



HAL
open science

Modélisation des phénomènes couples combustion-formation des suies-transferts radiatifs dans les chambres de combustion de turbine à gaz

Luc-Henry Dorey

► **To cite this version:**

Luc-Henry Dorey. Modélisation des phénomènes couples combustion-formation des suies-transferts radiatifs dans les chambres de combustion de turbine à gaz. Autre. Ecole Centrale Paris, 2012. Français. NNT : 2012ECAP0024 . tel-00731144

HAL Id: tel-00731144

<https://theses.hal.science/tel-00731144>

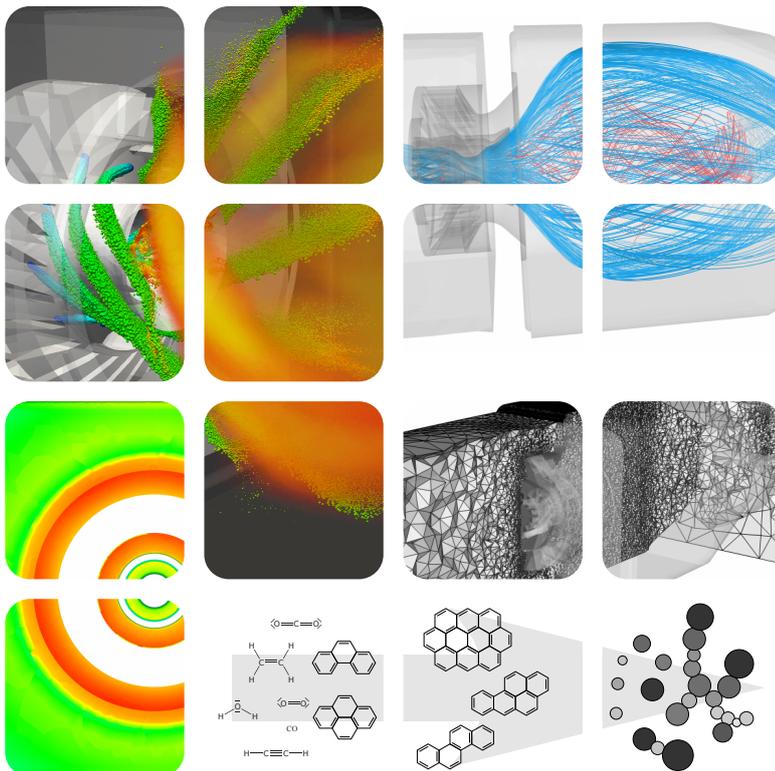
Submitted on 12 Sep 2012

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.

Luc-Henry
DOREY

Modélisation des phénomènes couplés combustion –
formation des suies – transferts radiatifs dans
les chambres de combustion de turbine à gaz



Soutenue le 1^{er} juin 2012

Jury

Mme B. Cuénot
MM. N. Bertier
P. Boulet
F. Dupoirieux
V. Giovangigli
M. Gorokhovski
J.-C. Larroya-Huguet
L. Tessé
D. Veynante

THÈSE

présentée par

Luc-Henry Dorey

pour l'obtention du

GRADE de DOCTEUR

Formation doctorale : Énergétique

**Laboratoire d'accueil : Département d'Énergétique Fondamentale et Appliquée,
ONERA**

Modélisation des phénomènes couplés combustion – formation des suies – transferts radiatifs dans les chambres de combustion de turbine à gaz

Soutenue le 1 juin 2012

Composition du jury :	Mme	Cuénot	B.	Rapporteur
	MM.	Bertier	N.	Encadrant
		Boulet	P.	Rapporteur
		Dupoirieux	F.	Directeur
		Giovangigli	V.	Président
		Gorokhovski	M.	Examinateur
		Larroya-Huguet	J.-C.	Examinateur
		Tessé	L.	Encadrant
	Veynante	D.	Examinateur	

Ecole Centrale des Arts et Manufactures
Grand Etablissement sous tutelle
du Ministère de l'Éducation Nationale
Grande Voie des Vignes
92295 CHATENAY MALABRY Cedex
Tél. : 33 (1) 41 13 10 00 (standard)
Télex : 634 991 F EC PARIS
site web: www.ecp.fr

**Département d'Énergétique
Fondamentale et Appliquée
Onera - The French Aerospace Lab**
F-92322 Châtillon
Tél. : 33 (1) 46 73 40 40
Télécopie : 33 (1) 46 73 41 41
Site web : www.onera.fr

2012 - ECAP0024

ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB

Remerciements

Nombre de personnes ont contribué à ce travail de thèse, de manière directe ou indirecte. Ces remerciements leur sont destinés.

Je remercie tout d'abord Monsieur Habiballah, directeur du Département d'Énergétique Fondamentale et Appliquée (DEFA), pour son accueil au sein du DEFA. J'ai eu grand plaisir à prendre part aux activités de l'ONERA et à contribuer au développement de son savoir-faire.

Je remercie également Madame Bénédicte Cuénot et Monsieur Pascal Boulet pour la relecture attentive de ce mémoire, Monsieur Vincent Giovangigli pour avoir été président du jury de soutenance et Messieurs Mikhael Gorokhovski, Juan-Carlos Larroya-Huguet et Denis Veynante pour avoir examiné ce travail de thèse lors de la soutenance.

Je tiens ensuite à remercier très chaleureusement les personnes qui ont apporté énormément à ce travail : mon directeur de thèse Francis Dupoirieux et mes encadrants Nicolas Bertier et Lionel Tessé. Travailler à votre contact a été très enrichissant. Merci Francis pour tes orientations et tes remarques ô combien pertinentes. Un grand merci à Lionel et à Nicolas pour votre suivi dévoué et votre grande disponibilité. Nos échanges m'ont permis de résoudre plus rapidement les problèmes, d'adopter les bonnes méthodes et de faire les bons choix. Merci également pour vos encouragements et votre optimisme lorsque j'en ai eu besoin. J'ai toujours plaisir à échanger avec vous, que ce soit sur un sujet professionnel ou personnel, et vos conseils me sont précieux. C'est donc avec grand plaisir que je continue à travailler à vos côtés au DEFA.

Je remercie les personnes qui m'ont fait confiance pour m'embaucher au DEFA, la thèse n'étant pas complètement terminée, en particulier Messieurs Habiballah, Ordonneau et Scherrer. J'ai tenté de traverser cette période de double-emploi du mieux possible, et je suis très heureux de pouvoir apporter à l'ONERA le savoir-faire acquis lors de ces années de thèse pour réaliser de nouvelles études tout aussi intéressantes.

Je remercie également l'équipe du DSN A qui contribue au développement, à la validation et au support du code CEDRE utilisé pour réaliser ces travaux de thèse.

Merci aux personnes côtoyées quotidiennement à l'ONERA : Angelo, Manu, Gérard, François, Pascale, Jean-Michel, Philippe G., Lionel M., Dominique, Philippe N., Julien T., Daniel, Bruno, Julien S., et aux doctorants Florian, Jean-Baptiste, Clément, Aymeric et Yann à qui je souhaite du courage pour terminer. C'est chaque jour un réel plaisir de se voir et d'échanger. Merci pour vos encouragements (vélo, weekends, blagues...) et votre bonne humeur. Je regrette simplement la piètre qualité de mes (trop) nombreux traits d'humour qui ne sont dignes que d'un *ingénieur ingénu*. Même si vous avez dû les supporter, je sais que vous ne m'en tenez pas rigueur. Merci en particulier à Florian dont j'ai eu le bonheur de partager le bureau.

Merci enfin à mes amis les plus proches pour les week-ends et soirées passés ensemble : Manu, Antoine, JB et Hélène, Edouard, Fabien, Pierre et Camille. Et je remercie pour finir ma famille qui m'a donné les moyens ainsi qu'une pleine liberté pour entreprendre ces études. Je vous dois beaucoup. Merci.

Résumé

Pour concevoir des foyers aéronautiques plus fiables et moins polluants, les industriels ont de plus en plus recours à des simulations numériques s'appuyant sur de nombreux modèles physiques. Si l'on s'intéresse en particulier aux problématiques des charges thermiques pariétales et des émissions polluantes, la modélisation des phénomènes couplés de combustion, de formation des suies et de transfert radiatif est nécessaire. Ainsi, cette thèse a pour objectif de développer une méthodologie permettant de simuler ces phénomènes couplés de manière instationnaire, dans un foyer représentatif des systèmes industriels. Un modèle de formation des suies simple et robuste, à caractère empirique, a d'abord été mis au point sur une configuration de flamme 1D laminaire prémélangée. Ce modèle a été choisi car, étant compatible avec des mécanismes réactionnels globaux, il est bien adapté aux simulations instationnaires en géométrie complexe. Dans un deuxième temps, il a été appliqué à la simulation instationnaire de l'écoulement turbulent réactif diphasique dans un foyer doté d'un prototype d'injecteur industriel. Les niveaux de température obtenus ainsi que la topologie du champ de fraction volumique de suies ont été comparés aux résultats expérimentaux. Les écarts constatés ont été analysés et des corrections ont été proposées. Enfin, une stratégie de couplage entre l'approche LES (*Large Eddy Simulation*) et un outil de simulation des transferts radiatifs basé sur la méthode de Monte Carlo a été mise au point et éprouvée sur le foyer étudié. L'écoulement apparaît peu affecté par le rayonnement, mais en revanche, les transferts radiatifs ont un impact relativement important sur les flux reçus par les parois.

Abstract

Numerical simulations, involving numerous physical models, are more and more employed to design more reliable and less pollutant industrial combustors. In particular, focusing on wall thermal load and pollutant emission issues, coupled phenomena such as combustion, soot formation and radiative transfer have to be modelled. Thus, the aim of this PhD thesis is to develop a methodology to simulate these coupled phenomena in an unsteady way, in an industrial-like combustion chamber. A simple and robust empirical soot formation model has been developed and applied in a first step to a 1D laminar premixed flame configuration. This model was chosen because it is well adapted to unsteady simulations in complex geometries, as it is compatible with global reaction mechanisms. In a second step it was applied to the unsteady simulation of the two-phase turbulent reactive flow in a combustor equipped with an industrial injector prototype. Predicted temperature levels and topology of the soot volume fraction field were compared to experimental results. Some discrepancies were observed : they were analysed and corrections were proposed. Finally, a coupling strategy between the LES (Large Eddy Simulation) approach and a radiative transfer simulation tool based on the Monte Carlo method was developed and tested on the same combustor. It appears that radiative transfer does not greatly modify the flow, but has a relatively important effect on wall heat fluxes.

Table des matières

Introduction	xv
I Modèles physiques et méthodes numériques pour la simulation d'un foyer aéronautique	1
1 Modélisation des écoulements turbulents réactifs diphasiques	3
1.1 Les équations de l'aérothermochimie	7
1.1.1 Équations de conservation	7
1.1.2 Loi d'état et relations de comportement	8
1.2 Turbulence	10
1.2.1 Phénoménologie de la turbulence	10
1.2.2 Filtrage des équations de Navier-Stokes	13
1.2.3 Calcul des grandeurs moyennes et RMS	16
1.3 Combustion laminaire	17
1.3.1 Régimes de combustion	17
1.3.2 Mécanismes chimiques	22
1.4 Combustion turbulente	27
1.4.1 Problématique	27
1.4.2 Modélisation de la combustion turbulente	27
1.5 Phase dispersée	29
1.5.1 Efforts exercés sur les particules	30
1.5.2 Évaporation des particules	31
1.5.3 Chauffage des particules	31
1.5.4 Fragmentation secondaire	32
1.5.5 Couplage avec la phase gazeuse	33
1.5.6 Modèle aux parois	33
1.5.7 Diamètres caractéristiques dans un spray de gouttes	34
1.6 Méthodes numériques	35
1.6.1 Discrétisation spatiale	35
1.6.2 Intégration temporelle	37
2 Modélisation des transferts radiatifs dans les flammes	41
2.1 Théorie pour le calcul des transferts radiatifs	45
2.1.1 Expressions du flux et de la puissance	45
2.1.2 Équation du transfert radiatif	46
2.2 Méthodes numériques	47
2.2.1 Méthode de Monte Carlo	47
2.2.2 Méthode DOM	50
2.3 Modèles de propriétés radiatives	51

2.3.1	Propriétés radiatives des gaz	51
2.3.2	Propriétés radiatives des suies	52
II	Modèles de formation des suies	55
3	État de l'art sur la formation des particules de suie	57
3.1	Physique et modélisation de la formation des suies	61
3.1.1	Physique de formation et d'oxydation des suies	61
3.1.2	Modèles pour la simulation numérique	68
3.2	Caractérisation expérimentale des suies dans les flammes	74
3.2.1	Diagnostics pour la caractérisation des suies dans les flammes	75
3.2.2	Études expérimentales des suies dans les flammes	78
3.3	Études numériques des suies en combustion	81
3.3.1	Flammes laminaires	81
3.3.2	Flammes turbulentes	83
3.4	Conclusion	89
4	Simulation de la formation des suies avec chimie globale et modèle de suie empirique	91
4.1	Modèle empirique de Tesner-Magnussen	95
4.1.1	Choix du modèle	95
4.1.2	Description du modèle de Tesner-Magnussen	96
4.1.3	Adaptation aux schémas numériques de CEDRE	98
4.1.4	Robustesse du modèle en milieu homogène	99
4.2	Application du modèle à la prédiction des suies dans une flamme laminaire prémélangée riche	102
4.2.1	Prédictions du modèle original	102
4.2.2	Améliorations du modèle	104
4.2.3	Confrontation du modèle aux variations de richesse	108
4.3	Conclusion du chapitre	109
III	Simulation de la formation des suies et du rayonnement dans le foyer TLC	111
5	Le foyer TLC : caractéristiques physiques et choix des conditions de calcul	113
5.1	La chambre de combustion TLC	117
5.1.1	Géométrie	117
5.1.2	Points de fonctionnement	119
5.1.3	Mesures réalisées	120
5.2	Définition du domaine de calcul	124
5.2.1	Simplification de la géométrie	124
5.2.2	Maillage	125
5.3	Conditions aux limites	126
5.3.1	Choix du point de fonctionnement	126
5.3.2	Injection de la phase liquide	128
5.3.3	Injection de la phase gazeuse	135
5.3.4	Conditions aux parois	136
5.4	Choix des modèles pour la simulation numérique	136
5.4.1	Modèles pour la combustion turbulente diphasique	136

5.4.2	Modèle cinétique PEA pour la combustion du kérosène	138
5.5	Conclusion	141
6	Simulation de la combustion et de la formation des suies dans le foyer TLC	143
6.1	Simulation du régime d'approche	147
6.1.1	État aérothermochimique moyen dans la chambre	147
6.1.2	Comportement instationnaire de l'écoulement	166
6.1.3	Comparaison mesures - simulation	168
6.1.4	Conclusion	175
6.2	Modification <i>ad hoc</i> de la simulation et modélisation de la formation des suies	177
6.2.1	Intérêt, détails et limitations des modifications apportées	177
6.2.2	Modification de la répartition des débits d'air injecté	179
6.2.3	Simulation de la formation des suies dans le foyer TLC	180
6.2.4	Conclusion	184
6.3	Simulation du régime de montée	185
6.3.1	Conditions aux limites et modèles	185
6.3.2	État aérothermochimique moyen dans la chambre	185
6.3.3	Comparaison mesures - simulation	189
6.3.4	Conclusion	191
6.4	Conclusion du chapitre	191
7	Simulation du couplage LES - rayonnement dans le foyer TLC	193
7.1	État de l'art concernant la simulation du couplage combustion-rayonnement	197
7.2	Stratégie de couplage LES-rayonnement	201
7.2.1	Parallélisation des différents solveurs de CEDRE et stratégie de partitionnement	201
7.2.2	Échanges et ordonnancement du couplage multi-solveurs	203
7.3	Paramétrisation et optimisation du calcul de transfert radiatif	205
7.3.1	Paramètres pour la simulation des transferts radiatifs dans la chambre TLC	205
7.3.2	Calcul radiatif Monte Carlo de référence	207
7.3.3	Amélioration du calcul des transferts radiatifs dans la chambre TLC avec la méthode de Monte Carlo	212
7.3.4	Choix de la distribution spatiale et de la méthode de Monte Carlo	216
7.3.5	Évaluation des performances des méthodes DOM et Monte Carlo	217
7.3.6	Influence du modèle de propriétés radiatives des gaz	223
7.3.7	Influence de la condition limite aval	223
7.3.8	Conclusion	227
7.4	Application du couplage combustion-rayonnement au foyer TLC	227
7.4.1	Détermination des paramètres de couplage	227
7.4.2	Effet des transferts radiatifs sur la combustion en régime d'approche	228
7.5	Conclusion	238
	Conclusion et perspectives	241
A	Études expérimentales sur la formation des suies dans les flammes	245

B	Simulation de la formation des suies avec chimie tabulée et modèle de suie semi-empirique	253
B.1	Introduction	255
B.2	Methods and models	257
B.2.1	Reacting gas flow	257
B.2.2	Soot model	258
B.2.3	Radiative transfer	261
B.3	Simulated test cases	261
B.3.1	Experimental conditions	261
B.3.2	Numerical conditions	262
B.4	Results and discussion	263
B.4.1	Gas phase chemistry	263
B.4.2	Soot results	265
B.4.3	Flame radiation	269
B.5	Conclusion	270
C	Compléments sur la simulation de flamme 1D laminaire prémélangée avec Cedre	273
C.1	Méthodes pour imposer le profil expérimental de température	275
C.1.1	Profil constant au cours du temps	276
C.1.2	Profil tabulé suivant la variable d'avancement	277
C.1.3	Profil tabulé suivant x avec suivi de flamme	279
D	Résultats complémentaires de la simulation de la chambre TLC	281
D.1	Lignes de courant de l'écoulement moyen	283
D.2	Indice de Takeno sur les champs moyens	283
D.3	Résultats supplémentaires	283
	Références	291

Introduction

Les industriels du secteur aéronautique doivent concevoir de nouvelles chambres de combustion plus durables et moins polluantes en raison du durcissement des normes en vigueur sur les émissions de NO_x et l'apparition future de normes sur les émissions de suies. Par ailleurs, il est nécessaire de limiter au maximum les coûts et les durées de conception de ces chambres. Cela passe par l'utilisation de la simulation numérique, qui est largement moins coûteuse que la réalisation d'essais, mais qui n'est pas toujours prédictive en raison de la limitation de la discrétisation des systèmes par la puissance de calcul disponible et des hypothèses simplificatrices des modèles physiques utilisés. La simulation numérique doit être capable de fournir les éléments nécessaires pour répondre aux problématiques de conception de foyers aéronautiques. Dans le domaine de l'énergétique, on a comme principales problématiques

- l'estimation de la charge thermique des parois (température et gradients), qui conditionne la durée de vie du foyer ;
- la prévision de la température des gaz en sortie de chambre, afin d'évaluer les contraintes thermiques subies par les aubes de turbine ;
- l'évaluation des niveaux d'émissions polluantes en sortie de foyer, et, pour les applications militaires, la signature infrarouge induite ;
- la caractérisation des phénomènes d'instabilités de combustion ;
- les possibilités de (ré)allumage et les conditions d'extinction des foyers.
- la détermination du rendement de combustion, dont dépend la consommation ;

Afin de traiter ces problématiques, les outils numériques doivent être capables de représenter de manière fidèle un grand nombre de phénomènes physiques présents dans les chambres de combustion, comme l'aérodynamique de l'écoulement turbulent, le comportement de la phase liquide, les phénomènes chimiques tels que la combustion et la formation des polluants (suies, NO_x , ...), ainsi que les transferts thermiques.

Il faut noter en particulier que les phénomènes de combustion, de formation des suies et de rayonnement sont fortement couplés et que leur traitement par la simulation numérique est délicat. Leur bonne reproduction est néanmoins déterminante pour l'estimation de la charge thermique des parois de la chambre de combustion et la prévision des émissions polluantes. Les transferts radiatifs peuvent en effet avoir un rôle important à la fois sur la température de paroi et sur la température de l'écoulement gazeux, ce qui influe sur la formation d'espèces sensibles à la température comme les NO_x [1] et sur la dynamique de la flamme [2]. Or les particules de suie ont tendance à accroître fortement l'émission radiative du milieu, lorsqu'elles sont en concentration suffisante, et doivent donc être prises en compte par la modélisation. Elles constituent par ailleurs un polluant notoire : rejetées par les véhicules routiers et par les moteurs d'avion, en particulier au voisinage des aéroports [3], ces particules de taille nanométrique peuvent s'introduire profondément dans les poumons [4] et causer des problèmes de santé. Remarquons que ces particules carbonées, qui sont indésirables dans les foyers aéronautiques, sont

à l'inverse utilisées dans les fours verriers pour augmenter les transferts radiatifs sur le bain de verre et permettre la fusion du mélange. La formation et l'oxydation des suies sont des processus physiques lents par rapport aux phénomènes de combustion proprement dits, c'est-à-dire les réactions d'oxydation du combustible, et mettent en jeu un grand nombre de molécules gazeuses et de particules solides de tailles très différentes. La modélisation quantitative de ces phénomènes requiert un niveau de détail élevé, difficilement abordable dans un contexte industriel où les coûts doivent être limités. L'interaction des particules de suie avec de nombreuses espèces chimiques nécessite également une modélisation détaillée de la combustion, qui produit les espèces précurseurs de la formation de ces particules. Pour ces raisons, des modèles à la fois précis et peu coûteux doivent actuellement être développés [5, 6] pour la simulation de la formation des suies et du rayonnement dans les codes CFD (*Computational Fluid Dynamics*) actuels, capables de traiter des écoulements compressibles, turbulents et réactifs sur des maillages non-structurés adaptés au traitement des géométries complexes.

