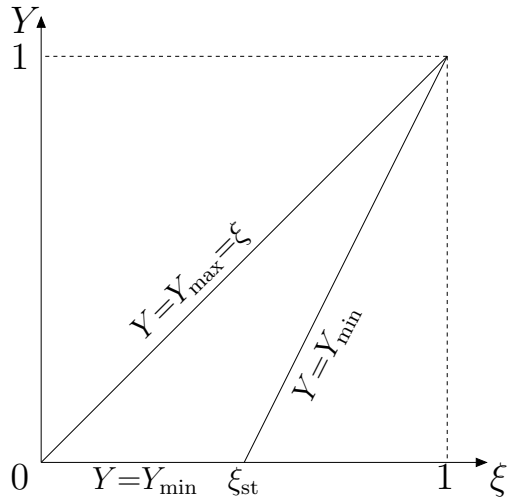


FIG. A.1 – Espace des compositions

La forme de l'espace des compositions nous permet d'exprimer les valeurs limites de la fraction massique de combustible $Y_{\max}$ et $Y_{\min}$ en fonction de la fraction de mélange :

$$Y_{\max}(\xi) = \xi \quad \text{et} \quad Y_{\min}(\xi) = A(\xi).(\xi - \xi_{st}) \tag{A.1}$$

Le coefficient directeur A est nul pour des mélanges pauvres ($\xi < \xi_{st}$) et égal à $1/(1-\xi_{st})$ pour des mélanges riches ($\xi > \xi_{st}$), on peut donc écrire en introduisant la fonction de Heaviside $H(\xi - \xi_{st})$ la relation suivante :

$$A(\xi) = \frac{1}{1-\xi_{st}} H(\xi - \xi_{st}) \tag{A.2}$$

Le régime des flammelettes est caractérisé par des zones réactives infiniment minces. Si cette caractéristique est valable quelle que soit la richesse du mélange, alors la PDF peut être considérée quasiment bimodale pour toutes les valeurs de la fraction de mélange. Cette PDF peut s'écrire :

$$\widetilde{P}(Y,\xi) = \lambda \widetilde{P}(Y = Y_{\max}, \xi)\delta(Y - Y_{\max}) + (1-\lambda)\widetilde{P}(Y = Y_{\min}, \xi)\delta(Y - Y_{\min}) + \mathcal{O}(1/Da) \tag{A.3}$$

Comme les zones réactives sont infiniment minces, les variations de la fraction de mélange ne se produisent jamais en même temps que celles de la fraction massique. Les PDF de ces variables sont alors indépendantes et les relations suivantes peuvent être écrites :

$$\widetilde{P}(Y = Y_{\max}, \xi) = \widetilde{P}(Y = Y_{\min}, \xi) = \widetilde{P}(\xi) \tag{A.4}$$

L'épaisseur négligeable des zones réactives de l'écoulement permet de considérer que le terme $(Y_{\max} - Y)(Y - Y_{\min})$ est toujours nul. Nous cherchons tout d'abord à écrire une équation de transport pour ce terme.

A.1 Equation de Transport pour $(Y_{\max} - Y)(Y - Y_{\min})$

L'équation de transport du scalaire passif ξ s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\xi) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k \xi) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k}\right) \tag{A.5}$$

L'équation de transport du scalaire réactif Y s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k Y) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_k}\right) + \omega \tag{A.6}$$

L'équation de transport de $Y_{\max}$ ($=\xi$) s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho Y_{\max}\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k Y_{\max}\right)=\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D\frac{\partial Y_{\max}}{\partial x_k}\right) \tag{A.7}$$

L'équation de transport de $Y_{\min}$ ($A(\text{A.5}-\xi_{st})$) s'écrit :

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho A(\xi-\xi_{st})\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k A(\xi-\xi_{st})\right)\\ -\;&\xi\left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho A\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k A\right)-\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D\frac{\partial A}{\partial x_k}\right)\right)\\ =\;&\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D\frac{\partial A(\xi-\xi_{st})}{\partial x_k}\right)-2\rho D\frac{\partial \xi}{\partial x_k}\frac{\partial A}{\partial x_k}\end{aligned} \tag{A.8}$$

Comme $\frac{\partial}{\partial x_k}(H\left(\xi-\xi_{st}\right))=\delta\left(\xi-\xi_{st}\right)\frac{\partial \xi}{\partial x_k}$ et $\frac{\partial}{\partial x_k}(\delta\left(\xi-\xi_{st}\right))=0$ alors :

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho Y_{\min}\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k Y_{\min}\right)\\ -\;&\frac{\xi\delta\left(\xi-\xi_{st}\right)}{1-\xi_{st}}\left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\xi\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k\xi\right)-\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D\frac{\partial \xi}{\partial x_k}\right)\right)\\ =\;&\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D\frac{\partial Y_{\min}}{\partial x_k}\right)-2\rho D\frac{\partial \xi}{\partial x_k}\frac{\partial \xi}{\partial x_k}\frac{\delta\left(\xi-\xi_{st}\right)}{1-\xi_{st}}\end{aligned} \tag{A.9}$$

Finalement, l'équation de transport de $Y_{\min}$ est :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho Y_{\min}\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k Y_{\min}\right)=\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D\frac{\partial Y_{\min}}{\partial x_k}\right)-\frac{1}{1-\xi_{st}}\left(2\rho D\frac{\partial \xi}{\partial x_k}\frac{\partial \xi}{\partial x_k}\right)\delta(\xi-\xi_{st}) \tag{A.10}$$

L'équation de $(Y_{\max}-Y)$ est (Eq(A.7)-Eq(A.6) + $D_Y=D_\xi$) :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho(Y_{\max}-Y)\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k(Y_{\max}-Y)\right)=\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D\frac{\partial(Y_{\max}-Y)}{\partial x_k}\right)-\omega \tag{A.11}$$

L'équation de $(Y-Y_{\min})$ est (Eq(A.6)-Eq(A.10) + $D_Y=D_\xi$) :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho(Y-Y_{\min})\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k(Y-Y_{\min})\right)\;=\;&\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D\frac{\partial(Y-Y_{\min})}{\partial x_k}\right)+\omega\\ +\;&2\rho D\frac{\partial \xi}{\partial x_k}\frac{\partial \xi}{\partial x_k}\frac{\delta\left(\xi-\xi_{st}\right)}{1-\xi_{st}}\end{aligned} \tag{A.12}$$