Pour traiter la simulation numérique de la combustion, de la formation des suies et du rayonnement, une méthodologie a été élaborée à l'ONERA il y a une dizaine d'années [7]. Le modèle PEUL (Probabiliste EULérien Lagrangien) permettait de calculer de manière stationnaire l'aérodynamique en approche eulérienne et la thermochimie en approche lagrangienne [8]. Et la méthode de Monte Carlo était utilisée en post-traitement pour évaluer les transferts radiatifs. Cette approche a permis de reproduire l'évolution de la température et de la fraction volumique de suie sur l'axe d'une flamme de diffusion turbulente [8], et d'étudier l'influence de l'interaction rayonnement-turbulence sur les transferts radiatifs dans cette flamme [7, 9]. Cependant, les approches instationnaires comme la LES (*Large Eddy Simulation*) se sont depuis largement développées et sont de plus en plus utilisées pour simuler des écoulements turbulents réactifs [1, 10–12]. Ces approches, utilisées pour la simulation de chambres de combustion, permettent une caractérisation plus précise de l'écoulement par rapport à l'approche stationnaire RANS (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) [13], et ont théoriquement la capacité de reproduire les phénomènes d'allumage et d'instabilités de combustion [11, 14, 15]. Dans ce cadre, l'approche PEUL apparaît inadaptée en l'état pour des calculs instationnaires. Il est donc nécessaire d'utiliser une méthodologie plus économique pour la simulation instationnaire de la combustion, de la formation des suies et du rayonnement dans des foyers proches des chambres annulaires industrielles.

Les études récentes traitant de cette problématique [16–19] apportent des éléments pertinents pour élaborer une telle méthodologie. En particulier, le couplage entre un code CFD compressible et la méthode des ordonnées discrètes pour calculer les transferts radiatifs a déjà été mis en place et utilisé pour la simulation instationnaire d'écoulements réactifs et turbulents [17, 18]. Pour la modélisation de la formation des suies, les avancées récentes [5, 6] sont encore trop coûteuses pour les applications visées, surtout en tenant compte du surcoût du couplage instationnaire avec le rayonnement. C'est pourquoi, à la connaissance de l'auteur, aucune étude ne traite aujourd'hui de façon complète la problématique suivante : la simulation instationnaire de la combustion turbulente diphasique, couplée à la formation des suies et au rayonnement dans une chambre de combustion.

C'est dans ce contexte que cette étude a été menée. Elle consiste à établir une méthodologie de calcul mêlant tous les aspects de modélisation évoqués ci-dessus, dans le but de démontrer la faisabilité de simulations multiphysiques permettant l'estimation des charges thermiques pariétales et des émissions polluantes. Il ne s'agit pas d'améliorer chacun des aspects de la modélisation pris indépendamment, mais de réaliser des choix de modèles adéquats pour combiner tous ces éléments, et d'adopter une méthodologie

de couplage adaptée aux outils numériques utilisés de manière à minimiser les coûts de calcul. Le calcul multiphysique de l'écoulement dans une configuration représentative des problématiques industrielles permettra alors de prouver la faisabilité d'un tel calcul.

La première partie de ce mémoire est consacrée aux modèles physiques et aux méthodes numériques utilisés dans ces travaux de thèse. Le chapitre 1 concerne la modélisation des écoulements turbulents réactifs diphasiques, et le chapitre 2 traite de la modélisation des transferts radiatifs dans ces écoulements.

La démarche est ensuite orientée en deux parties. Dans la partie II consacrée à la modélisation de la formation des suies, l'état de l'art de l'étude de la formation des suies en combustion fait l'objet du chapitre 3. Le but est de fournir les éléments nécessaires aux choix à réaliser dans la suite de l'étude et aux interprétations des résultats obtenus. Les connaissances actuelles de la physique des phénomènes mis en jeu, ainsi que les modèles utilisés pour représenter numériquement ces phénomènes ont d'abord été décrits. La caractérisation expérimentale des suies dans les flammes a ensuite fait l'objet d'une description détaillée permettant de soulever les difficultés rencontrées pour les mesures concernant les suies dans les flammes, et de regrouper un large ensemble de cas tests nécessaire à la suite de l'étude. Des études numériques sur la simulation de la formation des suies en combustion ont ensuite été répertoriées afin de mettre en évidence les avancées et les lacunes actuelles de la modélisation.

Dans le chapitre 4, une modélisation de la formation des suies adaptée aux exigences de cette étude a ensuite été proposée et validée. Pour cela, un modèle de formation des suies de la littérature, à caractère empirique, a d'abord été choisi pour sa simplicité et sa robustesse. Il a ensuite été adapté et validé sur une configuration de flamme 1D laminaire prémélangée, afin d'évaluer son comportement et sa précision.

La partie III de ce mémoire est consacrée à la simulation de l'écoulement dans le foyer semi-industriel TLC (*Towards Lean Combustion*), doté d'un prototype d'injecteur industriel multipoint swirlé. Le chapitre 5 regroupe les informations sur les données et les conditions de réalisation de cette simulation. On y présente le dispositif expérimental, les mesures réalisées et les différents points de fonctionnement étudiés. Le domaine de calcul et son maillage, les conditions aux limites et les modèles choisis sont ensuite décrits.

La simulation de la combustion et de la formation des suies dans le foyer TLC est présentée dans le chapitre 6. Il s'agit de réaliser une simulation donnant des résultats proches des résultats de mesure, qui servira de base à l'étude du couplage LES-rayonnement dans le chapitre 7. Pour cela, les résultats obtenus pour le point de fonctionnement choisi ont été analysés et comparés aux résultats expérimentaux. Pour réduire les écarts constatés, une modification des conditions aux limites initialement estimées a été proposée et appliquée. Un second point de fonctionnement a ensuite été calculé afin de soumettre la modélisation à des conditions d'écoulement différentes et d'évaluer son comportement.

Enfin, dans le chapitre 7, après avoir rappelé les travaux existant dans le domaine du couplage combustion-rayonnement, on présente la méthodologie de couplage développée dans cette étude, visant à minimiser le temps de calcul. Le calcul des transferts radiatifs dans le foyer TLC est ensuite mis au point, impliquant le choix de différents paramètres. Les résultats de plusieurs calculs couplés LES-rayonnement sont ensuite présentés. On analyse l'influence de la période de couplage du calcul radiatif avec le calcul CFD sur les résultats, et on indique l'effet des transferts radiatifs sur l'écoulement et la température des parois de la chambre.

Première partie

**Modèles physiques et méthodes
numériques pour la simulation d'un
foyer aéronautique**

Modélisation des écoulements turbulents réactifs diphasiques

I

On donne dans ce chapitre les éléments théoriques sur lesquels l'étude présentée dans les parties II et III de ce mémoire s'appuie. Il s'agit de décrire les équations régissant les phénomènes physiques se produisant dans un écoulement turbulent réactif diphasique, ainsi que les modèles utilisés pour résoudre ces équations par la simulation numérique.

On détaille d'abord les équations de l'aérothermochimie, puis on introduit la phénoménologie de la turbulence et le traitement des équations qui en découle. On s'intéresse ensuite au phénomène de combustion, laminaire puis turbulente. On introduit ici des concepts qui serviront à l'analyse des résultats obtenus dans cette thèse. On décrit également la modélisation du transport de gouttes liquides au sein d'un écoulement gazeux et les modèles associés. Enfin on détaille brièvement les méthodes numériques mises en œuvre par ces modèles et approches de simulation.

Table des matières

1.1 Les équations de l'aérothermochimie	7
1.1.1 Équations de conservation	7
1.1.2 Loi d'état et relations de comportement	8
1.1.2.1 Loi d'état des gaz parfaits	8
1.1.2.2 Lois de diffusion	9
1.1.2.3 Coefficients phénoménologiques	9
1.2 Turbulence	10
1.2.1 Phénoménologie de la turbulence	10
1.2.1.1 La théorie de Kolmogorov	11
1.2.1.2 Résolution numérique de la turbulence	12
1.2.2 Filtrage des équations de Navier-Stokes	13
1.2.2.1 Filtrage RANS	13
1.2.2.2 Filtrage LES	14
1.2.2.3 Équations filtrées	14
1.2.2.4 Fermeture des équations	15
1.2.3 Calcul des grandeurs moyennes et RMS	16
1.3 Combustion laminaire	17
1.3.1 Régimes de combustion	17
1.3.1.1 Le régime de combustion prémélangée	17
1.3.1.2 Le régime de combustion en flamme de diffusion	19
1.3.1.3 Le régime de combustion partiellement prémélangé	21
1.3.2 Mécanismes chimiques	22
1.3.2.1 Modélisation d'un schéma cinétique	22
1.3.2.2 Méthode d'ajustement PEA	23
1.3.2.3 Tabulation de la chimie détaillée	24
1.4 Combustion turbulente	27
1.4.1 Problématique	27
1.4.2 Modélisation de la combustion turbulente	27
1.5 Phase dispersée	29
1.5.1 Efforts exercés sur les particules	30
1.5.2 Évaporation des particules	31
1.5.3 Chauffage des particules	31
1.5.4 Fragmentation secondaire	32
1.5.5 Couplage avec la phase gazeuse	33
1.5.6 Modèle aux parois	33
1.5.7 Diamètres caractéristiques dans un spray de gouttes	34
1.6 Méthodes numériques	35
1.6.1 Discrétisation spatiale	35
1.6.1.1 Interpolation des grandeurs aux faces	36
1.6.1.2 Calcul des flux numériques	36
1.6.2 Intégration temporelle	37

1.1 LES ÉQUATIONS DE L'AÉROTHERMOCHIMIE

Rappelons d'abord les équations de l'aérothermochimie qui régissent le comportement d'un mélange gazeux réactif dans le cadre de l'approximation des milieux continus. Dans ce cadre, on peut caractériser tout volume élémentaire de fluide par des grandeurs macroscopiques comme la pression, la température, la masse volumique. Ces équations sont basées sur les principes de conservation de la masse, des espèces, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Elles sont fermées par des lois d'état et des relations de comportement liées aux propriétés physiques du fluide. On présente ici les équations résolues par le code CFD CEDRE de l'ONERA, utilisé dans la suite de l'étude.

1.1.1 Équations de conservation

Conservation des espèces

On considère dans cette étude des écoulements multi-espèces et réactifs. Pour un gaz composé de n_e espèces, on peut donc écrire n_e équations de la forme :

$$\rho \frac{DY_k}{Dt} = \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{V}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_k + \dot{\omega}_k + \mathcal{S}_k^d, \quad (1.1)$$

où Y_k désigne la fraction massique de l'espèce k , $\dot{\omega}_k$ son terme source (en $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$), dont la formulation sera détaillée en section 1.3.2, et \mathcal{S}_k^d le terme source dû à l'action de la phase dispersée (voir section 1.5.5). On rappelle la définition de la dérivée particulaire :

$$\frac{D\bullet}{Dt} = \frac{\partial \bullet}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla \bullet. \quad (1.2)$$

En outre, le flux de diffusion de masse \mathbf{J}_k de l'espèce k s'exprime par :

$$\mathbf{J}_k = \rho \mathcal{V}_k Y_k, \quad (1.3)$$

avec \mathcal{V}_k la vitesse de diffusion de l'espèce k . Pour que la somme des n_e équations bilan de masse par espèces (1.1) donne le bilan de masse totale, deux conditions doivent être respectées :

(i) Nullité de la somme des flux de diffusion d'espèces :

$$\sum_{k=1}^{n_e} \mathcal{V}_k Y_k = \mathbf{0} \Leftrightarrow \sum_{k=1}^{n_e} \mathbf{J}_k = \mathbf{0}. \quad (1.4)$$

(ii) Nullité de la somme des termes sources d'espèces :

$$\sum_{k=1}^{n_e} \dot{\omega}_k = 0. \quad (1.5)$$

Conservation de la quantité de mouvement

L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\rho \frac{D\mathbf{V}}{Dt} = \frac{\partial \rho \mathbf{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \otimes \mathbf{V}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} - p\mathbf{I}) + \mathcal{S}_{\text{qdm}}, \quad (1.6)$$

où $\boldsymbol{\tau}$ est le tenseur des contraintes visqueuses, p la pression, \mathbf{I} la matrice identité et \mathcal{S}_{qdm} le terme source des forces volumiques. Dans le cadre de notre étude, le terme d'accélération par gravité est négligeable devant les autres termes d'accélération. Il reste alors le terme source dû à l'action de la phase dispersée : $\mathcal{S}_{\text{qdm}} = \mathcal{S}_{\text{qdm}}^d$ défini en section 1.5.5.

Conservation de l'énergie totale

L'énergie totale vaut :

$$e_t = e + \frac{1}{2} \mathbf{V} \cdot \mathbf{V}, \quad (1.7)$$

où, dans l'hypothèse d'un mélange idéal de gaz parfaits qui sera adoptée dans la suite, l'énergie interne e peut s'écrire :

$$e = \sum_{k=1}^{n_e} Y_k h_k^0 + \underbrace{\int_{T_0}^T c_v dT - \frac{RT_0}{\mathcal{M}}}_{e_s}, \quad (1.8)$$

où h_k^0 est l'enthalpie de formation de l'espèce k , définie à la température de référence T_0 , c_v la capacité calorifique massique à volume constant du mélange et \mathcal{M} la masse molaire du mélange définie par la relation (1.13) donnée ci-dessous. On se conforme ici à un usage assez répandu [20] qui consiste à compter la contribution $-RT_0/\mathcal{M}$ de correction dans l'énergie sensible.

On peut alors formuler l'équation de conservation de l'énergie totale :

$$\rho \frac{De_t}{Dt} = \frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_t \mathbf{V}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_{e_t} + \nabla \cdot [(\boldsymbol{\tau} - p\mathbf{I})\mathbf{V}] + \mathcal{S}_{e_t}, \quad (1.9)$$

où \mathbf{J}_{e_t} est le flux d'énergie totale formulé par l'équation (1.10) qui fait intervenir l'enthalpie h_k de l'espèce k et le flux de diffusion de la chaleur \mathbf{q} .

$$\mathbf{J}_{e_t} = \mathbf{q} + \sum_{k=1}^{n_e} h_k \mathbf{J}_k. \quad (1.10)$$

Le terme source d'énergie totale s'exprime de la façon suivante :

$$\mathcal{S}_{e_t} = \mathcal{S}_{\text{rad}} + \mathcal{S}_{e_t}^d. \quad (1.11)$$

La gravité étant négligée, le travail correspondant l'est également dans l'expression (1.11). Le terme \mathcal{S}_{rad} représente le terme source de rayonnement, et $\mathcal{S}_{e_t}^d$ le terme source d'énergie issu de la phase dispersée.

1.1.2 Loi d'état et relations de comportement

1.1.2.1 Loi d'état des gaz parfaits

À basse pression, on peut négliger les interactions d'ordre électrostatique dans le gaz, qui dépendent de la polarité des molécules. L'hypothèse de gaz parfait consiste à prolonger asymptotiquement cette observation, en considérant un gaz fictif dans lequel les molécules sont ponctuelles et sans interaction entre elles. Sous cette hypothèse, on obtient une loi d'état indépendante de la nature du gaz, qui s'écrit pour un mélange de gaz parfaits :

$$p = \rho \frac{R}{\mathcal{M}} T, \quad (1.12)$$

où $R \approx 8,314\,472 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ est la constante universelle des gaz parfaits. La masse molaire du mélange \mathcal{M} est définie par :

$$\mathcal{M} = \sum_{k=1}^{n_e} X_k \mathcal{M}_k, \quad (1.13)$$

où X_k est la fraction molaire de l'espèce k et \mathcal{M}_k sa masse molaire. On lie les fractions massiques et molaires par la relation :

$$Y_k = \frac{X_k \mathcal{M}_k}{\mathcal{M}}. \quad (1.14)$$

1.1.2.2 Lois de diffusion

On exprime dans ce paragraphe les termes de diffusion non explicités des équations de conservations (1.1), (1.6) et (1.9) et on explique comment ils sont calculés dans le cadre de la présente étude.

Diffusion de quantité de mouvement

On ne considère dans cette étude que des fluides newtoniens, ce qui conduit à une relation linéaire entre le tenseur des contraintes visqueuses et le tenseur des taux de déformation :

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left[\nabla \mathbf{V} + (\nabla \mathbf{V})^T \right] + \left(\kappa - \frac{2}{3} \mu \right) (\nabla \cdot \mathbf{V}) \mathbf{I}, \quad (1.15)$$

avec μ le coefficient de viscosité dynamique, liée à la viscosité cinématique par la relation $\mu = \rho \nu$, et κ le coefficient de viscosité en volume. Nous ferons ici l'hypothèse de Stokes consistant à négliger κ car difficile à évaluer [20, 21].

Diffusion des espèces

Pour évaluer les vitesses de diffusion des espèces \mathbf{V}_k , on doit théoriquement résoudre un système de rang $n_e - 1$ complété par la relation de conservation de la masse (1.4). Cette résolution a un coût non négligeable lorsque n_e est élevé, c'est pourquoi dans un code à vocation industrielle comme CEDRE, on utilise l'approximation de Fick qui permet de formuler \mathbf{V}_k en introduisant un coefficient de diffusion de l'espèce k D_k :

$$\mathbf{V}_k = -D_k \frac{1}{Y_k} \nabla Y_k \quad (1.16)$$

d'où le flux de diffusion de l'espèce k s'écrit :

$$\mathbf{J}_k = -\rho D_k \nabla Y_k \quad (1.17)$$

Avec cette formulation, l'effet Soret, qui représente l'effet du gradient de température sur la diffusion moléculaire, est négligé.

Diffusion de chaleur

On suppose que la diffusion obéit à la loi de Fourier couramment utilisée :

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T. \quad (1.18)$$

On néglige ainsi l'effet Dufour, qui représente l'effet des flux moléculaires sur le flux de chaleur, car il est généralement très faible.

1.1.2.3 Coefficients phénoménologiques

Il reste à donner les lois utilisées pour déterminer les coefficients phénoménologiques introduits dans les paragraphes précédents.

Pour calculer la viscosité dynamique du mélange, on utilise la moyenne arithmétique des viscosités dynamiques de chaque espèce μ_k :

$$\mu = \sum_{k=1}^{n_e} Y_k \mu_k, \quad (1.19)$$

en calculant μ_k à l'aide de la loi de Sutherland souvent utilisée :

$$\mu_k(T) = \mu_k^0 \frac{T_k^0 + T_k^1}{T + T_k^1} \left(\frac{T}{T_k^0} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad (1.20)$$

où $\mu_k^0 = \mu_k(T_k^0)$ et T_k^0 et T_k^1 sont des constantes supplémentaires du modèle pour l'espèce k .

La conductivité thermique de mélange λ est évaluée à partir de la conductivité thermique de chaque espèce via une moyenne arithmétique pondérée par la viscosité :

$$\lambda = \mu \sum_{k=1}^{n_e} \frac{\lambda_k}{\mu_k} Y_k, \quad (1.21)$$

où les conductivités thermiques des espèces λ_k sont obtenues en considérant les nombres de Prandtl des espèces constants : $\lambda_k = \mu_k c_{p,k} / \text{Pr}_k$, $c_{p,k}$ étant la capacité calorifique massique à pression constante de l'espèce k , évaluée à partir du polynôme :

$$c_{p,k}(T) = \sum_{i=1}^{n_d} a_{k,i} \left(\frac{T}{\theta} \right)^i, \quad (1.22)$$

les coefficients $a_{k,i}$ étant donnés pour chaque espèce, et θ étant une échelle de température valant en pratique 1000 K. Le degré des polynômes a été choisi égal à $n_d = 7$, ce qui est suffisant pour décrire précisément l'évolution de $c_{p,k}(T)$. Le nombre de Prandtl introduit ici compare les coefficients de transport de quantité de mouvement (μ_k) et de chaleur ($\lambda_k / c_{p,k}$).

Enfin, pour évaluer le coefficient de diffusion D_k des espèces, l'hypothèse la plus courante consiste à le relier à la viscosité μ_k , en supposant constant le nombre de Schmidt Sc_k qui compare la diffusion de quantité de mouvement à la diffusion moléculaire de l'espèce k :

$$\text{Sc}_k = \frac{\nu}{D_k} \Leftrightarrow D_k = \frac{\nu}{\text{Sc}_k} \quad (1.23)$$

En outre, on peut introduire également le nombre de Lewis Le_k qui compare le coefficient de diffusion de chaleur avec celui de diffusion moléculaire de l'espèce k :

$$\text{Le}_k = \frac{\text{Sc}_k}{\text{Pr}_k} = \frac{\lambda_k}{\rho c_{p,k} D_k} \quad (1.24)$$

1.2 TURBULENCE

On s'intéresse dans cette section aux moyens mis en œuvre pour simuler la turbulence et ses effets sur l'écoulement. Il convient de décrire les approches et modèles utilisés dans cette étude pour simuler des écoulements réactifs turbulents avec le code CEDRE.

1.2.1 Phénoménologie de la turbulence

Les effets non linéaires contenus dans les équations de Navier-Stokes peuvent induire, lorsqu'ils deviennent dominants par rapport à la diffusion, la déstabilisation d'un écoulement laminaire qui transitionne alors vers un régime turbulent. Au sein d'un écoulement turbulent des structures turbulentes d'échelles très variées coexistent, qui compliquent lourdement la simulation par rapport au régime laminaire. On ne fait pas ici de description exhaustive de la turbulence, dont l'étude est très vaste. On se

contente de donner les informations nécessaires à la compréhension de la modélisation de turbulence. Le lecteur est invité à consulter des ouvrages de référence [22, 23] pour des informations plus précises sur la turbulence.