On écrit maintenant $(Y - Y_{\min})$*Eq(A.11) :

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}\left(\rho(Y_{\max}-Y)(Y-Y_{\min})\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k (Y_{\max}-Y)(Y-Y_{\min})\right) \\
- \;& (Y_{\max}-Y)\left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho(Y-Y_{\min})\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k (Y-Y_{\min})\right) - \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D \frac{\partial (Y-Y_{\min})}{\partial x_k}\right)\right) \\
= \;& \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D \frac{\partial (Y_{\max}-Y)(Y-Y_{\min})}{\partial x_k}\right) - (Y-Y_{\min})\omega \qquad \text{(A.13)} \\
- \;& 2\rho D \frac{\partial (Y_{\max}-Y)}{\partial x_k}\frac{\partial (Y-Y_{\min})}{\partial x_k}
\end{aligned}$$

L'équation pour $(Y_{\max} - Y)(Y - Y_{\min})$ s'écrit finalement :

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}\left(\rho(Y_{\max}-Y)(Y-Y_{\min})\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho u_k (Y_{\max}-Y)(Y-Y_{\min})\right) \\
= \;& \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D \frac{\partial (Y_{\max}-Y)(Y-Y_{\min})}{\partial x_k}\right) + (Y_{\max} - 2Y + Y_{\min})\omega \qquad \text{(A.14)} \\
- \;& 2\rho D \frac{\partial (Y_{\max}-Y)}{\partial x_k}\frac{\partial (Y-Y_{\min})}{\partial x_k} + 2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k}\frac{\partial \xi}{\partial x_k}\frac{(Y_{\max}-Y)}{1-\xi_{st}}\delta(\xi-\xi_{st})
\end{aligned}$$

En régime de flammelettes, le terme $(Y_{\max} - Y)(Y - Y_{\min})$ est toujours nul, on peut donc finalement écrire :

$$\begin{aligned}
2\rho D \frac{\partial (Y_{\max}-Y)}{\partial x_k}\frac{\partial (Y-Y_{\min})}{\partial x_k} &= (Y_{\max} - 2Y + Y_{\min})\omega \\
&+ \frac{(Y_{\max}-Y)}{1-\xi_{st}}\left(2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k}\frac{\partial \xi}{\partial x_k}\right)\delta(\xi-\xi_{st}) \qquad \text{(A.15)}
\end{aligned}$$

A.2 Prémélange Parfait à la Limite du Régime de Flammelettes

A.2.1 Expression de la Dissipation Scalaire

En prémélange parfait ξ est constant donc $Y_{\max}$ et $Y_{\min}$ le sont également, l'équation A.15 se simplifie et donne :

$$-2\rho D\frac{\partial Y}{\partial x_k}\frac{\partial Y}{\partial x_k} = (Y_{\max} - 2Y + Y_{\min})\omega \tag{A.16}$$

On moyenne cette relation pour obtenir l'expression de la dissipation scalaire à la limite du régime de flammelettes :

$$\boxed{-\overline{2\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}} = 2\overline{\rho}D\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} + (Y_{\max} - 2\widetilde{Y} + Y_{\min})\overline{\omega} - 2\overline{Y''\omega}} \tag{A.17}$$

A.2.2 Valeur de la Variance

L'expression de la PDF (A.3) permet de déterminer la valeur de la variance à la limite du régime de flammelettes. Cette relation permet d'exprimer :
- la fraction massique moyenne ;

$$\begin{aligned} \widetilde{Y} = \quad & \int Y\widetilde{P}(Y)dY = \lambda Y_{\max} + (1-\lambda)\,Y_{\min} \\ & \lambda = \frac{\widetilde{Y} - Y_{\min}}{Y_{\max} - Y_{\min}} \qquad (1-\lambda) = \frac{Y_{\max} - \widetilde{Y}}{Y_{\max} - Y_{\min}} \end{aligned} \tag{A.18}$$

- la variance de fraction massique ;

$$\begin{aligned} \widetilde{Y''^2} &= \int (Y - \widetilde{Y})^2\widetilde{P}(Y)dY = \lambda(Y_{\max} - \widetilde{Y})^2 + (1-\lambda)\,(Y_{\min} - \widetilde{Y})^2 \\ &= \lambda(1-\lambda)^2(Y_{\max} - Y_{\min})^2 + (1-\lambda)\,\lambda^2(Y_{\max} - Y_{\min})^2 \\ &= (Y_{\max} - \widetilde{Y})(\widetilde{Y} - Y_{\min}) \end{aligned} \tag{A.19}$$

A.2.3 Equation de Transport de la Variance

On introduit cette dernière expression dans l'équation pour la variance (1.33) :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}(Y_{\max}-\widetilde{Y})(\widetilde{Y}-Y_{\min})\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\widetilde{u}_k\overline{\rho}(Y_{\max}-\widetilde{Y})(\widetilde{Y}-Y_{\min})\right) \\ = & \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}D\frac{\partial}{\partial x_k}\left((Y_{\max}-\widetilde{Y})(\widetilde{Y}-Y_{\min})\right)-\overline{\rho u_k''Y''^2}\right) \\ & -2\overline{\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}}-2\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}+2\overline{Y''\omega} \end{aligned} \tag{A.20}$$

En introduisant les vitesses moyennes conditionnées en $Y_{\max}$ et $Y_{\min}$ et la PDF jointe de vitesse et scalaire, on peut démontrer la relation suivante :

$$\overline{\rho u_k''Y''^2}=(Y_{\max}-2\widetilde{Y}+Y_{\min})\overline{\rho u_k''Y''} \tag{A.21}$$

Cette relation est également valable lorsque l'on utilise une hypothèse gradient pour les flux turbulents :

$$\begin{aligned} \overline{\rho u_k''Y''^2} &= -\overline{\rho}D_T\frac{\partial\widetilde{Y''^2}}{\partial x_k}=-\overline{\rho}D_T\frac{\partial}{\partial x_k}\left((Y_{\max}-\widetilde{Y})(\widetilde{Y}-Y_{\min})\right) \\ &= -(Y_{\max}-2\widetilde{Y}+Y_{\min})\overline{\rho}D_T\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}=(Y_{\max}-2\widetilde{Y}+Y_{\min})\overline{\rho u_k''Y''} \end{aligned} \tag{A.22}$$

En tenant compte de la relation (A.21), on peut écrire l'équation (A.20) sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} & (Y_{\max}-2\widetilde{Y}+Y_{\min})\left(\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{Y}\right)-\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''Y''}\right)\right) \\ = & +2\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}-2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}-2\overline{\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}}-2\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}+2\overline{Y''\omega} \end{aligned} \tag{A.23}$$

Finalement, on retrouve l'équation A.17 :

$$\boxed{-2\overline{\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}}=2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}+(Y_{\max}-2\widetilde{Y}+Y_{\min})\overline{\omega}-2\overline{Y''\omega}}$$

A.3 Prémélange Partiel à la Limite du Régime de Flammelettes

A.3.1 Expression des Dissipations Scalaires

Les développements analytiques qui viennent d'être détaillés sont à nouveau conduits mais en considérant cette fois le cas des mélanges partiels. On repart de l'équation (A.15) dont le dernier terme du membre de droite est négligé :

$$2\rho D\frac{\partial(Y_{\max}-Y)}{\partial x_k}\frac{\partial(Y-Y_{\min})}{\partial x_k}=(Y_{\max}-2Y+Y_{\min})\omega \tag{A.24}$$

De plus, les fluctuations de A autour de la stœchiométrie sont également négligées, donc $A''=0$ et $\widetilde{A}=A$. Comme le coefficient directeur moyen $\widetilde{A}$ est considéré constant, on peut écrire les relations suivantes :

$$\widetilde{Y}_{\min}=\widetilde{A}(\widetilde{\xi}-\xi_{st})\quad\text{et}\quad Y''_{\min}=\widetilde{A}\xi'' \tag{A.25}$$

Ces hypothèses permettent de simplifier les relations en ne considérant pas les termes conditionnés à la stœchiométrie. Ces termes restent négligeables tant que l'on ne considère pas le cas des flammes de diffusion.

En moyenne l'équation (A.24) devient :

$$\begin{aligned}2\rho D\overline{\frac{\partial Y_{\max}}{\partial x_k}\frac{\partial Y}{\partial x_k}}+2\rho D\overline{\frac{\partial Y}{\partial x_k}\frac{\partial Y_{\min}}{\partial x_k}}-2\rho D\overline{\frac{\partial Y}{\partial x_k}\frac{\partial Y}{\partial x_k}}\;&-\;2\rho D\overline{\frac{\partial Y_{\max}}{\partial x_k}\frac{\partial Y_{\min}}{\partial x_k}}\\&=\;\overline{(Y_{\max}-2Y+Y_{\min})\omega}\end{aligned} \tag{A.26}$$

et remplaçant $Y_{\max}$ et $Y_{\min}$ par leur expression en fonction de ξ :

$$\begin{aligned}2\rho D\overline{\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}}\;&+\;\widetilde{A}2\rho D\overline{\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}}-2\rho D\overline{\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}}-\widetilde{A}2\rho D\overline{\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}}\\+2\rho D\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\;&+\;\widetilde{A}2\rho D\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-2\rho D\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}-\widetilde{A}2\rho D\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\\&=\;(\widetilde{Y}_{max}-2\widetilde{Y}+\widetilde{Y}_{min})\overline{\omega}+\overline{(Y''_{max}-2Y''+Y''_{min})\omega}\end{aligned} \tag{A.27}$$

soit :

$$\begin{aligned}(1+\widetilde{A})2\overline{\rho D\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}} &- 2\overline{\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}} - \widetilde{A}2\overline{\rho D\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}} \\ +(1+\widetilde{A})2\rho D\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k} &- 2\rho D\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k} - \widetilde{A}2\rho D\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k} \\ &= (\widetilde{Y}_{max} - 2\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_{min})\overline{\omega} - 2\overline{Y''\omega} + \overline{(1+\widetilde{A})\xi''\omega}\end{aligned} \tag{A.28}$$

L'équation (A.28) fournit une relation entre les trois dissipations scalaires moyennes en prémélange partiel pour le régime de flammelettes. Ces dissipations sont définies par la relation 1.47, rappelée ici :

$$\overline{\rho}\epsilon_\xi = -2\overline{\rho D\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}} \quad \overline{\rho}\epsilon_Y = -2\overline{\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}} \quad \overline{\rho}\epsilon_{\xi Y} = -2\overline{\rho D\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}}$$

L'équation A.28 permet de relier les termes chimiques des équations de transport aux dissipations scalaires moyennes. Cette relation est semblable à la relation bien connue A.17 mais étendue au cas des prémélanges partiels. Il faut noter que cette relation dégénère correctement vers l'équation A.17 lorsqu'il n'y a plus de fluctuations de fraction de mélange.

A.3.2 Valeurs de la Variance et de la Covariance

L'expression de la PDF (A.3) permet de déterminer la valeur de la variance de fraction massique de combustible et de la covariance à la limite du régime de flammelettes. Cette relation permet d'exprimer :

- la fraction massique moyenne ;

$$\begin{aligned}\widetilde{Y} = \quad & \int Y\widetilde{P}(Y,\xi)dY\,d\xi = \lambda\int Y_{\max}\widetilde{P}(\xi)d\xi + (1-\lambda)\int Y_{\min}\widetilde{P}(\xi)d\xi = \lambda\widetilde{Y}_{max} + (1-\lambda)\,\widetilde{Y}_{min} \\ & \lambda = \frac{\widetilde{Y}-\widetilde{Y}_{min}}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}} \qquad (1-\lambda) = \frac{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\end{aligned} \tag{A.29}$$