1.2.1.1 La théorie de Kolmogorov

En 1941, Kolmogorov et Obukhov ont proposé une théorie de la turbulence en reprenant l'idée de cascade d'énergie introduite par Richardson. Elle consiste à répartir les échelles des tourbillons constituant l'écoulement en trois zones distinctes dans l'espace spectral, schématisées sur la figure 1.1 :

- (i) Les grandes échelles, dont la taille est limitée par la géométrie du problème, produisent l'énergie cinétique turbulente. C'est la *zone de production*, associée à une taille de tourbillon \mathcal{L} appelée échelle intégrale.
- (ii) Cette énergie est ensuite transférée vers les plus petites échelles à travers une zone dite *inertielle* qui ne dissipe pas l'énergie des tourbillons. Il a été prédit et vérifié sur un grand nombre d'expériences, dans lesquelles la turbulence est bien établie, que la décroissance de la densité spectrale d'énergie E est telle que $E(\kappa) \propto \kappa^{-5/3}$, où κ est le nombre d'onde, d'où la décroissance linéaire sur le schéma en échelles logarithmiques.
- (iii) Les plus petites échelles dissipent enfin l'énergie reçue en chaleur, dans la *zone dissipative* : la taille caractéristique η des tourbillons présents dans cette zone est l'échelle de Kolmogorov.

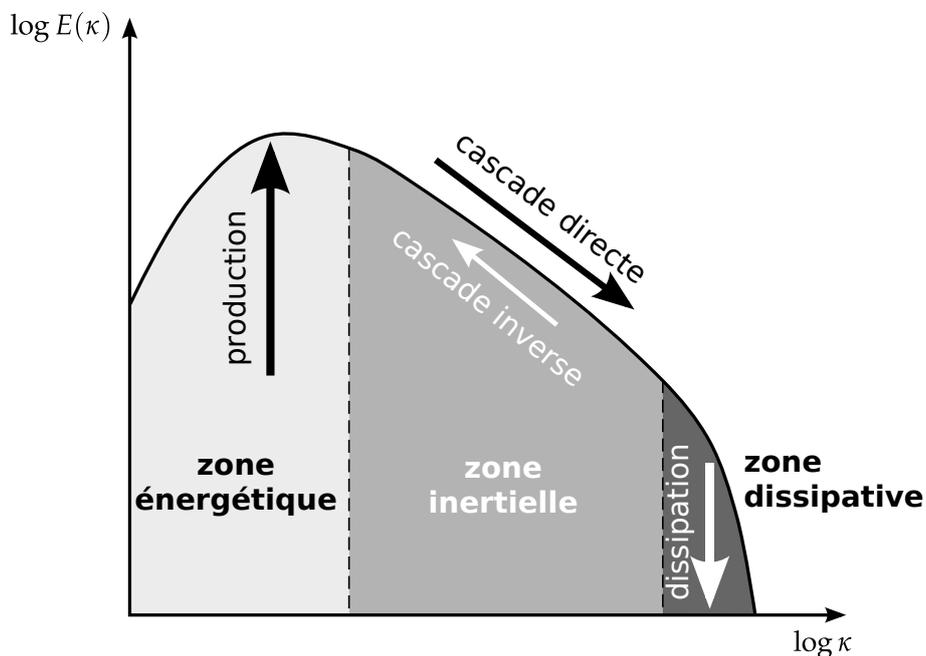


FIG. 1.1 | Spectre de Kolmogorov pour une turbulence homogène isotrope.

On introduit par ailleurs le nombre de Reynolds lié à l'échelle intégrale $Re_{\mathcal{L}} = u_{\mathcal{L}}\mathcal{L}/\nu$, qui compare les effets de la convection à ceux de la diffusion, $u_{\mathcal{L}}$ étant la vitesse caractéristique des structures de la taille de l'échelle intégrale. L'étendue du spectre à considérer pour représenter l'ensemble de la cascade varie en fonction de $Re_{\mathcal{L}}$. On peut en effet montrer que l'échelle de Kolmogorov diminue avec $Re_{\mathcal{L}}$ suivant la relation :

$$\frac{\eta}{\mathcal{L}} \propto Re_{\mathcal{L}}^{-3/4} \quad (1.25)$$

Les échelles à décrire sont donc de plus en plus fines à mesure que l'écoulement adopte un nombre de Reynolds de plus en plus grand.

En revanche, la théorie de la cascade directe de Kolmogorov ne prédit pas l'existence d'une cascade d'énergie inverse, où de l'énergie provenant des petites échelles est transférée vers les grandes, lors des processus d'appariement et d'enroulement tourbillonnaires qui augmentent la taille des structures. Cette cascade inverse peut exister dans les zones de l'écoulement où le régime turbulent n'est pas pleinement établi, et peut représenter quelques dizaines de pourcents de l'énergie transférée par la cascade directe.

1.2.1.2 Résolution numérique de la turbulence

On distingue trois grandes familles de méthodes dont la répartition entre échelles résolues et échelles modélisées est différente, et illustrée sur la figure 1.2 pour un spectre en turbulence homogène isotrope :

- La DNS (*Direct Numerical Simulation*) résout toutes les échelles spatio-temporelles de l'écoulement.
- La LES (*Large Eddy Simulation*) ne résout que les échelles les plus énergétiques (donc les plus grandes dans l'espace physique) en appliquant un filtre passe-bas dans l'espace spectral. Les échelles restantes, appelées échelles de sous-maille, ne sont pas résolues, mais leur effet sur les grandes échelles est modélisé.
- L'approche RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) où l'on cherche une solution asymptotique stationnaire au problème, en modélisant l'ensemble du spectre. L'écoulement obtenu correspond à une moyenne temporelle.

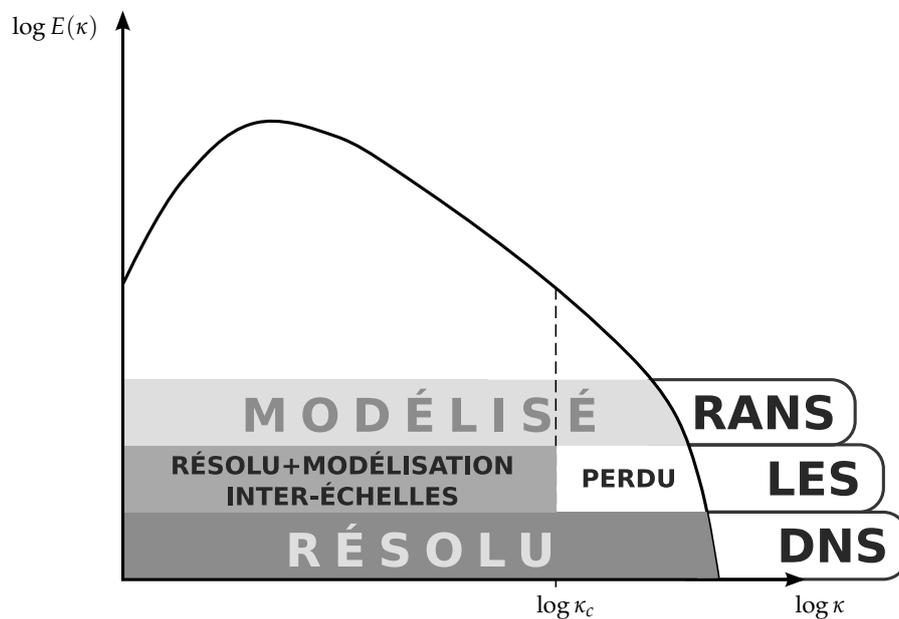


FIG. 1.2 | Localisation des intervalles du spectre modélisés ou résolus par les approches DNS, LES et RANS.

La figure 1.3 schématise le type de résultat que l'on peut obtenir avec ces trois approches. On constate que l'analyse de ces résultats sera bien différente selon l'approche mise en œuvre. Il existe également des méthodes d'hybridation des méthodes RANS et LES (DDES, PANS, ZDES), non détaillées ici, qui cherchent à combiner les avantages de chaque méthode en appliquant l'une ou l'autre selon la zone de l'écoulement à simuler.

En DNS, les équations de Navier-Stokes présentées en section 1.1 sont directement résolues. Le maillage doit donc être assez fin pour discrétiser des structures de taille η et

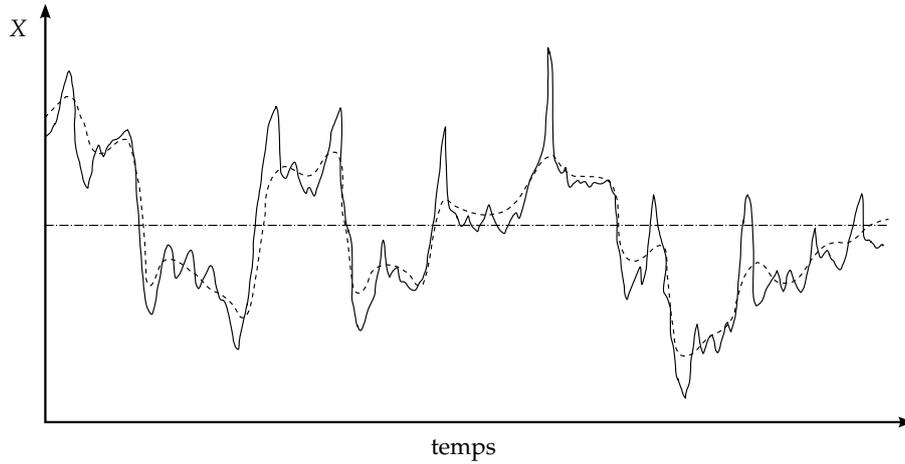


FIG. 1.3 | Schéma de l'évolution temporelle d'une grandeur X obtenue avec l'approche DNS (—), l'approche LES (-----) et l'approche RANS (- · - · - ·).

le pas de temps assez faible pour décrire la dynamique de toutes les échelles, y compris des plus petites. On peut estimer que le nombre de points nécessaires pour résoudre un écoulement de turbulence homogène isotrope d'échelle intégrale \mathcal{L} est de l'ordre de $Re_{\mathcal{L}}^{9/4}$, soit plus de 10^{12} mailles pour un écoulement d'air à pression atmosphérique et à 300 K à $50 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ dans une cavité de longueur caractéristique $\mathcal{L} = 10 \text{ cm}$. Pour des raisons de coût, l'utilisation de cette approche est marginale dans des configurations complexes, mais l'augmentation de la puissance de calculs favorise son utilisation, à l'image du récent calcul de Moureau *et al.* [12]. On préfère donc utiliser l'approche RANS du fait de son faible coût et la LES, du fait de sa précision et son coût raisonnable, pour réaliser les calculs de cette étude.

1.2.2 Filtrage des équations de Navier-Stokes

Que ce soit pour l'approche RANS ou LES, on peut décomposer formellement chaque variable φ (équation (1.26)) en une somme de deux contributions :

$$\varphi = \bar{\varphi} + \varphi' . \quad (1.26)$$

Cette décomposition, appelée décomposition de Reynolds, est cependant mal adaptée au filtrage d'équations où la masse volumique ρ n'est pas constante, car elle fait apparaître une corrélation délicate à modéliser sur l'équation de conservation de la masse. On lui préfère dans CEDRE la décomposition de Favre, où $\tilde{\varphi}$ est la moyenne de Favre et φ'' la fluctuation associée :

$$\varphi = \tilde{\varphi} + \varphi'' , \quad (1.27)$$

où par définition :

$$\tilde{\varphi} = \frac{\overline{\rho\varphi}}{\bar{\rho}} \quad \text{et} \quad \overline{\rho\varphi''} = 0 . \quad (1.28)$$

1.2.2.1 Filtrage RANS

L'approche RANS consiste à appliquer une moyenne statistique d'ensemble aux équations de Navier-Stokes, qui est remplacée en pratique, grâce à l'hypothèse d'ergodicité, par une moyenne temporelle définie par :

$$\bar{\varphi} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{(t - t_0)} \int_{t_0}^t \varphi(t) dt . \quad (1.29)$$

On peut interpréter cette opération comme un filtrage, ce qui permet de formuler des équations filtrées identiques pour les approches RANS et LES. Dans l'approche RANS, $\bar{\varphi}$ désigne la moyenne de la grandeur φ , et φ' la fluctuation associée. L'opérateur RANS vérifie les propriétés de linéarité, de conservation des constantes, de commutativité par rapport à la dérivation et de projectivité. La projectivité induit les relations suivantes utilisées lors du filtrage :

$$\overline{\overline{\varphi}} = \bar{\varphi} \quad \text{et} \quad \overline{\overline{\varphi'}} = 0. \quad (1.30)$$

1.2.2.2 Filtrage LES

Au sens LES, les grandeurs sont filtrées dans l'espace spectral par un filtre passe bas. La partie du spectre associée aux grandes structures tourbillonnaires est résolue, tandis que l'autre partie est non résolue. Une grandeur φ est alors décomposée via l'équation (1.26) en une partie résolue $\bar{\varphi}$ et une partie de sous-maille, non résolue, φ' . La modélisation de sous-maille doit alors représenter l'effet sur les échelles résolues des interactions entre les petites et les grandes échelles de la turbulence. En notant G_Δ le noyau du filtre, l'opération de filtrage de la grandeur φ dans l'espace spectral est obtenue par convolution :

$$\bar{\varphi}(\kappa) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\kappa') G_\Delta(\kappa - \kappa') d\kappa'. \quad (1.31)$$

En pratique, dans un code CFD tel que CEDRE, le filtre est imposé à la fois par le maillage et par le schéma numérique. Par rapport au RANS, le filtrage LES perd la propriété de projectivité (à part lorsque le filtre est imposé par le maillage). Les conditions (1.30) ne sont alors plus vérifiées, ce qui empêche la simplification de certains termes comme lors du filtrage RANS.

1.2.2.3 Équations filtrées

On formule les équations filtrées qui sont effectivement résolues par CEDRE en appliquant le filtre $\overline{(\cdot)}$ aux équations, puis en décomposant chaque grandeur avec la décomposition de Favre. Elles sont valables à la fois pour les approches RANS et LES selon le filtre appliqué.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{\mathbf{V}}) + \nabla \cdot \bar{\mathbf{J}}_k - \bar{\omega}_k - \bar{\mathcal{S}}_k^d = -\nabla \cdot \mathbf{J}_k^t, \quad (1.32)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{V}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{V}} \otimes \tilde{\mathbf{V}}) - \nabla \cdot (\bar{\boldsymbol{\tau}} - \bar{p} \mathbf{I}) - \bar{\mathcal{S}}_{\text{qdm}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^t, \quad (1.33)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{e}_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{e}_t \tilde{\mathbf{V}}) + \nabla \cdot \bar{\mathbf{J}}_{e_t} - \nabla \cdot [(\bar{\boldsymbol{\tau}} - \bar{p} \mathbf{I}) \tilde{\mathbf{V}}] - \bar{\mathcal{S}}_{e_t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_{e_t}^t, \quad (1.34)$$

en notant \mathbf{J}_k^t le flux de diffusion turbulent de l'espèce k , $\boldsymbol{\tau}^t$ le tenseur des contraintes turbulentes et $\mathbf{J}_{e_t}^t$ le flux de diffusion turbulente d'énergie totale. La dénomination *turbulent*, utilisée dans la suite de cette section commune aux deux approches, convient à l'approche RANS. En LES, ce terme désigne en réalité les grandeurs non résolues ou de *sous-maille*. Ces grandeurs \mathbf{J}_k^t , $\boldsymbol{\tau}^t$ et $\mathbf{J}_{e_t}^t$ correspondent aux termes issus du filtrage :

$$\mathbf{J}_k^t = \overline{\bar{\rho} \mathbf{V}'' Y_k''}, \quad (1.35)$$

$$\boldsymbol{\tau}^t = -\overline{\bar{\rho} \mathbf{V}'' \otimes \mathbf{V}''}, \quad (1.36)$$

$$\mathbf{J}_{e_t}^t = \overline{\bar{\rho} \mathbf{V}'' e_t''} + \overline{(\boldsymbol{\tau}'' - p'' \mathbf{I}) \mathbf{V}''}. \quad (1.37)$$

Les corrélations supplémentaires qui pourraient apparaître en LES ont été négligées.

Notons que l'équation de conservation de la masse totale n'a pas été filtrée, puisqu'elle n'est pas résolue par CEDRE. En effet, il n'est pas nécessaire de la résoudre car elle résulte de la somme des équations de conservation des espèces (1.32). Il reste à fermer un bon nombre de termes, détaillés dans le paragraphe suivant, pour pouvoir résoudre ces équations.

1.2.2.4 Fermeture des équations

On reprend ici chacun des termes à fermer en précisant les approximations ou les modèles utilisés pour les calculer.

Flux de diffusion laminaire et tenseur des contraintes visqueuses : Pour les évaluer, on évalue les coefficients de diffusion D_k , μ et λ directement à partir de la valeur filtrée de la température \tilde{T} , en négligeant les corrélations qui apparaissent lors du développement formel de ces flux. On obtient alors, par analogie avec les termes laminaires :

$$\overline{J_k} \approx -\bar{\rho}D_k(\tilde{T})\nabla\tilde{Y}_k, \quad (1.38)$$

$$\overline{\boldsymbol{\tau}} \approx \mu(\tilde{T}) \left[\nabla\tilde{\mathbf{V}} + (\nabla\tilde{\mathbf{V}})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{V}})\mathbf{I} \right], \quad (1.39)$$

$$\overline{J_{e_t}} \approx -\lambda(\tilde{T})\nabla\tilde{T} + \sum_{k=1}^{n_e} \overline{h_k J_k}. \quad (1.40)$$

Termes sources chimiques : On détaille leur évaluation en section 1.3.2.

Tenseur des contraintes turbulentes $\boldsymbol{\tau}^t$: Dans CEDRE, le tenseur $\boldsymbol{\tau}^t$, réduit à l'expression du tenseur de Reynolds (1.36), s'exprime suivant l'hypothèse de viscosité turbulente de Boussinesq, à la fois en LES et en RANS pour la majorité des modèles de turbulence. Elle traduit une analogie entre la forme du tenseur des contraintes visqueuses $\boldsymbol{\tau}$ et celle du tenseur de Reynolds $\boldsymbol{\tau}^t$, en introduisant un coefficient de viscosité turbulente (ou de sous-maille en LES) μ_t :

$$\boldsymbol{\tau}^t \approx \mu_t \left[\nabla\tilde{\mathbf{V}} + (\nabla\tilde{\mathbf{V}})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{V}})\mathbf{I} \right] - \frac{2}{3}\bar{\rho}k\mathbf{I}, \quad (1.41)$$

où k est l'énergie cinétique de la turbulence. Le plus souvent, la partie isotrope du tenseur (dernier terme de l'équation (1.41)) n'est pas prise en compte en LES. Pour modéliser la viscosité turbulente, de nombreux modèles existent en RANS et en LES. On ne décrit ici que les modèles utilisés dans CEDRE pour la réalisation des calculs de cette étude :

- En RANS, le modèle $k-L$ [24] a été utilisé. Dans ce modèle, deux équations de transport supplémentaires sont résolues pour k , l'énergie cinétique turbulente, et L une longueur caractéristique de la turbulence pouvant être assimilée à l'échelle intégrale. Le modèle introduit la relation :

$$\mu_t = \bar{\rho}C_\mu^{1/4}k^{1/2}L. \quad (1.42)$$

La constante C_μ vaut en général 0,09.

- En LES, le modèle largement répandu de Smagorinsky a été utilisé. Dans ce modèle, μ_t est formulé ainsi :

$$\mu_t = \bar{\rho}(C_s\Delta)^2 \left(2\tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{S}} \right)^{1/2}, \quad (1.43)$$

où S est le tenseur des gradients de vitesse, et C_s une constante, fixée ici à $C_s = 0,18$, qui dépend de la configuration de l'écoulement. On obtient cette expression simplifiée en supposant que l'échelle intégrale est de l'ordre de la taille de maille [20] : $\mathcal{L} \approx \Delta$, évaluée en maillage non-structuré à partir du volume de la cellule V_c et de l'aire des faces $A_{c,k}$:

$$\Delta = 6 \frac{V_c}{\sum_k A_{c,k}}. \quad (1.44)$$

Pour un tétraèdre régulier, l'expression (1.44) revient à calculer le diamètre de la sphère tangente aux faces.

Flux de diffusion turbulents : Pour fermer ces termes, on fait l'analogie avec les flux de diffusion moléculaire en utilisant l'hypothèse de gradient :

$$J_k^t \approx -D_k^t \nabla \tilde{Y}_k \quad \text{avec} \quad D_k^t = \frac{\bar{\mu}}{Sc_k^t}, \quad (1.45)$$

$$J_{e_i}^t \approx -\lambda^t \nabla \tilde{T} + \sum_{k=1}^{n_e} \bar{h}_k J_k^t + \tau^t \tilde{V}. \quad (1.46)$$

Les coefficients de diffusion turbulente sont évalués à partir des nombres de Prandtl et Schmidt turbulents, introduits à cet égard et qui sont fixés pour les présents calculs comme souvent à 0,9 :

$$D_k^t = \frac{\mu_t}{\bar{\rho} Sc_k^t} \quad \text{et} \quad \lambda^t = \frac{\mu_t \bar{c}_p}{Pr^t}. \quad (1.47)$$

1.2.3 Calcul des grandeurs moyennes et RMS

L'approche LES permet l'évaluation – moyennant quelques hypothèses – de l'intégralité des moments pour chaque grandeur φ de l'écoulement. En pratique, on évalue la moyenne et la variance des grandeurs, dans le but de représenter les comportements moyen et instationnaire de l'écoulement, et de comparer ces moments aux données expérimentales. En notant $\langle \cdot \rangle$ l'opérateur de moyenne temporelle, et avec la décomposition de Favre (1.27), la moyenne temporelle de φ , assimilée à une moyenne de Reynolds, s'exprime :

$$\langle \varphi \rangle = \langle \tilde{\varphi} \rangle + \langle \varphi'' \rangle. \quad (1.48)$$

Généralement, la partie de sous-maille φ'' inconnue est supposée faible, ce qui mène à négliger sa moyenne temporelle. On évalue donc la moyenne temporelle de φ par $\langle \varphi \rangle = \langle \tilde{\varphi} \rangle$ que l'on peut évaluer tout au long d'un calcul LES, à partir de l'instant où l'écoulement adopte un régime établi.