- la variance de fraction massique ;

$$\begin{aligned}
\widetilde{Y''^2} &= \int (Y-\widetilde{Y})^2 \widetilde{P}(Y,\xi) dY d\xi = \lambda \int (Y_{\max}-\widetilde{Y})^2 \widetilde{P}(\xi) d\xi + (1-\lambda) \int (Y_{\min}-\widetilde{Y})^2 \widetilde{P}(\xi) d\xi \\
&= \lambda \int ({Y_{\max}}'' + \widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y})^2 \widetilde{P}(\xi) d\xi + (1-\lambda) \int ({Y_{\min}}'' + \widetilde{Y}_{min} - \widetilde{Y})^2 \widetilde{P}(\xi) d\xi \\
&= \lambda \int {Y_{\max}}''^2 + (\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y})^2 + 2{Y_{\max}}''(\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}) \widetilde{P}(\xi) d\xi \\
&\quad + (1-\lambda) \int {Y_{\min}}''^2 + (\widetilde{Y}_{min} - \widetilde{Y})^2 + 2''(\widetilde{Y}_{min} - \widetilde{Y}) \widetilde{P}(\xi) d\xi \\
&= \lambda (\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y})^2 + \lambda \int {Y_{\max}}''^2 \widetilde{P}(\xi) d\xi + (1-\lambda) (\widetilde{Y}_{min} - \widetilde{Y})^2 + (1-\lambda) \int {Y_{\min}}''^2 \widetilde{P}(\xi) d\xi \\
&= (\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y})(\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{min}) + \lambda \widetilde{{Y_{\max}}''^2} + (1-\lambda) \widetilde{{Y_{\min}}''^2} \\
&= (\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y})(\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{min}) + \left(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A}^2\right) \widetilde{\xi''^2} \qquad \text{(A.30)}
\end{aligned}$$

- la covariance ;

$$\begin{aligned}
\widetilde{Y''\xi''} &= \int (Y-\widetilde{Y})(\xi-\widetilde{\xi}) \widetilde{P}(Y,\xi) dY d\xi \\
&= \lambda \int (Y_{\max}-\widetilde{Y})(\xi-\widetilde{\xi}) \widetilde{P}(\xi) d\xi + (1-\lambda) \int (Y_{\min}-\widetilde{Y})(\xi-\widetilde{\xi}) \widetilde{P}(\xi) d\xi \\
&= \lambda \widetilde{{Y_{\max}}''\xi''} + (1-\lambda) \widetilde{{Y_{\min}}''\xi''} \\
&= \left(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A}\right) \widetilde{\xi''^2} \qquad \text{(A.31)}
\end{aligned}$$

A.3.3 Equation de Transport de la Variance

On cherche ici à injecter l'expression (A.30) dans l'équation pour la variance (1.33). Pour cela la relation suivante est nécessaire :

$$\begin{aligned}
\overline{\rho u_k'' Y''^2} &= (\widetilde{Y}_{max} - 2\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_{min}) \overline{\rho u_k'' Y''} + (\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_{min}) \overline{\rho u_k'' {Y''}_{\max}} + (\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_{max}) \overline{\rho u_k'' {Y''}_{\min}} \\
&+ \left(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A}^2\right) \overline{\rho u_k'' \xi''^2} + \widetilde{\xi''^2}(1-\widetilde{A}^2) \overline{\rho u_k'' \lambda''} \qquad \text{(A.32)}
\end{aligned}$$

Cette relation pourait être démontrée en introduisant les vitesses moyennes conditionnées en $Y_{\max}$ et $Y_{\min}$ et la PDF jointe de vitesse et des scalaires mais nous la démontrons ici

en utilisant une loi gradient pour exprimer les flux turbulents :

$$\begin{aligned}
\overline{\rho u_k'' Y''^2} &= -\overline{\rho} D_T \frac{\partial \widetilde{Y''^2}}{\partial x_k} = -\overline{\rho} D_T \frac{\partial}{\partial x_k}\left((\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y})(\widetilde{Y}-\widetilde{Y}_{min}) + \left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}^2\right)\widetilde{\xi''^2}\right) \\
&= -\overline{\rho} D_T \left[(\widetilde{Y}_{max} - 2\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_{min})\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} + (\widetilde{Y}-\widetilde{Y}_{min})\frac{\partial \widetilde{Y}_{max}}{\partial x_k} + (\widetilde{Y}-\widetilde{Y}_{max})\frac{\partial \widetilde{Y}_{min}}{\partial x_k}\right] \\
&\quad -\overline{\rho} D_T \left[+\left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}^2\right)\frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k} + \widetilde{\xi''^2}(1-\widetilde{A}^2)\frac{\partial \lambda}{\partial x_k}\right] \\
&= (\widetilde{Y}_{max} - 2\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_{min})\overline{\rho u_k'' Y''} + (\widetilde{Y}+\widetilde{Y}_{min})\overline{\rho u_k'' Y''_{\max}} + (\widetilde{Y}+\widetilde{Y}_{max})\overline{\rho u_k'' Y''_{\min}} \\
&+ \left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}^2\right)\overline{\rho u_k'' \xi''^2} + \widetilde{\xi''^2}(1-\widetilde{A}^2)\overline{\rho u_k'' \lambda''} \qquad \text{(A.33)}
\end{aligned}$$

La valeur maximale de la variance est injectée dans l'équation (1.33).

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}(\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y})(\widetilde{Y}-\widetilde{Y}_{min}) + \left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}^2\right)\widetilde{\xi''^2}\right) \\
+ &\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k(\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y})(\widetilde{Y}-\widetilde{Y}_{min}) + \left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}^2\right)\widetilde{\xi''^2}\right) \\
= &\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho} D \frac{\partial}{\partial x_k}\left((\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y})(\widetilde{Y}-\widetilde{Y}_{min}) + \left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}^2\right)\widetilde{\xi''^2}\right) - \overline{\rho u_k'' Y''^2}\right) \\
- &\overline{2\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}} - 2\overline{\rho u_k'' Y''}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} + 2\overline{Y''\omega} \qquad \text{(A.34)}
\end{aligned}$$

On recombine les termes différemment.

$$\begin{aligned}
&(\widetilde{Y}_{max} - 2\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_{min})\left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\widetilde{Y}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{Y}\right) - \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' Y''}\right)\right) \\
+ &(\widetilde{Y}-\widetilde{Y}_{min})\left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\widetilde{Y}_{max}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{Y}_{max})\right) - \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}_{max}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' Y''_{\max}}\right)\right) \\
+ &(\widetilde{Y}-\widetilde{Y}_{max})\left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\widetilde{Y}_{min}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{Y}_{min})\right) - \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}_{min}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' Y''_{\min}}\right)\right) \\
+ &\left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}^2\right)\left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\widetilde{\xi''^2}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{\xi''^2}\right) - \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \xi''^2}\right)\right) \\
+ &\widetilde{\xi''^2}(1-\widetilde{A}^2)\left(\frac{\partial \lambda}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\lambda) - \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho} D \frac{\partial \lambda}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \lambda''}\right)\right) = *
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
* = \;& \overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} \frac{\partial (\widetilde{Y}_{max} - 2\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_{min})}{\partial x_k} + \overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}_{max}}{\partial x_k} \frac{\partial (\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{min})}{\partial x_k} \\
+ \;& \overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}_{min}}{\partial x_k} \frac{\partial (\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{max})}{\partial x_k} + 2(1 - \widetilde{A}^2) \overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k} \frac{\partial \lambda}{\partial x_k} \\
- \;& \overline{\rho u_k'' Y''} \frac{\partial (\widetilde{Y}_{max} - 2\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_{min})}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' Y''_{\max}} \frac{\partial (\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{min})}{\partial x_k} \\
- \;& \overline{\rho u_k'' Y''_{\min}} \frac{\partial (\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{max})}{\partial x_k} - (1 - \widetilde{A}^2) \overline{\rho u_k'' \xi''^2} \frac{\partial \lambda}{\partial x_k} - (1 - \widetilde{A}^2) \overline{\rho u_k'' \lambda''} \frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k} \\
- \;& 2\overline{\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k} \frac{\partial Y''}{\partial x_k}} - 2\overline{\rho u_k'' Y''} \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} + 2\overline{Y'' \omega}
\end{aligned} \tag{A.35}
$$

$$
\begin{aligned}
& (\widetilde{Y}_{max} - 2\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_{min}) \overline{\omega} \\
+ \;& \left(\lambda + (1 - \lambda)\, \widetilde{A}^2\right) \left(-2\overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} - 2\overline{\rho u_k'' \xi''} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \right) \\
+ \;& \widetilde{\xi''^2} (1 - \widetilde{A}^2) \left(\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho} \lambda) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho} \widetilde{u}_k \lambda) - \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho} D \frac{\partial \lambda}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \lambda''} \right) \right) \\
= \;& -2\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} + (1 + \widetilde{A}) 2\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \widetilde{A} 2\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \\
- \;& (1 + \widetilde{A}) \overline{\rho u_k'' Y''} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - (1 + \widetilde{A}) \overline{\rho u_k'' \xi''} \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} + 2\widetilde{A} \overline{\rho u_k'' \xi''} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \\
+ \;& 2(1 - \widetilde{A}^2) \overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k} \frac{\partial \lambda}{\partial x_k} - (1 - \widetilde{A}^2) \overline{\rho u_k'' \xi''^2} \frac{\partial \lambda}{\partial x_k} - (1 - \widetilde{A}^2) \overline{\rho u_k'' \lambda''} \frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k} \\
- \;& 2\overline{\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k} \frac{\partial Y''}{\partial x_k}} + 2\overline{Y'' \omega}
\end{aligned} \tag{A.36}
$$

Le gradient de λ s'exprime en fonction des valeurs moyennes :

$$
\lambda = \frac{\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{min}}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}} \qquad \text{et} \qquad \frac{\partial \lambda}{\partial x_k} = \frac{1}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}} \left(\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} - (\lambda + (1 - \lambda) \widetilde{A}) \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \right) \tag{A.37}
$$

La relation, exprimant les flux turbulents de λ en fonction des valeurs moyennes, pourrait être obtenue en introduisant les vitesses moyennes conditionnées en $Y_{\max}$ et $Y_{\min}$ et la PDF jointe de vitesse et des scalaires. Nous la vérifions ici en utilisant une loi gradient pour les flux turbulents :

$$
\begin{aligned}
\overline{\rho u_k'' \lambda''} &= -\overline{\rho} D_T \frac{\partial \widetilde{\lambda}}{\partial x_k} = -\frac{\overline{\rho} D_T}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}} \left(\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} - (\lambda + (1 - \lambda) \widetilde{A}) \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \right) \\
&= \frac{1}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}} \left(\overline{\rho u_k'' Y''} - (\lambda + (1 - \lambda) \widetilde{A}) \overline{\rho u_k'' \xi''} \right)
\end{aligned} \tag{A.38}
$$

On continue le développement de l'équation (A.36).

$$
\begin{aligned}
& (\widetilde{Y}_{max} - 2\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_{min})\overline{\omega} \\
+ \quad & \left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}^2\right)\left(-2\overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} - 2\overline{\rho u_k'' \xi''}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right) \\
+ \quad & \widetilde{\xi''^2}(1-\widetilde{A}^2)\left(\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\lambda) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\lambda) - \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho} D \frac{\partial \lambda}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \lambda''}\right)\right) \\
= \quad & -2\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} + (1+\widetilde{A})2\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \widetilde{A}2\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \\
- \quad & (1+\widetilde{A})\overline{\rho u_k'' Y''}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - (1+\widetilde{A})\overline{\rho u_k'' \xi''}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} + 2\widetilde{A}\overline{\rho u_k'' \xi''}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \\
+ \quad & 2\frac{(1-\widetilde{A}^2)}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}}\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} - 2\frac{(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A})(1-\widetilde{A}^2)}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}}\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \\
- \quad & \frac{(1-\widetilde{A}^2)}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}}\overline{\rho u_k'' \xi''^2}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} + \frac{(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A})(1-\widetilde{A}^2)}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}}\overline{\rho u_k'' \xi''^2}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \\
- \quad & \frac{(1-\widetilde{A}^2)}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}}\overline{\rho u_k'' Y''}\frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k} + \frac{(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A})(1-\widetilde{A}^2)}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}}\overline{\rho u_k'' \xi''}\frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k} \\
- \quad & 2\overline{\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}} + 2\overline{Y'' \omega}
\end{aligned}
\tag{A.39}
$$