Les fluctuations de φ sont évaluées par le calcul de sa grandeur RMS (*Root Mean Square*) qui est la racine carrée de la variance de φ :

$$\varphi_{\text{rms}} = \sqrt{\langle \varphi^2 \rangle - \langle \varphi \rangle^2}. \quad (1.49)$$

Lorsque l'on décompose φ suivant Favre, on obtient plusieurs termes faisant intervenir l'inconnue φ'' . On estime généralement que ces termes de sous-maille sont faibles devant les termes résolus, ce qui permet d'exprimer φ_{rms} en fonction de termes connus dans les simulations numériques :

$$\varphi_{\text{rms}} = \sqrt{\langle \tilde{\varphi}^2 \rangle - \langle \tilde{\varphi} \rangle^2}. \quad (1.50)$$

Cette expression est utilisée dans cette étude pour évaluer les fluctuations de grandeurs telles que la température et la vitesse.

1.3 COMBUSTION LAMINAIRE

Cette section introduit les principes fondamentaux de la combustion laminaire, en distinguant les deux principaux régimes, la combustion prémélangée et en flamme de diffusion. On abordera également le régime de combustion partiellement prémélangée. On détaille d'abord la phénoménologie de ces régimes, puis les moyens de modélisation utilisés pour la simulation numérique. Le domaine de la combustion étant très vaste, on se limitera à une brève description de ces trois régimes. Le lecteur peut se référer aux ouvrages de référence de Poinso et Veynante [20] et Peters [25] pour n'en citer que deux, ainsi qu'au travail de synthèse réalisé par Savre au cours de sa thèse [26].

1.3.1 Régimes de combustion

Dans les cas de cette étude et dans les foyers aéronautiques en général, la combustion a lieu simultanément sous deux régimes distincts qui mettent en œuvre les mêmes phénomènes à petite échelle (chimie, diffusion moléculaire de masse et de chaleur) mais de manière différente, et les flammes prémélangées et de diffusion qui en résultent ont des structures et des propriétés bien distinctes qu'il est important de décrire. Le régime partiellement prémélangé est un hybride de ces deux régimes, que l'on rencontre souvent dans les dispositifs industriels.

Quel que soit le régime, on note la présence d'une réaction exothermique entre un oxydant O et un combustible F , engendrant des produits de combustion P , schématisée par une équation globale irréversible :



où ν'_F , ν'_O et ν''_P sont respectivement des coefficients stœchiométriques de F , O et P . On définit une grandeur fondamentale de la combustion, la richesse ϕ , qui compare les proportions massiques de réactifs m_F/m_O à leurs proportions prises dans les conditions stœchiométriques :

$$\phi = \frac{m_F}{m_O} \left(\frac{m_F}{m_O} \right)_s^{-1}, \quad (1.52)$$

où $(\cdot)_s$ désigne les grandeurs à la stœchiométrie. Ainsi lorsque $\phi < 1$, le mélange est dit *pauvre* car il ne contient pas suffisamment de combustible pour que tout l'oxydant soit consommé. À la stœchiométrie, qui correspond à $\phi = 1$, il contient la quantité de combustible nécessaire pour consommer tout l'oxydant. Pour $\phi > 1$, il y a un excès de combustible et le mélange est dit *riche*. En définissant le rapport stœchimétrique massique s :

$$s = \frac{\nu'_O \mathcal{M}_O}{\nu'_F \mathcal{M}_F}, \quad (1.53)$$

on montre facilement que la richesse peut s'écrire :

$$\phi = s \frac{m_F}{m_O}. \quad (1.54)$$

1.3.1.1 Le régime de combustion prémélangée

En combustion prémélangée, le combustible et l'oxydant sont mélangés à l'échelle moléculaire avant de réagir. La zone de réaction consiste en un front de flamme mince (entre 0,1 et 1 mm) d'épaisseur δ_L séparant les réactifs (ou *gaz frais*) des produits (ou *gaz brûlés*). Utilisé en mélange pauvre, ce régime permet de réduire la production de NO_x et d'augmenter le rendement du système de combustion par une combustion théorique

totale du combustible. Cependant, des problèmes de sécurité se posent à la fois pour le stockage du mélange de réactifs et pour la stabilisation de la flamme qui peut facilement remonter dans l'injecteur en cas de chute de débit.

Après allumage, le front de flamme remonte dans le mélange de réactifs avec une vitesse S_L sous l'effet de deux phénomènes successifs :

- (i) Les gaz brûlés qui viennent d'être formés dans le front de flamme chauffent les gaz frais situés à proximité dans la *zone de préchauffage*, par diffusion thermique et rayonnement.
- (ii) Une fois porté à haute température, le mélange de gaz frais réagit pour devenir un mélange de gaz brûlés, dans la *zone de réaction*. La chaleur libérée par la combustion contribue à l'échauffement des gaz frais lors de l'étape (i).

Derrière le front de flamme, du côté gaz brûlés, on a également une *zone d'oxydation* dans laquelle les produits de combustion sont lentement oxydés pour atteindre l'état d'équilibre indépendant de la cinétique du phénomène.

Dans une flamme de prémélange, la combustion se déroule à la richesse des gaz frais, dont dépendent le dégagement de chaleur et la température maximale. On peut réécrire la relation (1.54) en fonction des fractions massiques de combustible et d'oxydant :

$$\phi = s \frac{Y_F}{Y_O} \quad (1.55)$$

De plus, il est intéressant de pouvoir évaluer la vitesse de flamme S_L , notamment pour comparer des schémas réactionnels et valider les schémas réduits sur d'autres plus détaillés. Il existe de nombreuses formules analytiques pour la calculer et également plusieurs définitions [20]. On formule ici la vitesse de consommation du combustible, qui pour une flamme 1D s'écrit :

$$S_L = \frac{1}{\rho_u (Y_F^b - Y_F^u)} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_F(x) dx, \quad (1.56)$$

où les indices u et b désignent respectivement les côtés gaz frais (*unburnt*) et gaz brûlés (*burnt*).

De la même façon, différentes définitions peuvent être données pour caractériser l'épaisseur du front de flamme [20]. Il peut être utile d'en connaître une estimation *a priori*, de manière à générer un maillage adapté. On peut utiliser pour cela l'épaisseur proposée par Blint [27], qui permet d'avoir une estimation pertinente de l'épaisseur de flamme. Elle peut s'écrire :

$$\delta_L = 2 \frac{\lambda^u}{\rho^u c_p^u S_L} \left(\frac{T^b}{T^u} \right)^{0,7}, \quad (1.57)$$

en supposant la capacité calorifique et le nombre de Prandtl constants à travers la flamme, et en prenant une loi de viscosité simplifiée pour le mélange :

$$\mu(T) = \mu_0 T^{0,7}. \quad (1.58)$$

Il faut cependant garder à l'esprit que la zone de réaction est 10 à 20 fois plus mince que le front de flamme. De plus, la formule (1.57) est valable dans le cadre d'une chimie simple. En chimie complexe, de nombreux radicaux peuvent se créer et se détruire sur des échelles spatiales pouvant être bien plus faibles que δ_L .

1.3.1.2 Le régime de combustion en flamme de diffusion

Contrairement aux flammes de prémélange, dans une flamme de diffusion, les réactifs sont injectés séparément. La combustion s'effectue alors en deux étapes : les réactifs viennent au contact l'un de l'autre par transport diffusif puis, si la température est assez élevée, brûlent dans la zone où le mélange atteint des proportions proches de la stœchiométrie. Les produits de combustion résultants sont évacués par diffusion moléculaire vers les côtés oxydant et combustible où ils contribuent à préchauffer les réactifs. Dans ce régime, la combustion est essentiellement pilotée par la diffusion des réactifs l'un vers l'autre. La flamme ne se propage pas puisque le front de flamme ne peut remonter ni vers l'injection de combustible (zone trop riche) ni vers l'injection d'oxydant (zone trop pauvre). Elle est donc bien plus sûre que la flamme prémélangée car plus facile à maîtriser, ce qui explique qu'elle soit utilisée dans de très nombreuses applications industrielles. Cependant son accrochage dans un foyer peut être délicat du fait que les réactions ne peuvent pas démarrer tant que les réactifs n'ont pas été mis en contact. Par ailleurs, le front de flamme atteint des températures plus élevées que dans une flamme de prémélange non stœchiométrique, ce qui contribue à la formation de polluants comme les NO_x .

Pour une flamme de diffusion, on peut réécrire la richesse (1.54) en fonction des débits de gaz en entrée \dot{m}_1 et \dot{m}_2 respectivement côté combustible et côté oxydant, et des fractions massiques des réactifs dans chaque mélange injecté Y_F^0 et Y_O^0 :

$$\phi_g = s \frac{Y_F^0 \dot{m}_1}{Y_O^0 \dot{m}_2}. \quad (1.59)$$

Cette richesse est la richesse dite *globale* de la chambre, qui donne une idée du dégagement de chaleur qu'il est possible d'obtenir en fonction des conditions d'injection, mais ne donne pas d'information locale sur la combustion (comme la température maximale), car les réactifs brûlent près de la stœchiométrie quelle que soit la richesse globale. Dans les cas plus complexes des foyers aéronautiques, la combustion se déroule sur une gamme de richesse étendue, qu'il est intéressant de connaître. En outre, il faut garder à l'esprit que la richesse définie par (1.55) est celle correspondant aux réactifs non consommés, et est différente de celle qu'on obtiendrait en prenant également en compte les réactifs consommés présents sous forme de gaz brûlés.

Pour obtenir cette dernière, on introduit la notion de *richesse de mélange des réactifs*, qui ne prend pas en compte la combustion. Elle s'écrit suivant (1.60) (voir [25]) :

$$\phi_m(Z) = s \frac{Y_F^0 Z}{Y_O^0 (1 - Z)}, \quad (1.60)$$

où Z est un traceur de mélange, c'est-à-dire une grandeur normalisée qui n'est pas affectée par la combustion. L'implantation du calcul de ϕ_m dans le code CEDRE a aidé à analyser les résultats dans le chapitre 6. Cette richesse atteint la valeur de richesse globale définie par (1.59) lorsque les gaz – frais ou brûlés – sont totalement mélangés dans la chambre, ce qui permet de vérifier l'état du mélange en tout point. Il existe plusieurs expressions pour Z , dont des expressions simplifiées sous l'hypothèse de la réduction de la combustion à une réaction globale irréversible (voir Poinot et Veynante [20] et Peters [25]). Comme l'expression de Z dépend du schéma cinétique considéré, on introduira l'expression effectivement utilisée dans CEDRE en section 1.3.2.2.

Il est intéressant de déterminer l'enveloppe des états accessibles pour une flamme non prémélangée, pour T et Y_F , qui servira dans l'analyse de la combustion dans un foyer aéronautique dans le chapitre 6. Pour cela, il faut résoudre des problèmes simplifiés d'équilibre en introduisant des hypothèses fortes :

- problème de mélange pur, qui suppose la chimie figée ;
- problème réactif pour une chimie infiniment rapide et irréversible.

La résolution de ces problèmes s'appuie sur l'établissement des équations de flammelettes qui donnent l'évolution de Y_k et T dans la flamme en fonction du couple spatio-temporel (t, Z) dans la direction normale au front de flamme. Ce raisonnement n'est pas reproduit ici ; on ne conservera ici que ses implications en se référant à Poinso et Veynante [20]. Cependant, on apporte ici un prolongement au raisonnement de [20] en exprimant les variables décrivant la flamme Y_k et T en fonction de ϕ_m plutôt qu'en fonction de Z , en inversant la relation 1.60 :

$$Z(\phi_m) = \frac{\phi_m}{\phi_m + \phi}, \quad (1.61)$$

où $\phi = sY_F^0/Y_O^0$ est la richesse obtenue lorsque l'on mélange les mêmes débits de combustible et d'oxydant ($\dot{m}_1 = \dot{m}_2$ dans la relation (1.59)). Cela permet de faciliter l'analyse de résultats, la richesse ayant une signification plus compréhensible physiquement que Z appelée ici fraction de mélange et formulée [20] :

$$Z = \frac{sY_F - Y_O + Y_O^0}{sY_F^0 + Y_O^0}. \quad (1.62)$$

Problème de mélange pur : À chimie figée, les termes sources d'espèces et le dégagement de chaleur sont nuls. On obtient l'état du mélange :

$$Y_{F,m}(\phi_m) = \frac{Y_F^0 \phi_m}{\phi_m + \phi}, \quad (1.63)$$

$$T_m(\phi_m) = \frac{\phi_m}{\phi_m + \phi} (T_F^0 - T_O^0) + T_O^0, \quad (1.64)$$

où T_F^0 et T_O^0 sont respectivement les températures d'injection du combustible et de l'oxydant.

Problème réactif : On est dans ce cas dans le cadre de l'approche Burke-Schumann où l'hypothèse de chimie infiniment rapide implique que le combustible et l'oxydant ne peuvent pas coexister au même endroit. Le front de flamme est infiniment mince et sépare les côtés combustible et oxydant. Il est défini comme l'iso-surface de $Z = Z_{st}$ marquant la stœchiométrie, telle que $Y_F = Y_O = 0$, soit avec la définition (1.62) :

$$Z_{st} = \frac{1}{1 + \phi}, \quad (1.65)$$

qui correspond à la richesse de mélange $\phi_m = 1$. De part et d'autre du front de flamme, on peut déterminer l'évolution des variables du problème entre le front de flamme et les injections de réactifs :

- Côté combustible ($\phi_m > 1$) :

$$Y_F(\phi_m) = Y_F^0 \frac{\phi_m - 1}{\phi_m + \phi}, \quad (1.66)$$

$$T(\phi_m) = T_m(\phi_m) + \frac{1}{\phi_m + \phi} \frac{q_F Y_F^0}{c_p}. \quad (1.67)$$

- Côté oxydant ($\phi_m < 1$) :

$$Y_F(\phi_m) = 0, \quad (1.68)$$

$$T(\phi_m) = T_m(\phi_m) + \frac{\phi_m}{\phi_m + \phi} \frac{q_F Y_F^0}{c_p}. \quad (1.69)$$

On suppose pour établir ces relations que la chaleur massique c_p est la même pour toutes les espèces et indépendante de la température. En outre, q_F est la chaleur de réaction par unité de masse de combustible, qui s'écrit dans le cas d'une réaction globale (1.51) :

$$q_F = -\frac{1}{\nu'_F \mathcal{M}_F} \sum_{k=1}^{n_e} h_k^0 \mathcal{M}_k \nu_k, \quad (1.70)$$

où ν_k est le coefficient stœchiométrique de l'espèce k ($\nu_k = \nu_k''$ ou $\nu_k = -\nu_k'$ selon que l'espèce k est produite ou consommée).

Finalement, avec les équations précédentes donnant $T(\phi_m)$ et $Y_F(\phi_m)$, on trace sur la figure 1.4 les courbes de mélange pur et d'équilibre, qui donnent une cartographie des états physiquement accessibles pour ces variables. Ces diagrammes constituent un bon outil d'analyse en y superposant les données issues de flammes mesurées ou simulées. Suivant la proximité des points avec les limites d'équilibre ou de mélange, on peut caractériser l'intensité de la combustion.

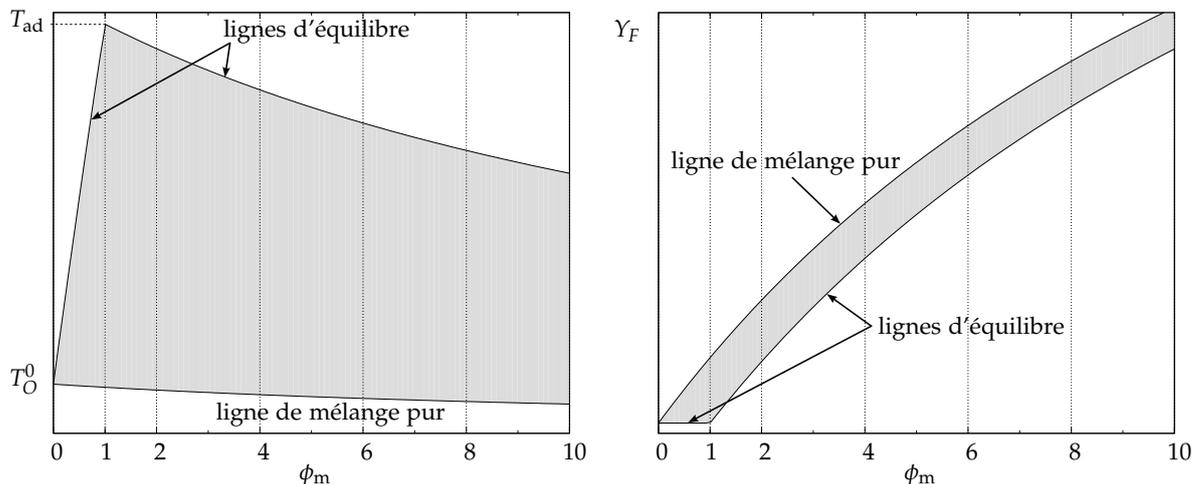


FIG. 1.4 | Structure d'une flamme de diffusion dans l'espace de richesse de mélange ϕ_m pour une chimie irréversible infiniment rapide (courbes d'équilibre) et pour un mélange pur inerte (courbe de mélange pur). Température (à gauche) et fraction massique de combustible (à droite).

1.3.1.3 Le régime de combustion partiellement prémélangé

Dans les configurations industrielles, il est rare que le régime de combustion soit purement prémélangé ou purement en flamme de diffusion. En général les réactifs sont injectés séparément, pour les raisons de sécurité déjà évoquées en régime de prémélangé. Du fait de la complexité des écoulements dans lesquels a lieu la combustion, les réactifs se mélangent progressivement, évidemment plus rapidement dans les écoulements turbulents, que dans les écoulements laminaires. On obtient donc un mélange inhomogène de réactifs, qui brûle plus ou moins en flamme de diffusion ou en prémélangé en fonction de l'état local du mélange, de la richesse et de la température. La combustion est donc très souvent partiellement prémélangée dans ces configurations. Pour la modélisation, ce régime rend inutilisables les modèles dédiés au régime de prémélangé ou de flamme de diffusion. Des méthodes spécifiques doivent alors être développées. Plus de détails sur la structure de ces flammes sont données par Savre [26], Rullaud [28] et Peters [25].

1.3.2 Mécanismes chimiques

Pour l'étude théorique des régimes de combustion, la simplification de la chimie à une seule réaction irréversible (1.51) est très courante car elle permet d'en déduire des résultats analytiques simples pour la compréhension de la structure des flammes et leur modélisation. Cependant, la réalité est tout autre, puisque la combustion fait intervenir une chimie très complexe avec jusqu'à plusieurs centaines d'espèces ainsi que des radicaux, et plusieurs milliers de réactions. On peut citer par exemple le mécanisme de Dagaut et Cathonnet [29] pour le kérosène, comportant 209 espèces et 1673 réactions. Certains codes de recherche dédiés à la simulation d'un certain type de flamme (comme par exemple PREMIX [30] pour les flammes prémélangées) sont capables de traiter un grand nombre d'espèces et de réactions pour l'étude détaillée des flammes simples. Mais les codes à vocation industrielle comme CEDRE utilisent des schémas numériques adaptés au traitement des configurations complexes, mais dont le coût de calcul devient prohibitif dès que le nombre d'espèces à traiter atteint un certain seuil. Il est donc nécessaire de réduire le nombre d'espèces transportées tout en reproduisant correctement les principales grandeurs globales de la flamme :

- la vitesse de flamme laminaire ;
- la température de fin de combustion ;
- la composition des gaz brûlés à l'équilibre.

Dans ce cadre, les mécanismes globaux sont encore couramment utilisés lors de la simulation d'écoulements turbulents réactifs dans un cadre industriel. Ils comportent toutefois deux défauts majeur :

- ils conduisent à une surestimation de la température adiabatique de fin de combustion et de la vitesse de flamme laminaire dans le domaine de richesse $\phi > 1$ (voir par exemple la mise en évidence de ce comportement par Albouze [31]) ;
- ils ne sont pas adaptés à la modélisation de la formation d'espèces polluantes minoritaires puisqu'ils sont basés uniquement sur un jeu d'espèces majoritaires très réduit.

C'est pourquoi différentes méthodes de réduction de schémas cinétiques ont été développées et constituent des alternatives aux mécanismes globaux plus précises et moins coûteuses que les schémas détaillés. Savre [26] en a fait l'état de l'art, et Warnatz *et al.* [32] en donnent des éléments supplémentaires. Les travaux de la présente étude ont nécessité la description de la formation d'espèces minoritaires, et des précurseurs des suies (voir partie II), ainsi que l'utilisation d'un mécanisme pour la combustion du kérosène peu coûteux mais suffisamment précis, notamment pour la prédiction des niveaux de température dans la flamme. Pour cette raison, on détaille dans la suite de cette section la méthode de tabulation FPI utilisée pour la prédiction des précurseurs de suies, ainsi que la méthode PEA d'ajustement de mécanismes cinétiques réduits, utilisée pour la combustion du kérosène.