On cherche maintenant à dériver une équation de transport pour λ :

$$
\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\lambda) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\lambda) - \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho} D \frac{\partial \lambda}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \lambda''}\right) \qquad (A.40) \\
= \quad & \frac{1}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}}\left[\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{Y}\right)\right] - \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{1}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}}\left(\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' Y''}\right)\right) \\
- \quad & \frac{(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}}\left[\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{\xi}\right)\right] + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}}\left(\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \xi''}\right)\right)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\lambda) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\lambda) \quad - \quad & \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho} D \frac{\partial \lambda}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \lambda''}\right) = \frac{\overline{\omega}}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}} \\
- \quad & \left(\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' Y''}\right)\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{1}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}}\right) \qquad (A.41) \\
+ \quad & \left(\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \xi''}\right)\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}}\right)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\lambda\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\lambda\right)-\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}D\frac{\partial\lambda}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\lambda''}\right) \qquad (A.42)\\
=\;&\frac{\overline{\omega}}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}+\frac{(1-\widetilde{A})}{\left(\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}\right)^2}\left(\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''Y''}\right)\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\\
-\;&\frac{(\lambda+(1-\lambda)\widetilde{A})(1-\widetilde{A})}{\left(\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}\right)^2}\left(\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\xi''}\right)\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}+\frac{(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\left(\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\xi''}\right)\frac{\partial\lambda}{\partial x_k}
\end{aligned}
$$

L'équation de transport pour λ s'écrit finalement :

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\lambda\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\lambda\right)-\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}D\frac{\partial\lambda}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\lambda''}\right) \qquad (A.43)\\
=\;&\frac{\overline{\omega}}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}+\frac{(1-\widetilde{A})}{\left(\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}\right)^2}\left[2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-(\lambda+(1-\lambda)\widetilde{A})2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right]\\
+\;&\frac{(1-\widetilde{A})}{\left(\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}\right)^2}\left[-\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}+(\lambda+(1-\lambda)\widetilde{A})2\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right]
\end{aligned}
$$

On introduit l'équation (A.43) dans l'équation (A.39).

$$
\begin{aligned}
&(\widetilde{Y}_{max}-2\widetilde{Y}+\widetilde{Y}_{min})\overline{\omega}+\left(\lambda+(1-\lambda)\,\widetilde{A}^2\right)\left(-2\overline{\rho D\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}}-2\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right)\\
+\;&\frac{(1-\widetilde{A}^2)}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\widetilde{\xi''^2}\overline{\omega}+\frac{(1-\widetilde{A}^2)(1-\widetilde{A})}{\left(\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}\right)^2}\widetilde{\xi''^2}\left(2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-(\lambda+(1-\lambda)\widetilde{A})2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right)\\
+\;&\frac{(1-\widetilde{A}^2)(1-\widetilde{A})}{\left(\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}\right)^2}\widetilde{\xi''^2}\left(-\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}+(\lambda+(1-\lambda)\widetilde{A})2\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right)\\
=\;&-2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}+(1+\widetilde{A})2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-\widetilde{A}2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\\
-\;&(1+\widetilde{A})\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-(1+\widetilde{A})\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}+2\widetilde{A}\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\\
+\;&2\frac{(1-\widetilde{A}^2)}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}-2\frac{(\lambda+(1-\lambda)\widetilde{A})(1-\widetilde{A}^2)}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\\
-\;&\frac{(1-\widetilde{A}^2)}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\overline{\rho u_k''\xi''^2}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}+\frac{(\lambda+(1-\lambda)\widetilde{A})(1-\widetilde{A}^2)}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\overline{\rho u_k''\xi''^2}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\\
-\;&\frac{(1-\widetilde{A}^2)}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}+\frac{(\lambda+(1-\lambda)\widetilde{A})(1-\widetilde{A}^2)}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\\
-\;&2\overline{\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}}+2\overline{Y''\omega} \qquad (A.44)
\end{aligned}
$$

Finalement, la dissipation intervenant dans l'équation de la variance de fraction massique de combustible s'exprime, en prémélange partiel et régime de flammelettes, de la façon suivante :

$$
\begin{aligned}
&- \quad 2\overline{\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial Y''}{\partial x_k}} - 2\overline{\rho}D\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} = (\widetilde{Y}_{max} - 2\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_{min})\overline{\omega} - 2\overline{Y''\omega} \\
&+ \quad \frac{(1+\widetilde{A})(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\widetilde{\xi''^2}\overline{\omega} + \left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}^2\right)\left(-2\overline{\rho D\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} - 2\overline{\rho}D\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right) \\
&- \quad \left(1 - \left(\frac{(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\right)^2\widetilde{\xi''^2}\right)(1+\widetilde{A})\left(2\overline{\rho}D\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k}\right) \\
&+ \quad \left(1 - \left(\frac{(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\right)^2\widetilde{\xi''^2}\right)(1+\widetilde{A})(\lambda+(1-\lambda)\widetilde{A})\left(2\overline{\rho}D\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - 2\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right) \\
&- \quad \frac{(1+\widetilde{A})(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\left(2\overline{\rho}D\frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k''\xi''^2}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\right) \\
&+ \quad \frac{(1+\widetilde{A})(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}(\lambda+(1-\lambda)\widetilde{A})\left(2\overline{\rho}D\frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k''\xi''^2}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\right)
\end{aligned}
\tag{A.45}
$$

A.3.4 Equation de Transport de la Covariance

On cherche ici à utilser l'expression (A.31) dans l'équation pour la covariance (1.34). Pour cela la relation suivante est nécessaire :

$$
\overline{\rho u_k''Y''\xi''} = \left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\overline{\rho u_k''\xi''^2} + \widetilde{\xi''^2}(1-\widetilde{A})\overline{\rho u_k''\lambda''} \tag{A.46}
$$

Cette relation pourait être démontrée en introduisant les vitesses moyennes conditionnées en $Y_{\max}$ et $Y_{\min}$ et la PDF jointe de vitesse et des scalaires mais nous la démontrons ici en utilisant une loi gradient pour exprimer les flux turbulents :

$$
\begin{aligned}
\overline{\rho u_k''Y''\xi''} &= -\overline{\rho}D_T\frac{\partial \widetilde{Y''\xi''}}{\partial x_k} = -\overline{\rho}D_T\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\widetilde{\xi''^2}\right) \\
&= -\overline{\rho}D_T\left[\left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k} + \widetilde{\xi''^2}(1-\widetilde{A})\frac{\partial \lambda}{\partial x_k}\right] \\
&= \left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\overline{\rho u_k''\xi''^2} + \widetilde{\xi''^2}(1-\widetilde{A})\overline{\rho u_k''\lambda''}
\end{aligned}
\tag{A.47}
$$

La valeur maximale de la covariance est injectée dans l'équation (1.34) :

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\left(\lambda+(1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\widetilde{\xi''^2}\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\left(\lambda+(1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\widetilde{\xi''^2}\right)\\
=\;&\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}D\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\left(\lambda+(1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\widetilde{\xi''^2}\right)-\overline{\rho u_k''Y''\xi''}\right)\\
-\;&2\overline{\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}}-\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}+\overline{\xi''\omega}
\end{aligned}\tag{A.48}$$

On recombine les termes différemment.

$$\begin{aligned}
&\left(\lambda+(1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\widetilde{\xi''^2}\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{\xi''^2}\right)\right)+\widetilde{\xi''^2}(1-\widetilde{A})\left(\frac{\partial\lambda}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\lambda\right)\right)\\
=\;&\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\left(\lambda+(1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\left(\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\xi''^2}\right)\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\widetilde{\xi''^2}(1-\widetilde{A})\left(\overline{\rho}D\frac{\partial\lambda}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\lambda''}\right)\right)\\
-\;&2\overline{\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}}-\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}+\overline{\xi''\omega}
\end{aligned}\tag{A.49}$$

$$\begin{aligned}
&\left(\lambda+(1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\widetilde{\xi''^2}\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{\xi''^2}\right)-\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\xi''^2}\right)\right)\\
+\;&\widetilde{\xi''^2}(1-\widetilde{A})\left(\frac{\partial\lambda}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\lambda\right)-\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}D\frac{\partial\lambda}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\lambda''}\right)\right)\\
=\;&(1-\widetilde{A})2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\frac{\partial\lambda}{\partial x_k}-(1-\widetilde{A})\overline{\rho u_k''\xi''^2}\frac{\partial\lambda}{\partial x_k}-(1-\widetilde{A})\overline{\rho u_k''\lambda''}\frac{\partial\widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\\
-\;&2\overline{\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}}-\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}+\overline{\xi''\omega}
\end{aligned}\tag{A.50}$$

$$\begin{aligned}
&\left(\lambda+(1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\left(-2\overline{\rho D\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}}-2\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right)+\frac{(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\widetilde{\xi''^2}\overline{\omega}\\
+\;&\left(\frac{(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\right)^2\widetilde{\xi''^2}\left(2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}\right)\\
-\;&\left(\frac{(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\right)^2\widetilde{\xi''^2}(\lambda+(1-\lambda)\widetilde{A})\left(2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-2\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right)\\
=\;&\frac{(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\left(2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\xi''^2}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\right)\\
-\;&\frac{(\lambda+(1-\lambda)\widetilde{A})(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\left(2\overline{\rho}D\frac{\partial\widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\xi''^2}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\right)\\
-\;&2\overline{\rho D\frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial\xi''}{\partial x_k}}-\overline{\rho u_k''\xi''}\frac{\partial\widetilde{Y}}{\partial x_k}-\overline{\rho u_k''Y''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}+\overline{\xi''\omega}
\end{aligned}\tag{A.51}$$

Finalement, la dissipation intervenant dans l'équation de la covariance s'exprime, en prémélange partiel et régime de flammelettes, de la façon suivante :

$$
\begin{aligned}
&- \quad 2\overline{\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k}\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} - 2\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} = -\overline{\xi'' \omega} + \frac{(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\widetilde{\xi''^2}\overline{\omega} \\
&+ \quad \left(\lambda + (1-\lambda)\,\widetilde{A}\right)\left(-2\overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} - 2\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right) \\
&- \quad \left(1 - \left(\frac{(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\right)^2 \widetilde{\xi''^2}\right)\left(2\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' Y''}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \xi''}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k}\right) \\
&+ \quad \left(1 - \left(\frac{(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\right)^2 \widetilde{\xi''^2}\right)(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A})\left(2\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - 2\overline{\rho u_k'' \xi''}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right) \\
&- \quad \frac{(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}\left(2\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \xi''^2}\frac{\partial \widetilde{Y}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' Y''}\frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\right) \\
&+ \quad \frac{(1-\widetilde{A})}{\widetilde{Y}_{max}-\widetilde{Y}_{min}}(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A})\left(2\overline{\rho} D \frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \xi''^2}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' \xi''}\frac{\partial \widetilde{\xi''^2}}{\partial x_k}\right)
\end{aligned}
\tag{A.52}
$$

Annexe B

Le Modèle LW-P dans *Code-Saturne*

Code-Saturne est un logiciel généraliste de mécanique des fluides numériques disponible sous licence GPL et téléchargeable gratuitement sur internet.
Les premières versions du modèle LW-P ont été implantées dans *Code-Saturne* par Guillaume Ribert puis par Olivier Balima au cours de leur stage de DEA faits au LCD. Le modèle LW-P développé au cours de cette thèse, a également été implanté dans ce logiciel. La dernière version de LW-P intégrée à *Code-Saturne* fournit un modèle de combustion turbulente complet, utilisable au premier ordre ou au second ordre avec les modèles de turbulence $k-\epsilon$ ou $R_{ij}-\epsilon$.
La version la plus récente du modèle LW-P que nous avons utilisée dans les simulations présentées dans ce mémoire, sera intégrée aux futures versions de *Code-Saturne* disponible sur internet.

L'implantation du modèle LW-P dans le code de calcul a soulevé de nombreux problèmes, parfois liés à la précision des schémas numériques et parfois liés au modèle lui même.