1.3.2.1 Modélisation d'un schéma cinétique

On introduit tout d'abord les notations et les relations qui permettent de traiter n'importe quel schéma cinétique dans CEDRE, le but étant de formuler le terme source chimique $\dot{\omega}_k$ de l'équation de conservation des espèces (1.1) et son équivalent filtré $\overline{\dot{\omega}_k}$ de l'équation (1.32). Si l'on considère un schéma composé de n_r réactions élémentaires faisant intervenir n_e espèces différentes, on peut écrire chaque équation r du schéma sous la forme dite de Penner :

$$\sum_{k=1}^{n_e} \nu'_{kr} \mathcal{E}_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{n_e} \nu''_{kr} \mathcal{E}_k, \quad r \in \{1, \dots, n_r\}, \quad (1.71)$$

où v'_{kr} et v''_{kr} représentent respectivement les coefficients stœchiométriques directs et inverses liés à l'espèce \mathcal{E}_k pour la réaction r . La théorie cinétique des gaz, via la loi d'action de masse permet d'écrire le terme source de l'espèce \mathcal{E}_k tenant compte de l'ensemble des réactions dans lesquelles elle intervient [20] :

$$\dot{\omega}_k = \mathcal{M}_k \sum_{r=1}^{n_r} (v''_{kr} - v'_{kr}) \left(\mathcal{K}_r^f \prod_{k=1}^{n_e} C_k^{v'_{kr}} - \mathcal{K}_r^b \prod_{k=1}^{n_e} C_k^{v''_{kr}} \right), \quad (1.72)$$

où \mathcal{K}_r^f et \mathcal{K}_r^b représentent les vitesses de réaction directe (*forward*) et inverse (*backward*), et $C_k = \rho Y_k / \mathcal{M}_k$ la concentration de l'espèce k . On introduit également les exposants \tilde{v} dits exotiques, qui peuvent différer des coefficients stœchiométriques pour des schémas cinétiques très réduits pour lesquels des ajustements sont nécessaires. Lorsqu'aucun exposant exotique n'est précisé, on revient alors à la forme théorique telle que $\tilde{v} = v$.

Les vitesses de réaction \mathcal{K}_r^i ($i = f$ ou b) sont la plupart du temps exprimées sous la forme de la loi d'Arrhenius-Kooij (1.73), qui fait intervenir la constante pré-exponentielle A_r^i , l'exposant de température $\beta_r^i \leq 0$ et soit l'énergie d'activation E_{Ar}^i soit la température d'activation $T_{Ar}^i = E_{Ar}^i / R$.

$$\mathcal{K}_r^i = A_r^i T^{\beta_r^i} \exp \left(-\frac{E_{Ar}^i}{RT} \right). \quad (1.73)$$

Cependant, ces paramètres ne sont généralement donnés que pour la vitesse de réaction directe. La vitesse inverse doit être recalculée à partir de la constante d'équilibre \mathcal{K}_r^c de la réaction [20] (en supposant qu'il n'y a pas d'exposant exotique) :

$$\mathcal{K}_r^b(T) = \frac{\mathcal{K}_r^f(T)}{\mathcal{K}_r^c(T)} = \mathcal{K}_r^f(T) \left(\frac{p_0}{RT} \right)^{-\sum_{k=1}^{n_e} (v''_{kr} - v'_{kr})} \exp \left(\frac{\Delta H_r^0}{RT} - \frac{\Delta S_r^0}{R} \right), \quad (1.74)$$

où $p_0 = 1$ bar, et ΔH_r^0 et ΔS_r^0 sont respectivement les variations d'enthalpie et d'entropie du mélange lors du passage des réactifs aux produits. Dans la chaîne CEDRE, ce calcul est réalisé en pré-traitement et la fonction $\mathcal{K}_r^b(T)$ déduite est mise sous la forme de la loi d'Arrhenius-Kooij (1.73), dont les paramètres sont déterminés par régression pour une utilisation ultérieure au cours de la simulation.

Dans le cadre des calculs d'écoulements réactifs turbulents des chapitres 6 et 7, aucun modèle d'interaction chimie-turbulence n'a été utilisé en RANS ou en LES. On évalue donc $\tilde{\omega}_k = \dot{\omega}_k$ directement à partir des grandeurs filtrées.

1.3.2.2 Méthode d'ajustement PEA

Des mécanismes très réduits, comportant moins d'une dizaine de réactions, ont été développés de manière à reproduire correctement quelques aspects particuliers de la combustion choisis *a priori* (délai d'allumage, vitesse de flamme par exemple), au moyen d'ajustements des paramètres des réactions, c'est-à-dire des constantes d'Arrhenius. Les mécanismes de Westbrook et Dryer [33] pour le kérosène (1 étape/5 espèces ou 2 étapes/6 espèces) sont représentatifs de cette approche. Ils sont cependant dans l'incapacité de reproduire la décroissance de la vitesse de flamme laminaire S_L à la stœchiométrie ainsi que pour les richesses supérieures, ce qui est problématique dans un foyer aéronautique. La combustion dans ce genre de dispositif intervient en effet sur un large intervalle de richesse, du mélange très pauvre à très riche, et l'erreur sur S_L autorise la combustion de zones très riches qui devraient normalement ne pas brûler. Les conséquences sont importantes sur la prédiction des polluants par exemple.

Afin de conserver des mécanismes réactionnels très simples, mais dont le domaine de validité est élargi, de nouvelles approches utilisant des fonctions de correction — dépendant explicitement de la richesse locale de mélange ϕ_m — ont été développées. C'est le cas par exemple du mécanisme global proposé par Fernández-Tarrazo *et al.* [34], qui propose de faire dépendre A_r^f et T_{Ar}^f de la richesse. Lorsque les fonctions de corrections ne sont appliquées qu'aux constantes pré-exponentielles, on parle de mécanisme de type PEA (*Pre-Exponential Adjusted*). C'est le cas du mécanisme réduit à 2 étapes de Franzelli *et al.* [35] pour la combustion kérosène/air. La modélisation de l'équilibre CO-CO₂ par la deuxième étape est déterminante pour la bonne estimation de la température adiabatique de fin de combustion pour $\phi \in [1; 1,5]$, à la différence d'une cinétique globale (à une seule étape) qui ne l'estime correctement que pour $\phi < 1$.

La vitesse de réaction directe d'une réaction r d'un schéma cinétique PEA s'écrit alors, en reprenant la relation (1.73) :

$$\mathcal{K}_r^f = f_r(\phi_m) A_r^f T^{\beta_r^f} \exp\left(-\frac{E_{Ar}^f}{RT}\right), \quad (1.75)$$

où $f_r(\phi_m)$ est la fonction de correction de la réaction r .

Or la richesse de mélange ϕ_m est fonction exclusivement de la fraction de mélange Z , d'après la relation (1.60). La définition (1.62) établie pour un mécanisme global n'est pas valable pour un mécanisme à plusieurs étapes, Z n'étant plus dans ce cas un traceur de mélange. Peters [25] définit de manière plus générale la fraction de mélange en fonction de la composition atomique qui est indépendante de l'avancement de la cinétique, ce qui n'est pas le cas de la composition des espèces. Pour cela, on définit les fractions massiques atomiques Y_l , où $l \in \{C, H, O, N\}$:

$$Y_l = \sum_{k=1}^{n_e} \mu_k^l \frac{M_l}{M_k} Y_k, \quad (1.76)$$

où μ_k^l est le nombre d'atomes l dans l'espèce k . On peut montrer que ces fractions massiques atomiques sont solutions d'équations de transport sans terme source. Ce sont donc par définition des traceurs de mélange, notés $Z_l \equiv Y_l$. On peut les normaliser sous la forme :

$$Z = \frac{Z_l - Z_l^O}{Z_l^F - Z_l^O}. \quad (1.77)$$

Tous ces traceurs de mélange sont équivalents et égaux, moyennant l'hypothèse que toutes les espèces diffusent de la même façon. On peut en construire d'autres en utilisant n'importe quelle combinaison linéaire des Y_l .

Pour être assez général, on définit un traceur de mélange prenant en compte l'atome d'hydrogène : $Z_{CH} = Z_C + Z_H$. Pour les applications spatiales, le combustible peut en effet être de l'hydrogène. Le traceur normalisé s'écrit alors :

$$Z = \frac{Z_C + Z_H}{Z_C^F + Z_H^F}, \quad (1.78)$$

car il n'y a ni carbone ni hydrogène côté oxydant, soit $Z_{CH}^O = 0$.

1.3.2.3 Tabulation de la chimie détaillée

Une alternative à l'utilisation de schémas cinétiques réduits consiste à tabuler la chimie détaillée de flamme élémentaire, pour ensuite réutiliser ces données dans des

configurations plus complexes. Savre [26] donne un état de l'art de ces méthodes, brièvement repris ici. L'une des premières méthodes est la méthode ILDM (*Intrinsic Low Dimensional Manifold*) (Maas et Pope [36]), qui repose sur la comparaison des divers temps caractéristiques de la chimie dans un système réactif simplifié, le réacteur homogène. Pour lever certaines limitations de cette méthode empêchant son application dans le domaine industriel, des méthodes de tabulations basées sur un cas plus complexe que le réacteur homogène, la flamme laminaire prémélangée, ont été développées. Cela a donné lieu aux méthodes FPI (*Flame Prolongation of ILDM*) [37] et FGM (*Flame Generated Manifold*) [38]. Le modèle FPI a été proposé par Gicquel *et al.* [37] pour la modélisation de la combustion partiellement prémélangée, en tabulant les fractions massiques d'espèces, leur terme source ainsi que la température en fonction de deux variables : une variable d'avancement c caractérisant l'état d'avancement de la combustion à travers la flamme, et Z une fraction de mélange qui caractérise la richesse du mélange réactif. Cette méthode a ensuite été étendue aux flammes non adiabatiques par Fiorina *et al.* [39] en ajoutant un troisième paramètre, l'enthalpie totale du mélange.

Pour ses travaux de thèse, Savre [26] a choisi la méthode FPI et l'a implantée dans CEDRE, pour la simulation numérique de la combustion turbulente et la prédiction des émissions polluantes. Cette méthode est reprise dans cette étude, pour la simulation de flammes 1D laminares prémélangées dans le chapitre 4 et l'annexe B. C'est pourquoi on décrit dans la suite de cette section le principe de la méthode mise en œuvre par Savre [26].

Principe de la méthode

La figure 1.5 décrit schématiquement le principe de la méthode. La première étape de sa mise en œuvre consiste à construire la table, en calculant des flammes 1D laminares prémélangées avec un schéma cinétique détaillé. Comme l'utilisation qui est faite de la méthode FPI dans la suite de l'étude est restreinte à la combustion laminaire purement prémélangée (pas d'inhomogénéités de richesse), on ne parlera pas ici de la dimension supplémentaire z nécessaire au partiellement prémélangé, ni de l'adaptation de la méthode FPI à la combustion turbulente. Une seule flamme sert donc à la construction de la table.

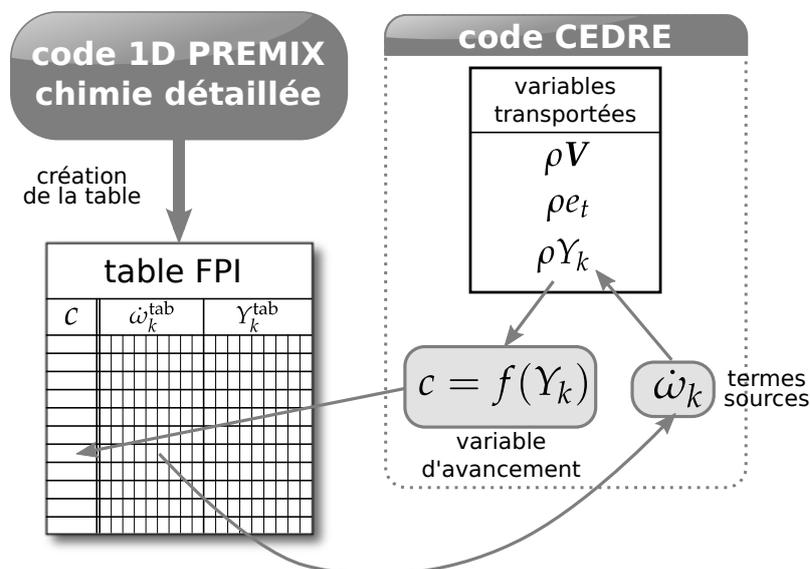


FIG. 1.5 | Schéma de principe de la méthode FPI telle qu'elle est couplée à CEDRE.

Ce cas d'application est calculé avec CEDRE, qui transporte un jeu réduit d'espèces choisies, qui se limite aux espèces majoritaires en terme de masse et de dégagement de chaleur. À partir des fractions massique de certaines espèces, on calcule la variable d'avancement c , dont la valeur correspond à un état thermochimique unique et à des termes sources associés. Ces termes sources sont ainsi transmis à CEDRE pour leur utilisation dans les équations de transport des espèces. À l'issue du calcul, on dispose des fractions massiques des espèces transportées Y_k et de celles des espèces tabulées Y_k^{tab} . Pour une espèce bien corrélée à la variable d'avancement, la fraction massique dans la table Y_k^{tab} peut suffire à l'obtention d'un résultat précis. Dans le cas contraire, il est nécessaire de résoudre l'équation de transport de cette espèce pour calculer sa concentration de façon précise.

Le couplage de la méthode FPI avec le code CEDRE réalisé par Savre [26] peut être qualifié d'indirect, car il consiste à transporter des espèces dans le code CFD et à interpoler leur terme source dans la table. Une autre forme de couplage, plus directe, consiste à transporter la variable d'avancement c plutôt que des espèces. On interpole alors directement dans la table les fractions massiques ainsi que, dans certains cas, la température. Le couplage indirect a été choisi parce qu'il convient mieux à un code CFD généraliste tel que CEDRE qui traite une vaste gamme d'écoulements de type industriel à l'aide de solveurs dédiés à la caractérisation de divers phénomènes physiques tel que le transport de particules liquides. Pour coupler ces solveurs entre eux, il est plus approprié de transporter des fractions massiques d'espèces. Le couplage indirect est ainsi moins intrusif. Cependant, cette méthode de couplage souffre d'un défaut de cohérence entre les espèces chimiques transportées et la chimie tabulée, ce qui peut mener à l'apparition de fractions massiques négatives ou à une dérive de la composition à l'équilibre [31]. C'est pourquoi Savre [26] a mis au point une méthode de correction des termes sources interpolés, basée sur l'étude de la réponse des termes sources interpolés soumis à des perturbations chimiques, en fonction de la composition chimique du mélange (voir aussi Savre *et al.* [40]). Notons que Colin *et al.* [41] ont proposé une alternative consistant à reconstruire les termes sources des espèces transportées directement à partir des fractions massiques tabulées, ce qui évite les dérives.

Il reste à détailler le choix de la variable d'avancement, et la construction de la table en elle-même. Ces précisions sont données en annexe B.

Choix de la variable d'avancement

Pour pouvoir repérer l'état d'avancement local de la combustion dans une flamme laminaire 1D prémélangée, à partir des fractions massiques des espèces transportées, on introduit la variable d'avancement c dont chaque valeur doit correspondre à un état thermochimique unique dans la table (fonction bijective). Elle doit donc varier de façon continue monotone à travers la flamme, et est généralement normalisée. Le choix de Savre [26] pour la définition de c est repris ici, s'appuyant sur les travaux de Fiorina *et al.* [39] et de Rullaud [28]. Il en ressort la définition suivante :

$$c = \frac{Y_{\text{CO}_2} + Y_{\text{CO}}}{Y_{\text{CO}_2}^{\text{eq}} + Y_{\text{CO}}^{\text{eq}}}, \quad (1.79)$$

qui permet de tenir compte de la dissociation CO/CO₂ à richesse élevée. Les grandeurs Y_i^{eq} désignent ici les fractions massiques prises à l'équilibre. En pratique, elles sont prises égales aux valeurs situées le plus en aval dans la flamme 1D tabulée. Une telle variable d'avancement varie de 0 dans les gaz frais à 1 dans les gaz brûlés à l'équilibre.

Construction de la table

La table est construite par tabulation des résultats obtenus en calculant une flamme monodimensionnelle laminaire prémélangée. Pour cela le code PREMIX [30] dédié à la résolution de ce type de problème, et capable de mettre en œuvre des schémas cinétiques très détaillés, a été utilisé. Il contient des modèles avancés pour décrire le transport des espèces et la dépendance des réactions chimiques vis-à-vis de la pression. En particulier, la modélisation des flux de diffusion repose sur la relation de Hirschfelder et Curtiss [42] basée sur les coefficients de diffusion binaires des espèces, et prend en compte les effets liés aux gradients de température (effet Soret). Plus de détails sont donnés dans les manuels du package CHEMKIN.

Une fois les résultats obtenus (fractions massiques, termes sources et température), ils sont projetés sur un nouveau maillage en c qui redistribue de façon pertinente les points dans l'espace des phases (l'espace dont les coordonnées sont les concentrations des diverses espèces), paramétré par c , afin de minimiser les erreurs faites lors de l'interpolation des termes sources dans la table. Ce maillage est raffiné dans la zone de production des radicaux intermédiaires, localisée par le pic de Y_{OH} , cette zone étant le lieu des plus forts gradients.

1.4 COMBUSTION TURBULENTE

On montre dans cette section les objectifs et les moyens d'étude de la combustion turbulente et on évoque les techniques de sa modélisation, de manière non-exhaustive. Le but est de mettre en évidence l'étendue de ce domaine d'étude et de situer les différentes familles de modèles qui sont rencontrés dans les états de l'art du chapitre 3 et 7. Des ouvrages et des articles plus exhaustifs sont consacrés à la combustion turbulente, comme Peters [25], Veynante et Vervisch [43] ou Borghi et Champion [44].

1.4.1 Problématique

Phénoménologiquement parlant, la modélisation de la combustion turbulente est nécessaire en LES car on ne peut pas actuellement résoudre la structure réelle de la flamme avec les tailles de maille accessibles pour un coût raisonnable. Dans les foyers aéronautiques, la taille de maille est de l'ordre du millimètre alors que l'épaisseur du front de flamme à discrétiser est de l'ordre de 0,1 mm.

Partant de l'expression des termes sources d'espèces obtenus en conditions laminares, exprimés suivant la relation (1.72), on cherche alors à calculer leur valeur filtrée $\overline{\dot{\omega}_k}$. On sait que $\dot{\omega}_k$ est fortement non-linéaire par rapport à la température à cause du terme exponentiel de la loi d'Arrhenius (1.73). Son filtrage fait apparaître de nombreuses corrélations entre les fluctuations Y_k'' et T'' , ce qui complique largement la modélisation. Pour surmonter cette difficulté, les termes sources filtrés $\overline{\dot{\omega}_k}$ sont évalués à partir de modèles basés sur des considérations phénoménologiques, le régime de combustion en particulier. Ces aspects sont détaillés notamment par Peters [25] et, avant lui, Borghi et Champion [44].

1.4.2 Modélisation de la combustion turbulente

De nombreux modèles de combustion turbulente ont été élaborés, sur la base des régimes identifiés dans les sections précédentes. L'hypothèse des flammelettes est généralement faite par ces modèles, ce qui permet de réduire localement la flamme turbulente plissée au cas simple de la flamme laminaire. On donne dans la suite de cette

section un bref aperçu des familles de modèles existantes, inspiré de l'état de l'art fait par Savre [26] dans sa thèse.

Modèles algébriques

Les modèles algébriques sont les plus simples mais aussi les plus limités. Ils consistent à exprimer les termes sources d'espèces filtrés $\overline{\dot{\omega}_k}$ en fonction de grandeurs locales connues ou que l'on peut estimer facilement, comme les quantités sous-maille.

Modèles géométriques

On considère pour ces modèles que la flamme est d'épaisseur nulle. Le principe est de localiser le front de flamme défini comme une discontinuité entre gaz frais et gaz brûlés. Ils s'appliquent donc facilement aux flammes prémélangées.

Les modèles à G-équation repèrent le front de flamme par une valeur particulière G^* de G , G étant un traceur de front de flamme, soit une grandeur quelconque sans signification physique dont il faut résoudre une équation de transport.

Les modèles à densité de surface de flamme sont très ressemblants aux modèles à G-équation. Le traceur de front de flamme G est remplacé par une variable d'avancement c , transportée à travers la flamme. On montre alors que le terme source filtré de c peut s'exprimer en fonction de Σ , densité de flamme, qui peut être évaluée algébriquement ou par la résolution d'une équation de transport pour Σ .

Il existe à l'inverse des modèles comme PaSR et EPaSR où la combustion est répartie sur le volume (ou une partie) de la maille.

Modèles statistiques

Les modèles statistiques ont pour but la description des états intermédiaires dans le front de flamme, et peuvent être adaptés au régime prémélangé ou au régime de diffusion. Pour cela, on introduit une fonction densité de probabilité (PDF pour *Probability Density Function*) $\tilde{P}(\varphi^*, x, t)$ d'une grandeur de l'écoulement φ , qui quantifie la probabilité qu'au point (x, t) , φ appartienne à l'intervalle $\left[\varphi^* - \frac{\Delta\varphi}{2}; \varphi^* + \frac{\Delta\varphi}{2}\right]$, cette probabilité étant égale à $\tilde{P}(\varphi^*, x, t)\Delta\varphi$. Dans le cadre d'un écoulement réactif, on considère le vecteur φ dont les N composantes sont les coordonnées spatiales, les concentrations d'espèces, la température et éventuellement le vecteur vitesse. On peut alors formuler le terme source filtré en fonction de la PDF jointe multidimensionnelle :

$$\overline{\dot{\omega}_k}(\mathbf{x}, t) = \int_{\varphi_1} \dots \int_{\varphi_N} \dot{\omega}_k(\varphi_1, \dots, \varphi_N) \tilde{P}(\varphi_1, \dots, \varphi_N, \mathbf{x}, t) d\varphi_1 \dots d\varphi_N. \quad (1.80)$$

L'estimation de cette PDF reste la principale difficulté de ce type d'approche. On réduit en général le nombre de variables dont dépend la PDF, la variable d'avancement c intervenant pour les flammes prémélangées, et la variable d'avancement Z pour les flammes de diffusion. Pour construire des modèles sur cette approche, deux solutions sont possibles pour estimer les PDF :

- (i) présumer la forme de la PDF et relier son comportement à des observations expérimentales ou numériques en DNS;
- (ii) résoudre une équation de transport pour la PDF jointe, ce qui est plus précis mais induit un coût de calcul supplémentaire et non négligeable. Comme aucune forme de la PDF n'est présumée, le modèle reste valide quel que soit le régime de combustion.

Modèles de flamme épaissie

À l'inverse des modèles géométriques, les modèles de flamme épaissie augmentent artificiellement l'épaisseur de la flamme de manière à permettre sa résolution avec le maillage LES.