B.1 Caractéristiques Principales de *Code-Saturne*

Code-Saturne est un logiciel de résolution des équations de Navier-Stokes pour les écoulements de fluide incompressible (à faible nombre de Mach) basé sur une approche de discrétisation de type volume fini. Il permet l'utilisation d'une large gamme de maillages, structurés ou non, avec n'importe quel type de maille (tétraèdre, hexaèdre, prisme, pyra-

mide, polyèdre ...).

Le logiciel est capable de traiter des écoulements complexes à deux ou trois dimensions, stationnaires ou instationnaires, qu'ils soient laminaires ou turbulents. De nombreux modèles de turbulence sont disponibles : longueur de mélange, deux équations ($k-\epsilon$, ...), v2f, tensions de Reynolds ($R_{ij}-\epsilon$, ...) et LES. Le transport de scalaires et de leurs fluctuations peuvent être également pris en compte. Des modules adaptés à des phénomènes physiques particuliers tels que le rayonnement, la combustion, les arcs électriques, sont disponibles. *Code-Saturne* peut aussi être couplé à d'autres logiciels comme le code de thermique Syrthes ou le Code-Aster pour la mécanique des structures.

La discrétisation temporelle est basée sur un schéma predicteur-correcteur pour de faible nombre de Mach faible : une étape de prédiction de vitesse suivie d'une étape de correction (projection) pour les équations de Navier-Stokes. Les équations du modèle de turbulence et des scalaires sont ensuite résolues séparément. Toutes les variables sont résolues sur un maillage non-décalé et au centre des cellules.

Code-Saturne est parallélisé et peut être exécuté sur des architectures à mémoire distribuée. La technique employée pour la parallélisation consiste à diviser le domaine global en sous-domaines, chaque CPU exécute le code sur un sous-domaine.

Plus de détails concernant les possibilités, les différents modules et les méthodes numériques, sont disponibles dans la documentation de *Code-Saturne*, téléchargeable sur internet [1].

B.2 Implantation du Modèle LW-P

Les quantités scalaires moyennes transportées utiles au modèle LW-P sont la fraction massique de combustible moyenne, la fraction de mélange moyenne et les variances. Ces quantités ne sont pas indépendantes. En particulier dans les gaz frais les relations d'égalités suivantes doivent être vérifiées :

$$\widetilde{Y} = \widetilde{\xi} \qquad \widetilde{Y''^2} = \widetilde{\xi''^2} = \widetilde{Y''\xi''} \tag{B.1}$$

Il en est de même pour les flux turbulents scalaires transportés lors de l'utilisation du modèle LW-P du second ordre. Dans les gaz frais ces flux sont égaux :

$$\widetilde{u_i'' Y''} = \widetilde{u_i'' \xi''} \tag{B.2}$$

Lors de la résolution des équations de transport pour ces quantités, les erreurs d'arrondi numérique peuvent créer des écarts très petits ($\sim 10^{-10}$) entre les variables qui devraient être égales. Si les petites différences crées par ces erreurs numériques ne sont pas maîtrisées, elles peuvent s'amplifier et conduire à un résultat aberrant comme par exemple le déclenchement de la réaction chimique dans les gaz frais sans allumage au préalable.
Pour maîtriser ces erreurs et leurs conséquences, on vérifie que les valeurs des quantités calculées ont un sens physique, c'est-à-dire que le point moyen et la PDF respectent les limites de l'espace des compositions et que les variances ne dépassent pas leurs valeurs limites possibles. Ces vérifications doivent être effectuées avant le calcul de la forme de la PDF afin d'éviter que les erreurs éventuelles se propagent lors du calcul du terme source chimique.

Compte tenu des variables utilisées par le modèle, les conséquences de ces erreurs d'arrondi sont particulièrement néfastes dans les gaz frais et d'autant plus importantes lors de l'utilisation du modèle du second ordre. En effet, les erreurs commises sur les flux turbulents se propagent très rapidement car ces flux modifient directement les termes de diffusion des moyennes et des variances des scalaires. Pour éviter ces erreurs numériques dans les gaz frais, les flux de diffusion turbulente de la fraction massique de combustible moyenne et de la fraction de mélange moyenne sont considérés parfaitement égaux pour de très faibles valeurs de l'avancement de la réaction : $\widetilde{c} < 0.002$.

Une autre difficulté rencontrée lors de l'utilisation de ce modèle de combustion turbulente est liée à la résolution de la variance de fraction massique de combustible. En effet, dans les configurations que nous avons simulé, le régime de combustion turbulente était proche du cas limite du régime des flammelettes. Dans ce cas limite, la variance de fraction massique de combustible tend vers sa valeur maximum. Or comme nous utilisons une méthode basée sur une PDF présumée dont la forme est fonction de cette variance, le terme source chimique devient nul si cette valeur limite est atteinte. Dans ce cas, il n'y

a que des gaz frais et des gaz brûlés mais pas de gaz en train de brûler. La résolution de l'équation de transport pour la variance doit donc conduire à une valeur qui tend vers cette limite mais sans l'atteindre. La variance de fraction massique de combustible est d'autant plus proche de sa valeur limite que les mailles de calcul sont grossières. En effet, plus les dimensions des mailles de calcul sont importantes plus l'épaisseur des flammes locales sont petites devant la taille de la maille et plus la variance de fraction massique dans la maille tend vers sa valeur maximum. Pour éviter que le terme source chimique soit nul lorsque les mailles sont trop grossières, le critère suivant est imposé :

$$S_Y < 0.99 \tag{B.3}$$

où S_Y est la ségrégation définie par la relation 6.20 rappelée ici :

$$S_Y = \frac{\widetilde{Y''^2} - \left((\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{min})/(\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}) + (\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y})/(\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y}_{min}) \widetilde{A}^2 \right) \widetilde{\xi''^2}}{(\widetilde{Y}_{max} - \widetilde{Y})(\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{min})} \tag{B.4}$$

Pour les simulations numériques avec le modèle LW-P du second ordre, ce critère est : $S_Y < 0.95$.

Annexe C

Publications Associées

C.1 A Multi Dirac Presumed PDF Model for Turbulent Reactive Flows with Variable Equivalence Ratio

C.2 Modeling of Scalar Dissipation in Partially Premixed Turbulent Flames