On peut montrer [20] la relation de proportionnalité entre l'épaisseur de flamme et le coefficient de diffusion : $\delta_L \propto D/S_L$. Pour épaissir la flamme, on multiplie les coefficients de diffusion des espèces par un facteur F , pour donner à la flamme l'épaisseur $\delta_T = F\delta_L$, le coefficient F étant choisi pour que δ_T soit discrétisée par plusieurs cellules du maillage. Pour une flamme laminaire et une cinétique globale, on peut montrer la relation $S_L \propto \sqrt{D\bar{\omega}_F}$, qui implique de diviser le terme source $\dot{\omega}_F$ par F si on souhaite conserver la même vitesse de flamme laminaire S_L après épaississement.

En régime turbulent, l'épaississement de la flamme a pour effet de réduire son plissement, puisque que la flamme est moins perturbée par la turbulence, de par la relation suivante :

$$\frac{\mathcal{L}}{\delta_T} < \frac{\mathcal{L}}{\delta_L} \quad (1.81)$$

Le dégagement de chaleur, directement lié à la surface de la flamme, est donc affecté. Pour compenser cet effet indésirable, une fonction d'efficacité E est introduite, modélisant le plissement de sous-maille. Le coefficient de diffusion de la flamme épaissie D_T et les termes sources d'espèces liés $\widetilde{\omega}_k$ s'expriment alors :

$$D_T = EFD, \quad (1.82)$$

$$\widetilde{\omega}_k = \frac{E}{F}\dot{\omega}_k. \quad (1.83)$$

Le terme source $\dot{\omega}_k$ est le terme source non filtré qui peut être évalué en utilisant directement les grandeurs filtrées \widetilde{T} , \widetilde{Y}_k car, après épaississement, les forts gradients initialement présents dans les mailles contenant le front de flamme se sont atténués

1.5 PHASE DISPERSÉE

On considère la modélisation du transport d'une phase dispersée, qui consiste dans cette étude en des gouttes liquides de kérosène, au sein d'une phase porteuse, assimilée la plupart du temps à la phase gazeuse. Dans cette étude, la phase dispersée est traitée par le solveur lagrangien SPARTE de la chaîne CEDRE, qui traite de manière statistique la phase dispersée, à la différence de l'approche eulérienne qui résout la phase dispersée avec les mêmes équations que pour la phase gazeuse. Dans cette section, on détaille brièvement les modèles utilisés pour décrire numériquement les phénomènes qui agissent sur les gouttes supposées sphériques, phénomènes liés aux transferts de masse et d'énergie entre les phases dispersée et porteuse. Des détails supplémentaires sont donnés dans le manuel CEDRE [45].

On s'intéresse au comportement d'un spray de particules caractérisées par :

- leur position \mathbf{X} ;
- leur rayon r_p ;
- leur vitesse \mathbf{V}_p ;
- leur température T_p .

Cependant, dans la majorité des applications, le nombre de particules à décrire est trop grand pour pouvoir simuler le comportement individuel de chaque particule. On introduit alors la fonction densité de particules f_p permettant de décrire la phase dispersée de manière statistique. Par définition, $f_p(t, \mathbf{X}, \mathbf{V}_p, r_p, T_p)d\mathbf{X}d\mathbf{V}_pdr_pdT_p$ est le

nombre moyen de particules situées à l'instant t , dans l'hypervolume $d\mathbf{X}d\mathbf{V}_p dr_p dT_p$ autour du point de coordonnées $(\mathbf{X}, \mathbf{V}_p, r_p, T_p)$ de l'espace des phases. On peut montrer que f_p vérifie l'équation suivante :

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{X}} \cdot (f_p \mathbf{V}_p) + \nabla_{\mathbf{V}_p} \cdot \left(\frac{\mathbf{F}}{m_p} f_p \right) + \frac{\partial \mathcal{R} f_p}{\partial r_p} + \frac{\partial \mathcal{T} f_p}{\partial T_p} = Q_{\text{frag}}(f_p), \quad (1.84)$$

où F est la force agissant sur une particule et m_p sa masse. Cette dernière s'exprime en fonction de sa masse volumique ρ_p et de son rayon r_p :

$$m_p = \frac{4}{3} \pi \rho_p(T) r_p^3. \quad (1.85)$$

Notons que les notations $\nabla_{\mathbf{X}}$ et $\nabla_{\mathbf{V}_p}$ désignent respectivement les gradients par rapport aux coordonnées cartésiennes de la goutte et à sa vitesse. Les termes \mathcal{R} , \mathcal{T} et Q_{frag} sont respectivement le taux d'évaporation dr_p/dt , le taux d'échauffement dT_p/dt et l'opérateur modélisant la fragmentation des particules (ou gouttelettes). Ces termes doivent être modélisés, comme indiqué dans les sections suivantes.

L'équation (1.84) est résolue en approche lagrangienne, en décrivant l'ensemble des gouttes physiques par un nombre réduit N de gouttes numériques, chacune représentant un nombre n_i de gouttes physiques dont on fait l'hypothèse que les caractéristiques $(\mathbf{X}, \mathbf{V}_p, r_p, T_p)$ sont identiques. L'équation (1.84) se décompose alors en un système de 3 équations pour l'évolution de la vitesse, du rayon et de la température de la goutte numérique.

Le schéma 1.6 introduit les grandeurs nécessaires à la modélisation. On se place ici dans le cas où les particules sont des gouttes présentes dans la phase porteuse gazeuse, et entourées de vapeur issue de l'évaporation du liquide les constituant.

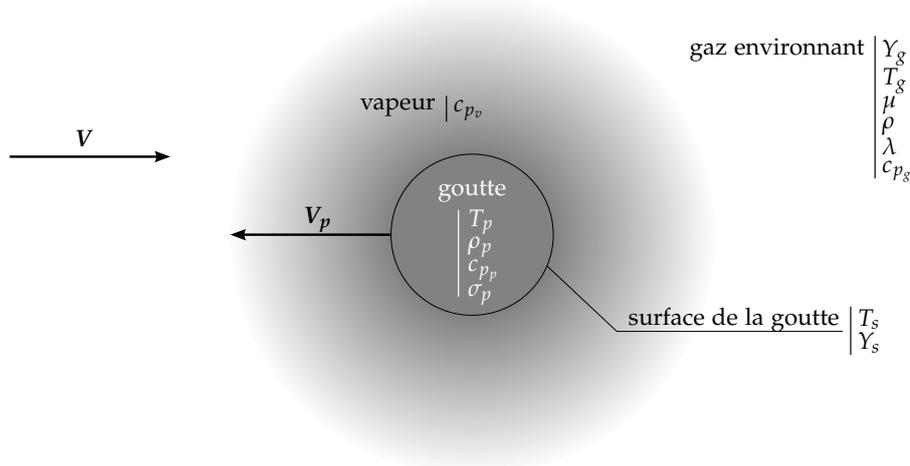


FIG. 1.6 | Schématisation du contexte de la modélisation des phénomènes liés à une goutte liquide dans une phase gazeuse.

1.5.1 Efforts exercés sur les particules

En supposant la masse volumique des particules grande devant celle du gaz, soit $\rho_p \gg \rho$, en négligeant l'effet de la gravité, la force F s'appliquant sur une particule est la force de traînée qui s'écrit :

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2} \pi \rho r_p^2 C_d \|\mathbf{V} - \mathbf{V}_p\| (\mathbf{V} - \mathbf{V}_p), \quad (1.86)$$

où V est la vitesse du gaz porteur. Le coefficient de traînée C_d peut être évalué de plusieurs manières. Pour l'application dans un foyer aéronautique, dans lequel la vitesse de l'écoulement est modérée, on utilise la loi de Schiller et Nauman :

$$C_d = \begin{cases} 24 \operatorname{Re}_p^{-1} (1 + 0,15 \operatorname{Re}_p^{0,687}) & \text{si } \operatorname{Re}_p \leq 1000, \\ 0,445 & \text{si } \operatorname{Re}_p > 1000, \end{cases} \quad (1.87)$$

où Re_p est le nombre de Reynolds particulaire défini par :

$$\operatorname{Re}_p = \frac{2\rho r_p \|V - V_p\|}{\mu}, \quad (1.88)$$

où μ est la viscosité dynamique du gaz.

1.5.2 Évaporation des particules

L'évaporation d'une gouttelette est modélisée par la loi classique du d^2 :

$$\frac{dr_p^2}{dt} = -\frac{\mu}{\rho_p} \frac{\operatorname{Sh}}{\operatorname{Sc}} \ln(1 + B_m), \quad (1.89)$$

où Sc est le nombre de Schmidt de l'espèce qui se vaporise, Sh le nombre de Sherwood qui représente le transfert de masse entre la vapeur à la surface de la goutte et l'infini, et B_m le nombre de Spalding dont l'évaluation est fonction du cas de figure. Pour traiter des gouttelettes s'évaporant dans un mélange idéal de gaz incondensable et de vapeur des gouttes, le nombre de Spalding s'exprime en fonction de la fraction massique de vapeur Y_s à la surface de la goutte et de celle dans le gaz environnant Y_g :

$$B_m = \frac{Y_s - Y_g}{1 - Y_s}. \quad (1.90)$$

Y_s est évalué en fonction de la température à la surface de la goutte T_s , de la pression de vapeur saturante et de la pression du gaz environnant, en supposant que la vapeur et le liquide sont à l'équilibre à la surface de la goutte. Cependant, un tel modèle ne s'applique pas aux cas denses où la phase gazeuse est composée exclusivement de la vapeur des gouttes. On cherchera donc à éviter une telle situation.

Par ailleurs, le nombre de Sherwood peut s'exprimer en fonction du nombre de Spalding par la relation :

$$\operatorname{Sh} = 2 \left(\frac{r_p}{\delta_M} + 1 \right) \frac{\ln(1 + B_m)}{B_m}, \quad (1.91)$$

où δ_M est l'épaisseur de la couche limite dynamique autour de la goutte. Celle-ci résulte des effets de convection, liés au mouvement relatif de la goutte par rapport au gaz, sur le taux d'évaporation de la goutte. On utilise la corrélation de Ranz-Marshall pour l'évaluer :

$$\frac{2r_p}{\delta_M} = 0,57 \operatorname{Re}_p^{1/2} \operatorname{Sc}^{1/3}. \quad (1.92)$$

1.5.3 Chauffage des particules

Pour modéliser les échanges de chaleur entre la phase gazeuse et la phase dispersée, on utilise un modèle de conduction infinie dans les particules, qui suppose que la température est uniforme dans les particules à chaque instant, d'où $T_p = T_s$, ce qui

permet de calculer le nombre de Spalding B_m lorsque la température de la goutte est déterminée. On déduit cette température du bilan d'énergie pour la goutte :

$$m_p c_{p_p} \frac{dT_p}{dt} = 2\pi \text{Nu}_p \lambda r_p (T_g - T_p) + \frac{dm_p}{dt} L_v(T_p), \quad (1.93)$$

où c_{p_p} est la chaleur massique à pression constante du liquide, λ la conductivité du gaz, T_g sa température, $\frac{dm_p}{dt}$ le taux d'évaporation massique déduit de l'équation (1.89) et L_v la chaleur latente de vaporisation du liquide.

Le nombre de Nusselt Nu_p associé aux échanges de chaleur gouttes-gaz s'exprime ainsi :

$$\text{Nu}_p = 2 \left(\frac{r_p}{\delta_T} + 1 \right) \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T}, \quad (1.94)$$

où δ_T est l'épaisseur de la couche limite thermique à la surface de la goutte. Le coefficient B_T , assimilable à un nombre de Spalding thermique, permet de tenir compte de l'influence de l'évaporation sur le flux de chaleur entre le gaz et la goutte, et le rapport r_p/δ_T représente les effets convectifs dus au mouvement relatif gaz-goutte. La corrélation de Ranz-Marshall est utilisée, par analogie avec (1.92) :

$$\frac{2r_p}{\delta_T} = 0,57 \text{Re}_p^{1/2} \text{Pr}^{1/3}. \quad (1.95)$$

Le coefficient B_T s'exprime en fonction du nombre de Spalding massique :

$$B_T = (1 + B_m)^\Phi - 1 \quad \text{avec} \quad \Phi = \frac{c_{p_v}}{c_{p_g}} \frac{1 + \frac{r_p}{\delta_M}}{1 + \frac{r_p}{\delta_T}} \text{Le}, \quad (1.96)$$

où c_{p_v} est la chaleur massique de la vapeur, et c_{p_g} celle du gaz avoisinant.

1.5.4 Fragmentation secondaire

Lorsque le différentiel de vitesses entre le gaz et la goutte est trop élevé, les contraintes aérodynamiques subies par la goutte peuvent provoquer sa déformation, jusqu'à sa rupture : c'est le phénomène de fragmentation secondaire. La modélisation de ce phénomène s'appuie sur de nombreux travaux expérimentaux qui ont permis de formuler des corrélations assez précises.

On peut formuler le terme de fragmentation de l'équation (1.84) de la façon suivante :

$$Q_{\text{frag}}(f_p, \mathbf{V}_p, r_p) = -v^{\text{bup}}(\mathbf{V}_p, r_p) + \int v^{\text{bup}}(\mathbf{V}_p^*, r_p^*) g^{\text{bup}}(\mathbf{V}_p, r_p, \mathbf{V}_p^*, r_p^*) f_p(\mathbf{V}_p^*, r_p^*) d\mathbf{V}_p^* dr_p^* \quad (1.97)$$

où v^{bup} est la fréquence moyenne de fragmentation, et $g^{\text{bup}}(\mathbf{V}_p, r_p, \mathbf{V}_p^*, r_p^*) d\mathbf{V}_p^* dr_p^*$ représente le nombre de gouttelettes situées dans un hypervolume $d\mathbf{V}_p^* dr_p^*$ centré au point (\mathbf{V}_p, r_p) , produites par fragmentation d'une goutte initiale de vitesse \mathbf{V}_p^* et de rayon r_p^* .

Expérimentalement, on constate que la fragmentation ne peut se produire qu'à partir d'un nombre de Weber critique We_c atteint par la goutte, le nombre de Weber comparant les forces aérodynamiques à la tension superficielle σ_p :

$$We = \frac{2\rho r_p \|\mathbf{V}_p - \mathbf{V}\|^2}{\sigma_p}. \quad (1.98)$$

La fréquence moyenne de fragmentation s'exprime alors suivant le nombre de Weber de la goutte :

$$v^{\text{bup}}(\mathbf{V}_p, r_p) = 0 \quad \text{si} \quad We < We_c, \\ v^{\text{bup}}(\mathbf{V}_p, r_p) = \frac{1}{\tau^{\text{bup}}(\mathbf{V}_p, r_p)} \quad \text{si} \quad We \geq We_c. \quad (1.99)$$

où τ^{bup} représente le temps caractéristique nécessaire aux déformations pour rompre la goutte, et dépend entre autres du nombre de Weber. En général, le nombre de Weber critique vaut $We_c = 12$, valeur utilisée pour cette étude.

Par ailleurs, les expériences montrent que le mode de fragmentation d'une goutte, et donc les caractéristiques des gouttes créées, dépendent très fortement du nombre de Weber au moment de la rupture. On adopte ici une approche globale, sans distinguer les différents régimes existants. En ce qui concerne la fonction de densité g^{bup} qui pilote le processus de fragmentation, on décorrèle la dépendance en rayon et la dépendance en vitesse :

$$g^{\text{bup}}(\mathbf{V}_p, r_p, \mathbf{V}_p^*, r_p^*) = g_r^{\text{bup}}(r_p, \mathbf{V}_p^*, r_p^*) g_v^{\text{bup}}(\mathbf{V}_p, r_p, \mathbf{V}_p^*, r_p^*) \quad (1.100)$$

Un modèle simple choisi ici consiste à supposer que g_r^{bup} suit une loi exponentielle. Elle dépend également du nombre de Weber. Pour rester bref, les expressions de g_r^{bup} , g_v^{bup} et τ^{bup} ne sont pas détaillées ici. On les retrouve dans le manuel CEDRE [45].

1.5.5 Couplage avec la phase gazeuse

L'influence de la phase dispersée sur la phase gazeuse est traitée par l'intermédiaire de termes sources (ou taux d'échange) présents aux seconds membres des équations de transport de l'espèce vapeur (1.1), de quantité de mouvement (1.6) et d'énergie totale (1.9).

En notant $\frac{dm_p}{dt} = \dot{m}_p$, le taux d'échange de masse de l'équation de transport de l'espèce vapeur s'écrit :

$$S_k^d = - \int \dot{m}_p f_p d\mathbf{V}_p dr_p dT_p. \quad (1.101)$$

Le taux d'échange de quantité de mouvement s'écrit de la même façon :

$$S_{\text{qdm}}^d = - \int \frac{dm_p \mathbf{V}_p}{dt} f_p d\mathbf{V}_p dr_p dT_p, \quad (1.102)$$

et prend en compte la réaction des particules sur le gaz ainsi que la quantité de mouvement de la vapeur produite par évaporation. Enfin, le taux d'échange d'énergie s'écrit de manière compacte :

$$S_{e_t}^d = - \int \left[\frac{1}{2} \frac{d(m_p \mathbf{V}_p^2)}{dt} + m_p c_{p_p} \frac{dT_p}{dt} + \dot{m}_p (h_v(T_p) - L_v(T_p)) \right] f_p d\mathbf{V}_p dr_p dT_p, \quad (1.103)$$

où $h_v(T_p)$ désigne l'enthalpie de la vapeur à la température T_p . Ce taux d'échange inclut le travail de la force de traînée, la chaleur fournie pour chauffer et vaporiser le liquide, et l'enthalpie totale de la vapeur créée.

1.5.6 Modèle aux parois

On détaille ici les modèles aux parois ayant servi dans les calculs réalisés dans cette étude.

Modèle de rebond fusant

Une goutte impactant la paroi à la vitesse \mathbf{V}_p rebondit en prenant la direction de vecteur unitaire \mathbf{k} qui forme avec la paroi un angle θ choisi aléatoirement entre les valeurs prescrites θ_{\min} et θ_{\max} . La vitesse après rebond s'écrit :

$$\mathbf{V}'_p = \zeta^{\frac{1}{2}} \|\mathbf{V}_p\| \mathbf{k}, \quad (1.104)$$

où ξ est le coefficient de restitution énergétique prescrit. Ce modèle très simple remplace à défaut la modélisation du film liquide pouvant se former en paroi, pour $\xi \simeq 0,1$, et θ_{\min} et θ_{\max} petits (entre 1° et 2°).

Modèle d'interaction complexe

Ce type de modèle a pour but de traiter de manière réaliste l'impact d'une goutte sur une paroi solide, en tenant compte des propriétés de la paroi et de la goutte avant l'impact. Un modèle a été développé pour les gouttes liquides par distinction de trois régimes d'interaction possibles : le régime de dépôt, d'éclaboussement et de rebond (sur paroi chaude). Les frontières entre ces régimes ont été déterminées à partir d'un grand nombre de données expérimentales. Elles sont caractérisées par le nombre de Mundo-Sommerfeld-Tropea défini par $K = We Oh^{-0.4}$, où Oh est le nombre d'Onhesorge défini par :

$$Oh = \mu_p (2\rho_p \sigma_p r_p)^{-1/2}, \quad (1.105)$$

où μ_p est la viscosité dynamique du liquide de la goutte. Les limites présentées ci-dessous correspondent aux seuils d'apparition de l'éclaboussement, en-dessous duquel la goutte se dépose totalement. Au-dessus, dans le régime d'éclaboussement, la masse déposée sur la paroi diminue avec K . Ces seuils sont dépendants des conditions de paroi imposées par l'utilisateur (température et rugosité). Les limites utilisées sont les suivantes :

- $K_{01} = 3000$ sur une paroi froide, sèche et lisse ;
- $K_{02} = 12\,000$ sur une paroi recouverte d'un film épais ;
- $K_{02} = 650$ sur paroi froide, sèche et très rugueuse.

D'autre part, pour une paroi chaude et lisse, $K_1 = 450$ est le seuil de rebond, en-dessous duquel la goutte rebondit, ou se trouve dans le régime d'éclaboussement pour $K > K_1$.

1.5.7 Diamètres caractéristiques dans un spray de gouttes

Pour analyser les résultats issus de la simulation d'un grand nombre de gouttes (un spray), il convient de définir des grandeurs statistiques représentatives de la taille des gouttes. On peut définir des diamètres de gouttes caractéristiques D_{mn} d'un ensemble de N gouttes sur la base de la définition suivante :

$$D_{mn} = \frac{\sum_{i=1}^N (d_i)^m}{\sum_{i=1}^N (d_i)^n}, \quad (1.106)$$

où d_i est le diamètre de la goutte i . Le plus couramment, on utilise le diamètre moyen D_{10} :

$$D_{10} = \sum_{i=1}^N d_i, \quad (1.107)$$

ainsi que le diamètre moyen de Sauter D_{32} (aussi noté SMD pour *Sauter Mean Diameter*), proportionnel au rapport de la somme des volumes par la somme des surfaces :

$$D_{32} = \frac{\sum_{i=1}^N (d_i)^3}{\sum_{i=1}^N (d_i)^2}, \quad (1.108)$$

Ce diamètre est généralement caractérisé par les expérimentateurs.

1.6 MÉTHODES NUMÉRIQUES

On décrit dans cette partie les différents schémas et méthodes numériques utilisés pour mener à bien les calculs de combustion turbulente détaillés dans la partie III. Ces méthodes font partie intégrante du code CEDRE et ont été utilisées telles quelles. On distingue en particulier le traitement numérique de la discrétisation spatiale de celui de l'intégration temporelle. Ces aspects numériques sont présentés de manière succincte puisqu'ils ne rentrent pas dans le cadre d'étude de cette thèse. Néanmoins le lecteur pourra se référer à la thèse de Bertier [46] pour plus de détails.

1.6.1 Discrétisation spatiale

Le code CEDRE utilise une approche volumes finis dite cell-centered, dont les volumes de contrôle sont des polyèdres quelconques. La discrétisation spatiale permet de passer d'un système d'équations aux dérivées partielles, obtenu à partir des grands principes de la physique des milieux continus, à un système d'équations différentielles ordinaires. Celui-ci comporte un grand nombre d'équations qui est en proportion du nombre de mailles utilisées pour la discrétisation spatiale. Cette étape de discrétisation comprend l'interpolation des grandeurs aux interfaces, puis le calcul et le cumul des flux sur chaque face. Pour discrétiser les flux, on utilise :

- un schéma centré pour les flux dissipatifs ;
- une méthode MUSCL pour les flux hyperboliques.

La formulation volume finis mise en œuvre par CEDRE apparaît comme l'approche la plus répandue en mécanique des fluides. Elle présente un bon compromis entre le coût, l'occupation mémoire et la flexibilité et a le grand avantage d'être conservative par construction : en régime stationnaire, les débits de masse et d'enthalpie en entrée du système sont rigoureusement égaux aux débits de sortie. Son point de départ est de mener les bilans des quantités conservées au cours du temps sur chaque volume de contrôle de volume V_i . Dans le cas de la formulation cell-centered, les volumes de contrôle sur lesquels on effectue ces bilans coïncident avec les cellules du maillage. Les quantités conservées q_i définies par la relation (1.109) sont alors les quantités conservatives moyennes de la cellule.

$$q_i = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} q dV. \quad (1.109)$$

Dans le cas de la résolution des équations de Navier-Stokes, on peut traduire le bilan de q_i sur la cellule par la relation (1.110) :

$$V_i \frac{dq_i}{dt} = \sum_{j \in \mathcal{V}_i} [(\mathbf{f} \cdot \mathbf{An})_{i \leftarrow j} + (\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{An})_{i \leftarrow j}] + V_i \sigma_i, \quad (1.110)$$

où le premier terme du membre de droite désigne la somme sur les faces de la cellule i (voisinage \mathcal{V}_i) des flux hyperboliques \mathbf{f} et des flux dissipatifs $\boldsymbol{\varphi}$ à travers l'interface A entre la cellule i et la cellule j , de vecteur normal \mathbf{n} , et orientés de j vers i . Cette décomposition de flux permet d'appliquer sur les équations continues des schémas numériques de type différent selon la nature des flux considérés, comme précisé dans la suite de la section. Dans le cas des équations de Navier-Stokes, ces flux s'expriment par les relations (1.111) à partir des équations (1.1), (1.6) et (1.9) :

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \rho Y_k \mathbf{V} \\ \rho \mathbf{V} \otimes \mathbf{V} + p \mathbf{I} \\ \rho \mathbf{V} e_t + p \mathbf{V} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} -J_k \\ -\boldsymbol{\tau} \\ -\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{V} + q_h \end{bmatrix}, \quad (1.111)$$

avec V le vecteur vitesse, ρ la masse volumique, p la pression, I la matrice identité, e_t l'énergie totale, J_k le flux de diffusion de l'espèce k , τ le tenseur des contraintes visqueuses et q_h le flux de chaleur échangé. On exprime le vecteur des grandeurs primitives $u = (p, T, V, Y_k)^T$.

Pour calculer ces flux, il est d'abord nécessaire de déterminer les grandeurs dont ils dépendent, à savoir les grandeurs primitives u au niveau des faces ainsi que leur gradient ∇u . Dans des maillages non-structurés généraux, les cellules sont constituées de polyèdres quelconques. Pour pouvoir traiter ce type de maillage avec l'approche cell-centered, on choisit classiquement la face comme entité géométrique de base, puisqu'une face est toujours en contact avec seulement deux cellules, alors que les cellules peuvent posséder un nombre quelconque de faces.

1.6.1.1 Interpolation des grandeurs aux faces

Pour déterminer les grandeurs et leur gradient sur les faces des cellules avec un modèle d'interpolation linéaire par cellule, il faut d'abord déterminer le gradient moyen de maille, à l'aide de l'une des deux méthodes disponibles dans CEDRE :

- la méthode de Green nécessite une limitation du terme de courbure [46] ce qui rend le calcul du gradient non-consistant^(a) mais cette méthode est stable dans tous les cas ;
- la méthode des moindres carrés à l'avantage de toujours avoir un calcul du gradient consistant. Cependant, elle peut se révéler instable, notamment sur les maillages composés de tétraèdres.

Dans les calculs de chambre de combustion réalisés dans cette thèse, les maillages sont totalement composés de tétraèdres. On choisit donc la méthode de Green pour évaluer le gradient moyen dans les cellules.

Pour évaluer les grandeurs de part et d'autre des interfaces à partir des valeurs moyennes dans les cellules, on utilise une discrétisation d'ordre deux, en adoptant une représentation linéaire des grandeurs par cellule. On applique également le limiteur de Van Leer, largement utilisé car très polyvalent, afin de garantir la monotonie. Ces aspects sont développés dans la sous-section suivante. On peut ensuite évaluer les grandeurs sur l'interface par moyenne arithmétique des grandeurs de part et d'autre, ou par moyenne décentrée. L'évaluation des gradients à l'interface est quant à elle plus complexe dans le contexte d'une discrétisation non-structurée. Une approche originale développée par Leterrier [47] est utilisée ici. Elle consiste à évaluer le gradient d'interface à partir du gradient évalué au point de courbure de la face, lui-même évalué avec la moyenne barycentrique des gradients moyens de maille des deux cellules voisines.

1.6.1.2 Calcul des flux numériques

Une fois les grandeurs et leur gradient calculés aux interfaces entre les cellules, on peut évaluer les flux hyperboliques $f(u)$ et les flux dissipatifs $\varphi(u, \nabla u)$ à travers ces interfaces. Le calcul de ces derniers est relativement simple : ils sont directement évalués à partir des valeurs $(u, \nabla u)$ calculées aux interfaces.

Pour traiter les flux hyperboliques, on utilise la méthode MUSCL (*Monotonic Upstream Schemes for Conservative Laws*) d'ordre 2, dont l'usage est extrêmement courant en mécanique des fluides. Il s'agit d'utiliser un schéma décentré résolvant le problème de Riemann de manière approchée, nettement moins coûteux qu'un schéma exact comme celui de Godunov [46]. Le schéma de Roe a été choisi puisqu'il permet de capturer un

(a). On entend par calcul consistant un calcul qui est exact lorsque le gradient est constant

choc avec une résolution spatiale grossière, comme c'est le cas des calculs réalisés dans les chapitres 6 et 7. Le schéma HLLC, récemment implanté dans CEDRE, aurait aussi pu être utilisé avec une amélioration probable des résultats, s'il avait été disponible plus tôt. Comme la discrétisation d'ordre un en espace entraîne une dissipation numérique excessive, il est nécessaire de passer à l'ordre 2, en interpolant linéairement les grandeurs calculées au centre des cellules pour les estimer à l'interface des cellules. Cependant, dans ce cas on peut montrer que les schémas ne sont plus à Variation Totale Décroissante (ou TVD pour *Total Variation Diminishing*), ce qui peut amener au calcul de solutions non physiques comme les chocs de détente (choc avec diminution d'entropie). Pour obtenir des schémas TVD au second ordre, il faut appliquer un limiteur de pente aux gradients moyens de maille. Dans cette étude, le limiteur de Van Leer, largement utilisé pour sa grande polyvalence, a été appliqué.

Par ailleurs, les travaux récents de Haider *et al.* [48] et détaillés dans la thèse de Haider [49] ont montré que la méthode MUSCL peut devenir intrinsèquement instable dans des maillages 3D non-structurés généraux, dans le cas où le nombre de cellules voisines est trop faible, comme par exemple avec des tétraèdres (seulement 4 voisins). Il est donc nécessaire d'appliquer un limiteur de gradient moyen de maille. La limitation qui a été utilisée est une limitation directionnelle contrainte par le principe du maximum. Elle peut modifier à la fois l'amplitude et la direction du gradient et est de ce fait moins dissipative qu'une limitation non directionnelle (voir pour plus de précisions la thèse de Haider [49]). Cependant, l'utilisation d'une telle limitation a pour effet de diminuer la précision du schéma spatial. On pourrait en théorie substituer à ce limiteur une méthode de reconstruction stable des gradients [48, 49] qui élargit l'interpolation des gradients au deuxième voisinage de la maille^(b). Cette reconstruction permet d'augmenter la stabilité du calcul sans perdre la consistance d'ordre 2. Cependant elle n'est pas infaillible, par exemple lorsque l'écoulement présente des discontinuités et des chocs avec des gradients importants. Elle n'a pas été testée pour les calculs réalisés dans cette thèse, la robustesse ayant été privilégiée.

Pour la capture de choc, outre le schéma de Roe, on utilise des options supplémentaires dont les effets se traduisent par de la dissipation numérique supplémentaire au niveau des discontinuités :

- correction entropique qui permet de respecter le second principe de la thermodynamique et d'éviter les chocs de détente ;
- correction de positivité ;
- dissipation supplémentaire.

Ces options s'avèrent nécessaires pour capturer le choc détaché dans la chambre de combustion simulée dans le chapitre 6 avec un maillage très grossier comme celui décrit dans la section 5.2.2.

1.6.2 Intégration temporelle

L'intégration temporelle s'applique sur le système d'équations différentielles ordinaires exprimé grâce à la discrétisation spatiale. Ce système regroupe les équations de conservation interne (1.110) et les équations aux limites qui sont détaillées dans [46]. Il s'exprime de la façon suivante :

$$M\dot{Q} = F(U, \nabla U, t), \quad (1.112)$$

(b). Le deuxième voisinage est composé des cellules voisines des premières voisines de la maille considérée.

avec M la matrice diagonale par blocs contenant les volumes V_i des cellules et les temps caractéristiques aux limites, Q l'ensemble des quantités conservées, F les déséquilibres et U l'ensemble des variables primitives. Pour résoudre ce système, l'intégration temporelle consiste à remplacer la solution exacte $Q(t)$ par une suite de valeurs discrètes aux différents instants. À partir d'un instant t^n où l'état des grandeurs conservatives se note Q^n , pour avancer dans le temps il faut déterminer Q^{n+1} à l'instant t^{n+1} , en évaluant l'expression :

$$M\delta Q = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U) dt, \quad \text{avec} \quad \delta Q = \frac{Q^{n+1} - Q^n}{\Delta t}, \quad (1.113)$$

en notant $\Delta t = (t^{n+1} - t^n)$. On distingue deux types de méthodes d'intégration :

- **Les méthodes explicites** sont simples à mettre en œuvre puisque le calcul de Q^{n+1} ne fait intervenir que l'état U^n au temps t^n . La plus simple est la méthode d'Euler explicite :

$$M\delta Q = F(U^n). \quad (1.114)$$

Les méthodes explicites présentent un inconvénient de taille : leur stabilité est conditionnée par une contrainte dite de CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) sur le pas de temps Δt . En pratique, ce pas de temps doit respecter en tout point l'inégalité :

$$\Delta t < \text{CFL}_{\max} \cdot \frac{\Delta x}{|\mathbf{u}| + c}, \quad (1.115)$$

où Δx est la taille de maille, \mathbf{u} la vitesse convective, c la vitesse du son, et CFL_{\max} un paramètre dépendant de la limite de stabilité du schéma considéré, et qui est généralement de l'ordre de 1.

- **Les méthodes implicites** permettent de s'affranchir, en partie ou totalement, de la contrainte CFL au prix d'une mise en œuvre plus complexe. Cette fois, la méthode utilise aussi l'état U^{n+1} dans le second membre de l'équation (1.113). On peut considérer par exemple le θ -schéma présent dans CEDRE, défini comme :

$$M\delta Q = F[\theta U^{n+1} + (1 - \theta)U^n] \quad (1.116)$$

Lorsque $\theta = 1$, on obtient le schéma d'Euler implicite, qui nécessite trois étapes successives utilisant des approximations pouvant dégrader la solution, par rapport l'étape unique du schéma d'Euler explicite :

- (i) **La linéarisation en temps du second membre** de l'équation (1.116) permet l'utilisation de méthodes itératives de résolution de systèmes linéaires, qui facilitent la parallélisation et qui sont moins coûteuses qu'une méthode de Newton appliquée à la résolution du système non-linéaire. Cette linéarisation permet l'écriture du θ -schéma linéarisé sous la forme suivante :

$$(M - \theta\Delta t J^n)\delta Q = F(U^n) \quad (1.117)$$

où J^n est la matrice jacobienne des seconds membres par rapport aux états, à l'itération n :

$$J^n = \left. \frac{\partial F}{\partial Q} \right|^n \quad (1.118)$$

- (ii) **L'approximation du jacobien** par construction du jacobien approché à l'aide d'une discrétisation spatiale d'ordre un. La construction du jacobien exact a deux inconvénients majeurs. Elle fait intervenir les cellules de second

voisinage, ce qui est plus coûteux — en particulier en non-structuré — et elle mène à la construction d'une matrice pleine qui augmente l'occupation mémoire et nuit au conditionnement. On préfère donc utiliser une approximation de ce jacobien, à l'instar d'autres codes à vocation industrielle dotés de schémas implicites. Notons que l'on peut montrer que l'approximation du jacobien à l'ordre 1 ne remet pas en cause l'ordre 2 en espace du calcul, si la discrétisation spatiale est bien à l'ordre 2 en explicite.

- (iii) **La résolution itérative du système linéaire** pour déterminer le nouvel état Q^{n+1} . Elle est réalisée dans CEDRE avec la méthode GMRES détaillée dans [46].

Plus de détails sur ces étapes de résolution sont donnés dans la thèse de Bertier [46]. Malgré ces approximations, le schéma d'Euler implicite est robuste et peu coûteux puisque d'ordre 1 en temps. Il est idéal pour la recherche d'un état stationnaire à grand pas de temps, et l'utilisation d'un pas de temps faible le rend suffisamment précis pour réaliser des calculs instationnaires. En l'occurrence, ce schéma a été utilisé pour réaliser les calculs LES de cette étude, avec un pas de temps de $5 \cdot 10^{-7}$ s.

Le schéma implicite d'ordre 2 de Gear a également été implémenté dans CEDRE par Sainte-Rose [50], afin de pouvoir réaliser des calculs instationnaires précis à pas de temps élevé avec une méthode implicite. Mais étant donné son coût plus élevé, il n'a pas été retenu pour réaliser les calculs déjà très coûteux décrits dans les chapitres 6 et 7.

Modélisation des transferts radiatifs dans les flammes | 2

Ce chapitre présente les moyens mis en œuvre dans cette étude pour la simulation des transferts radiatifs dans les flammes. Après avoir introduit les relations fondamentales du rayonnement thermique, on présente les deux méthodes numériques utilisées dans cette étude pour la simulation des transferts radiatifs. On s'intéresse également aux modèles de propriétés radiatives des gaz et des particules de suie, spécifiquement dans le cadre de la combustion à pression élevée. L'ouvrage de Modest [51] et l'article de Tessé et Lamet [52] ont été pris comme références et donnent des relations plus générales que celles présentées ici.

Table des matières

2.1	Théorie pour le calcul des transferts radiatifs	45
2.1.1	Expressions du flux et de la puissance	45
2.1.2	Équation du transfert radiatif	46
2.2	Méthodes numériques	47
2.2.1	Méthode de Monte Carlo	47
2.2.1.1	Principe et hypothèses	47
2.2.1.2	Formulation	48
2.2.1.3	Distribution des tirs	49
2.2.1.4	Évaluation d'écart types	49
2.2.2	Méthode DOM	50
2.2.2.1	Principe	50
2.2.2.2	Résolution numérique	51
2.3	Modèles de propriétés radiatives	51
2.3.1	Propriétés radiatives des gaz	51
2.3.2	Propriétés radiatives des suies	52

2.1 THÉORIE POUR LE CALCUL DES TRANSFERTS RADIATIFS

On considère dans cette section un milieu semi-transparent entouré de parois opaques. Le but de la simulation des transferts radiatifs est d'évaluer le champ de puissance radiative P^R dans le volume ainsi que le champ de flux radiatif φ^R sur les parois. Pour simplifier les relations qui sont données, on fait les hypothèses suivantes :

- l'indice de réfraction du milieu est pris égal à 1, ce qui est une approximation correcte dans les flammes ;
- le phénomène de diffusion du rayonnement n'est pas pris en compte ; il est communément négligé pour les molécules gazeuses aux longueurs d'onde qui interviennent dans les systèmes considérés. Pour les particules de suie, cette hypothèse sera abordée en section 2.3.2.

Des relations plus générales, qui sortent du cadre de cette étude, sont données dans l'article de Tessé et Lamet [52].

2.1.1 Expressions du flux et de la puissance

En un point M du milieu, on définit le vecteur de flux radiatif :

$$\mathbf{q}^R(M) = \int_0^\infty \int_{4\pi} L_\nu(M, \mathbf{u}) \mathbf{u} d\Omega d\nu, \quad (2.1)$$

où ν est le nombre d'onde, $L_\nu(M, \mathbf{u})$ la luminance directionnelle monochromatique au point M dans la direction de vecteur unitaire \mathbf{u} , et $d\Omega$ désigne un angle solide élémentaire. La luminance représente le flux d'énergie radiative par unité de surface, de temps, d'angle solide et de nombre d'onde dans la direction considérée. On peut alors définir le flux radiatif, en un point B d'une paroi de vecteur normal unitaire entrant \mathbf{n} , par l'expression :

$$\varphi^R(B) = -\mathbf{q}^R(B) \cdot \mathbf{n} = - \int_0^\infty \int_{4\pi} L_\nu(B, \mathbf{u}) \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\Omega d\nu, \quad (2.2)$$

ainsi que la puissance radiative en un point M du volume d'abscisse curviligne s_M :

$$P^R(M) = - \left[\nabla \cdot \mathbf{q}^R \right]_M = - \int_0^\infty \int_{4\pi} \left[\frac{\partial L_\nu(s, \mathbf{u})}{\partial s} \right]_{s=s_M} d\Omega d\nu \quad (2.3)$$

Sur une paroi, l'intégrale sur l'angle solide peut être décomposée en deux parties pour exprimer le flux radiatif sous la forme :

$$\begin{aligned} \varphi^R(B) &= \underbrace{\int_0^\infty \int_{2\pi/(u \cdot n < 0)} \alpha_\nu(B, \mathbf{u}) L_\nu(B, \mathbf{u}) |\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}| d\Omega d\nu}_{\text{absorption}} \\ &\quad - \underbrace{\int_0^\infty \int_{2\pi/(u \cdot n > 0)} L_\nu^{\text{émise}}(B, \mathbf{u}) |\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}| d\Omega d\nu}_{\text{émission}}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

où la première partie concerne les directions pointant vers la surface et désigne l'énergie absorbée par la paroi, et la seconde regroupe les directions pointant de la surface vers le milieu et désigne l'émission de la surface. La paroi est par ailleurs caractérisée par son absorptivité monochromatique directionnelle $\alpha_\nu(B, \mathbf{u})$ et par son émissivité monochromatique directionnelle $\varepsilon_\nu(B, \mathbf{u})$. L'hypothèse d'Équilibre Thermodynamique Local (ETL)^(a) implique la loi fondamentale $\alpha_\nu = \varepsilon_\nu$ et permet d'exprimer la luminance émise

(a). L'ETL consiste à supposer que les niveaux énergétiques des molécules sont peuplés suivant la distribution de Boltzmann, ce qui est vrai pour les applications envisagées ici.

en fonction de la luminance monochromatique isotrope du rayonnement d'équilibre $L_\nu^0(T_B)$ à la température de la surface T_B au point B :

$$L_\nu^{\text{émise}}(B, \mathbf{u}) = \varepsilon_\nu(B, \mathbf{u})L_\nu^0(T_B) \quad \text{avec} \quad L_\nu^0(T_B) = \frac{2hc_0^2\nu^3}{\exp\left(\frac{hc_0\nu}{kT_B}\right) - 1}. \quad (2.5)$$

La relation précédente introduit les constantes suivantes :

- la constante de Planck $h = 6,6261 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$;
- la célérité de la lumière dans le vide $c_0 = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$;
- la constante de Boltzmann $k = 1,3807 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$.

2.1.2 Équation du transfert radiatif

Pour déterminer les champs de puissance et de flux radiatifs avec les relations (2.3) et (2.4), on constate qu'il est nécessaire de connaître le champ de luminance monochromatique directionnelle $L_\nu(s, \mathbf{u})$ en tout point d'abscisse curviligne s . Pour cela, il est nécessaire de résoudre l'Équation du Transfert Radiatif (ou RTE pour *Radiative Transfer Equation*) qui décrit l'évolution de la luminance le long d'une trajectoire optique. On obtient sa formulation différentielle en faisant le bilan d'énergie d'un élément de trajectoire de direction \mathbf{u} entre les abscisses s et $s + ds$:

$$\frac{\partial L_\nu(s, \mathbf{u})}{\partial s} = \eta_\nu(s) - \kappa_\nu(s)L_\nu(s, \mathbf{u}), \quad (2.6)$$

où le premier terme du membre de droite $\eta_\nu(s)$ est le coefficient monochromatique d'émission, qui représente le gain de luminance par émission du milieu, et le deuxième terme, faisant intervenir le coefficient monochromatique d'absorption $\kappa_\nu(s)$, représente la perte de luminance par absorption du milieu. Ces deux coefficients sont considérés comme isotropes. La forme intégrale de la RTE est obtenue en intégrant l'équation 2.6 sur une épaisseur optique, d'un point $B(s_B)$ appartenant à une paroi jusqu'à un point $M(s)$ du milieu :

$$L_\nu(s, \mathbf{u}) = L_\nu^{\text{partant}}(s_B, \mathbf{u})\tau_\nu(s_B, s) + \int_{s_B}^s \eta_\nu(s')\tau_\nu(s', s)ds', \quad (2.7)$$

où $\tau_\nu(s', s)$ est la transmittivité monochromatique qui s'exprime en fonction de κ_ν :

$$\tau_\nu(s', s) = \exp\left(-\int_{s'}^s \kappa_\nu(s'')ds''\right). \quad (2.8)$$

La formulation intégrale de la RTE, donnée par l'équation (2.7), exprime la luminance dans la direction \mathbf{u} en un point du milieu d'abscisse s comme la somme de deux contributions : la première est la luminance quittant la paroi dans la direction \mathbf{u} et absorbée de façon exponentielle sur l'épaisseur du milieu $\|s - s_B\|$ traversée, et la seconde correspond à l'émission du milieu dans la direction \mathbf{u} , transmise jusqu'à s .

Par ailleurs, pour un milieu composé de gaz et de particules, le coefficient monochromatique d'absorption se décompose sous la forme suivante :

$$\kappa_\nu = \kappa_\nu^{\text{gaz}} + \kappa_\nu^{\text{part}} \quad (2.9)$$

où les coefficients d'absorption respectifs du mélange de gaz et des particules sont donnés par des modèles spécifiques de propriétés radiatives. Sous l'hypothèse d'ETL, le coefficient monochromatique d'émission du milieu s'écrit :

$$\eta_\nu(M) = \kappa_\nu^{\text{gaz}}(M)L_\nu^0(T_M^{\text{gaz}}) + \kappa_\nu^{\text{part}}(M)L_\nu^0(T_M^{\text{part}}). \quad (2.10)$$

Enfin, la luminance partant de la paroi au point B et dans la direction \mathbf{u} , $L_\nu^{\text{partant}}(s_B, \mathbf{u})$, regroupe l'émission de la paroi et la part réfléchiée de la luminance incidente sur la paroi (ici formulée pour le cas d'une réflexion diffuse) :

$$L_\nu^{\text{partant}}(s_B, \mathbf{u}) = \varepsilon_\nu(B)L_\nu^0(T_B) + \frac{1 - \varepsilon_\nu(B)}{\pi} \int_{2\pi/(\mathbf{u}' \cdot \mathbf{n} < 0)} L_\nu(B, \mathbf{u}') |\mathbf{u}' \cdot \mathbf{n}| d\Omega'. \quad (2.11)$$

Finalement, on obtient l'expression de la puissance radiative en substituant l'équation (2.6) dans l'expression (2.3), ce qui donne :

$$P^R(M) = \underbrace{\int_0^\infty \kappa_\nu(M) \int_{4\pi} L_\nu(M, \mathbf{u}) d\Omega d\nu}_{\text{absorption}} - \underbrace{4\pi \int_0^\infty \eta_\nu(M) d\nu}_{\text{émission}}. \quad (2.12)$$

Les expressions (2.4) et (2.12) font intervenir les coefficients ε_ν et κ_ν . Les émissivités ε_ν sont imposées sur les conditions aux limites et les coefficients d'absorption κ_ν sont calculés à l'aide des modèles de propriétés radiatives des gaz et des particules. Pour un modèle de propriétés radiatives des gaz formulé en coefficient d'absorption, on peut directement évaluer τ_ν en fonction de κ_ν avec la relation (2.8). À l'inverse, pour un modèle formulé en transmittivité, il est nécessaire de transformer les expressions (2.4) et (2.12) à l'aide de l'équation (2.7) (voir la référence [52] qui donne les relations correspondantes).

2.2 MÉTHODES NUMÉRIQUES

Afin de calculer numériquement les champs de puissance et de flux radiatifs dans un domaine géométrique déterminé, il est nécessaire de mettre en œuvre des méthodes numériques adaptées. Pour cette étude, les méthodes de Monte Carlo et des ordonnées discrètes (DOM pour *Discrete Ordinates Method*) ont été mises en œuvre respectivement dans les solveurs ASTRE et REA de la chaîne CEDRE. Ces deux méthodes sont à l'heure actuelle de plus en plus utilisées de façon couplée avec un calcul CFD instationnaire.

Pour décrire le principe de ces méthodes, on conserve des grandeurs monochromatiques pour faciliter la compréhension. En réalité, ces méthodes sont le plus couramment utilisées avec des modèles de propriétés radiatives fournissant des propriétés moyennées sur des bandes spectrales (voir section 2.3).

2.2.1 Méthode de Monte Carlo

2.2.1.1 Principe et hypothèses

La méthode de Monte Carlo est à l'origine une méthode statistique pour le calcul d'intégrales multiples. Appliquée au problème des transferts radiatifs, elle consiste à suivre des paquets d'énergie que l'on appellera *photons*, puisqu'ils représentent chacun un certain nombre de photons physiques dotés des mêmes caractéristiques. La trajectoire (ou chemin optique) de chaque photon numérique est construite en déterminant ses caractéristiques propres ainsi que les événements appliqués au photon en fonction de nombres aléatoires. On désigne par *tir* la construction de cette trajectoire. On peut montrer que la solution exacte du problème peut être approchée en suivant un grand nombre de photons.

Par souci de clarté, on présente la méthode de Monte Carlo dans le cadre des hypothèses simplificatrices suivantes, qui sont celles faites pour cette étude :

- Le modèle de propriétés radiatives est supposé formulé en coefficient d'absorption.

- L'interaction rayonnement-turbulence n'est pas prise en compte. Ce sujet a été traité en détails par Tessé [7, 9].
- On ne présente ici que la formulation directe de la méthode de Monte Carlo (ou FM pour *Forward Method*). Les formulations réciproques, dont les résultats sont évalués dans le chapitre 7 de ce mémoire, sont détaillées par Tessé *et al.* [53] et Dupoirieux *et al.* [54]. Elles sont désignées par les acronymes ERM (*Emission Reciprocity Method*) pour celle basée sur l'émission, ARM (*Absorption Reciprocity Method*) pour celle basée sur l'absorption, et ORM (*Optimized Reciprocity Method*) pour une version optimisée combinant ERM et ARM.

Considérons une configuration, décrite dans la section 2.1, discrétisée en N_V éléments (ou cellules) volumiques et N_S éléments surfaciques appartenant aux parois. On considère que chaque élément est isotherme et homogène, et que les propriétés radiatives de ce milieu sont isotropes. Chaque élément émet plusieurs *tirs*, chacun étant caractérisé par un nombre d'onde, un point d'émission dans la cellule et une direction, déterminés par des processus stochastiques décrivant la réalité physique. Cet aspect n'étant pas détaillé ici, on pourra se référer à [52] pour plus d'information. Une fois émis, le photon traverse les cellules volumiques du milieu, et est réfléchi sur les cellules surfaciques des parois. Dans la formulation originale purement stochastique de la méthode de Monte Carlo, l'absorption de l'énergie transportée par le photon est discrète : toute l'énergie est absorbée par une seule cellule lorsque la trajectoire du photon atteint une longueur déterminée aléatoirement. De manière à réduire les écarts types, on préfère ici considérer une absorption continue de l'énergie dans chaque cellule traversée (voir la méthode de partitionnement de l'énergie dans [51, 55]).

2.2.1.2 Formulation

Pour calculer la puissance radiative en chaque cellule, on mène un bilan d'énergie dans chacune d'elles. La puissance émise P_q^e d'une cellule volumique q de volume V_q est calculée de manière exacte avec l'expression (2.13) prenant en compte les hypothèses d'homogénéité et d'isotropie :

$$P_q^e = 4\pi V_q \int_0^\infty \eta_{qv} dv \quad (2.13)$$

Par ailleurs, la cellule q est traversée par des tirs provenant d'autres cellules et qui déposent de l'énergie dans la cellule q . Parmi les N_i tirs émis par la cellule i , on considère le tir n , schématisé sur la figure 2.1, de nombre d'onde ν_n et transportant une énergie P_i^e / N_i . Il traverse plusieurs cellules m dont la cellule q , à deux reprises. En tenant compte des N_{iq} tirs issus de la maille i et qui traversent la cellule q , l'estimation statistique de la puissance émise par la cellule i et absorbée par la cellule q s'écrit :

$$\widetilde{P}_{iq}^{ea} = \frac{P_i^e}{N_i} \sum_{n=1}^{N_{iq}} \sum_{c=1}^{N_{qn}^p} \tau_{\nu_n}(E_{in}, F_{qcn}) \alpha_{qcv_n}. \quad (2.14)$$

L'expression précédente tient compte des N_{iq} tirs émis par la cellule i et traversant la cellule q un nombre N_{qn}^p de fois pour chaque tir n . À chaque passage c , l'énergie déposée est le produit de l'énergie transportée initialement P_i^e / N_i par la transmittivité spectrale $\tau_{\nu_n}(E_{in}, F_{qcn})$ entre le point d'émission E_{in} et F_{qcn} , le $c^{\text{ième}}$ point d'entrée du rayon dans la cellule q (voir figure 2.1), et par l'absorptivité α_{qcv_n} dans la cellule q . On exprime la transmittivité spectrale $\tau_{\nu_n}(E_{in}, F_{qcn})$ par :

$$\tau_{\nu_n}(E_{in}, F_{qcn}) = \exp \left(- \sum_{m=1}^{M_{qcn}} \kappa_{m\nu_n} l_m \right) \prod_{h=1}^{N_c^r} (1 - \varepsilon_{h\nu_n}), \quad (2.15)$$

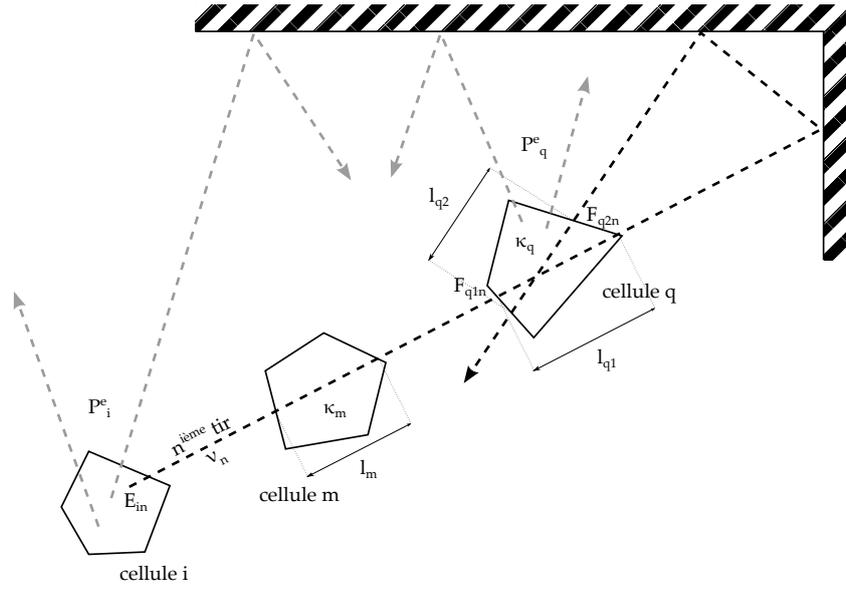


FIG. 2.1 | Schéma illustrant un chemin optique d'un photon traversant les cellules m et q et se réfléchissant de manière spéculaire sur les parois.

le rayon n parcourant le trajet du point E_{in} au point F_{qcn} en traversant M_{qcn} cellules, parcourant une longueur l_m dans chaque cellule m traversée, le coefficient d'absorption pour le nombre d'onde ν_n dans cette cellule étant $\kappa_{m\nu_n}$. Le rayon n est également réfléchi N_c^f fois sur les parois dont l'émissivité pour la réflexion h vaut $\varepsilon_{h\nu_n}$. Par ailleurs, l'absorptivité dans la maille q pour une longueur de traversée l_{qc} vaut :

$$\alpha_{qcv_n} = 1 - \exp(-\kappa_{qv_n} l_{qc}) . \quad (2.16)$$

Finalement, l'estimation statistique \widetilde{P}_q^R de la puissance radiative dans la cellule q s'exprime :

$$\widetilde{P}_q^R = \frac{1}{V_q} \left(\sum_{i=1}^{N_V+N_S} \widetilde{P}_{iq}^{ea} - P_q^e \right) . \quad (2.17)$$

2.2.1.3 Distribution des tirs

Dans le code ASTRE mettant en œuvre la méthode de Monte Carlo, on dispose de deux distributions possibles des N_{tot} tirs à émettre sur l'ensemble des éléments volumiques et surfaciques. La distribution uniforme (UD pour *Uniform spatial Distribution*) consiste à évaluer N_i par :

$$N_i = \frac{N_{\text{tot}}}{N_V + N_S} . \quad (2.18)$$

La distribution non-uniforme (NUD pour *Non-Uniform spatial Distribution*) quant à elle privilégie les cellules émettant le plus d'énergie en leur attribuant plus de tirs que les cellules moins émettrices, par la relation :

$$N_i = \frac{P_i^e}{\sum_{k=1}^{N_V+N_S} P_k^e} N_{\text{tot}} . \quad (2.19)$$

2.2.1.4 Évaluation d'écarts types

La méthode de Monte Carlo permet de quantifier le niveau de convergence des statistiques réalisées. Pour ce faire, on réalise plusieurs calculs indépendants, appelés

sous-calculs. Ils utilisent tous la même distribution spatiale des tirs, et ils construisent tous les trajectoires associées. Ils ne diffèrent que par les nombres aléatoires utilisés pour la caractérisation de chaque tir (nombre d'onde, direction, point d'émission). Pour N_{sc} sous-calculs réalisés, on obtient N_{sc} champ de puissance radiative P_k et le champ moyen résultant $\overline{P^R}$. La variance (ou le carré des écarts types γ) de la puissance moyenne $\overline{P^R}$ vaut alors :

$$\begin{aligned}\gamma^2 &= \frac{1}{N_{sc} - 1} \left[\sum_{k=1}^{N_{sc}} (P_k - \overline{P^R})^2 \right] \\ &= \frac{1}{N_{sc} - 1} \left[\sum_{k=1}^{N_{sc}} P_k^2 - \frac{1}{N_{sc}} \left(\sum_{k=1}^{N_{sc}} P_k \right)^2 \right]\end{aligned}\quad (2.20)$$

2.2.2 Méthode DOM

2.2.2.1 Principe

La méthode des ordonnées discrètes (ou DOM) adopte un raisonnement différent de la méthode de Monte Carlo. Elle consiste à évaluer le champ de luminance radiative de manière directionnelle, en discrétisant l'angle solide en plusieurs directions. On peut donc substituer à l'intégrale sur l'angle solide une somme pondérée sur les directions. Si on applique ceci aux expressions (2.4) et (2.12), en supposant de plus que les parois ont une émissivité isotrope, on obtient :

$$\varphi^R(B) = \int_0^\infty \varepsilon_\nu(B) \sum_{j, (\mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n} < 0)} w_j L_\nu(B, j) |\mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n}| d\nu - \pi \int_0^\infty \varepsilon_\nu(B) L_\nu^0(T_B) d\nu \quad (2.21)$$

$$P^R(M) = \int_0^\infty \kappa_\nu(M) \sum_{j=1}^{N_d} w_j L_\nu(M, j) d\nu - 4\pi \int_0^\infty \eta_\nu(M) d\nu, \quad (2.22)$$

où w_j est le poids de la quadrature associé à la direction j de vecteur directeur normé \mathbf{u}_j , et N_d le nombre de directions de discrétisation.

Des quadratures gaussiennes (ou quadratures S_N) sont utilisées pour l'intégration sur les directions. Cela permet de diminuer le nombre de directions à prendre en compte au moins d'un facteur 20 et d'augmenter ainsi les performances de la méthode. N est un nombre pair donnant l'ordre de la solution et déterminant le nombre de direction : $N_d = N(N + 2)$ pour un problème 3D.

Pour évaluer les luminances directionnelles qui interviennent dans les expressions (2.21) et (2.22), on remplace la formulation différentielle de la RTE par un système de N_d équations, dont l'équation pour la direction m s'écrit :

$$\mathbf{u}_m \cdot \nabla L_\nu(s, m) = \eta_\nu(s) - \kappa_\nu(s) L_\nu(s, m). \quad (2.23)$$

Le système d'équations précédent a besoin de conditions limites pour être résolu. Pour une paroi avec réflexion diffuse, on se sert de l'équation (2.11) pour exprimer la luminance partant de la paroi dans la direction m telle que $\mathbf{u}_m \cdot \mathbf{n} > 0$:

$$L_\nu^{\text{partant}}(B, m) = \varepsilon_\nu(B) L_\nu^0(T_B) + \frac{1 - \varepsilon_\nu(B)}{\pi} \sum_{j, (\mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n} < 0)} w_j L_\nu(B, j) |\mathbf{u}_j \cdot \mathbf{n}|. \quad (2.24)$$

D'après l'équation (2.24), on constate que lorsqu'il y a des réflexions sur les parois, la luminance dans une direction donnée dépend de la luminance dans d'autres directions. Il y a donc un couplage entre les directions qui nécessite d'utiliser une procédure itérative pour résoudre le système d'équations (2.23).

2.2.2.2 Résolution numérique

Pour calculer numériquement le champ des luminances directionnelles, une approche de type volumes finis est utilisée. Elle consiste à exprimer l'équation (2.23) sous la forme d'un bilan de luminance à travers les N_i^{faces} faces d'un volume élémentaire i , isotherme et homogène, de la discrétisation spatiale du domaine de calcul. On peut montrer [52] que pour une direction m , on obtient :

$$\sum_{f=1}^{N_i^{\text{faces}}} -\mathbf{u}_m \cdot \mathbf{n}_f A_f L_v(f, m) = \eta_{iv} - \kappa_{iv} L_v(C_i, m), \quad (2.25)$$

où chaque face délimitant l'élément i est caractérisée par son aire A_f et un vecteur normal \mathbf{n}_f pointant vers l'élément i de centre C_i . On suppose ici que les luminances $L_v(f, m)$ à travers les faces ainsi que la luminance $L_v(C_i, m)$ au centre du volume sont uniformes respectivement sur les faces et dans le volume V_i .

La formulation (2.25) du problème fait intervenir en plus des $N_d(N_V + N_S)$ luminances inconnues les luminances sur les faces de ces éléments. Pour diminuer le nombre d'inconnues du problème, on choisit d'utiliser le schéma spatial « step » qui permet d'exprimer les luminances sur les faces de la manière suivante :

- Pour une luminance sortant de la cellule ($\mathbf{u}_m \cdot \mathbf{n}_f < 0$), $L_v(f, m) = L_v(C_i, m)$.
- Pour une luminance entrant dans la cellule ($\mathbf{u}_m \cdot \mathbf{n}_f > 0$), $L_v(f, m)$ prend la valeur de la luminance sortant par la même face de la cellule contigüe. Comme la résolution se fait de proche en proche, cette luminance est connue. Si la face considérée est une frontière du domaine de calcul, $L_v(f, m)$ est donnée par l'équation (2.24).

Les luminances au centre des éléments sont évaluées sur l'ensemble du domaine pour chaque direction discrète. À la première itération, les luminances dans les directions incidentes sur les parois sont supposées nulles pour l'évaluation des conditions aux limites (2.24). Une fois le champ de luminances calculé une première fois, il est nécessaire d'itérer en calculant cette fois-ci les conditions aux limites avec le champ de luminances évalué précédemment. Une méthode basée sur l'algorithme Gauss-Seidel est utilisée. Ceci est répété pour chaque bande spectrale de la discrétisation du spectre.

2.3 MODÈLES DE PROPRIÉTÉS RADIATIVES

2.3.1 Propriétés radiatives des gaz

En raison de la forte dynamique des spectres d'absorption des gaz généralement pris en compte comme H_2O , CO_2 et parfois CO pour les applications de combustion aérobie, il est nécessaire pour limiter les coûts d'utiliser un modèle plutôt que de résoudre la RTE sur les millions de points spectraux nécessaires à l'approche raie par raie. On s'intéresse dans cette étude aux modèles de bandes, capables de prendre en compte des milieux non homogènes et de traiter des particules telles que les suies. Ils consistent à discrétiser le spectre en intervalles (les bandes) et à moyennner les propriétés radiatives sur chacune de ces bandes. La discrétisation spectrale est choisie de manière à ce que la fonction de Planck $L_v^0(T)$ puisse être considérée comme constante sur chaque bande, cela sur tout l'intervalle de température considéré. On peut ainsi décorréler $L_v^0(T)$ et une quantité radiative monochromatique quelconque X_v lorsque leur produit est moyennné sur une bande spectrale de largeur $\Delta\nu$:

$$\overline{X_v L_v^0(T^{\text{gaz}})} \approx \overline{X_v} \times \overline{L_v^0(T^{\text{gaz}})}, \quad (2.26)$$

ce qui est utile pour simplifier les équations (2.6) et (2.7) lorsqu'elles sont moyennées sur une bande spectrale.

Parmi cette famille de modèles, on peut évoquer le modèle CK (*Correlated-K*) ou le modèle SNB (*Statistical Narrow Band*). On ne détaillera pas ces modèles car ils ont déjà été largement détaillés dans la littérature [52, 56, 57]. Dans l'application foyer aéronautique visée dans cette étude, les valeurs élevées de pression augmentent les collisions entre molécules, ce qui induit un élargissement des raies d'absorption des espèces gazeuses. On obtient alors des spectres beaucoup plus lisses, ce qui diminue fortement l'effet de corrélation spectrale (dû au fait que l'émission et l'absorption ont lieu précisément aux mêmes positions spectrales) et permet de définir des coefficients moyens d'absorption par bande.

Dans ce cas, les modèles basés sur cette notion sont appelés *High Pressure Box Model* (HPBM). Plusieurs modèles de ce type ont déjà été développés par le passé [58, 59]. Ces modèles reposent sur les paramètres du modèle SNB développé par Soufiani et Taine [60]. On peut en effet mettre en évidence dans la formulation d'un modèle SNB un cas limite (dit d'absorption faible, [56]) pour lequel le spectre est constitué de raies larges et peu espacées, ce qui correspond à un spectre lisse. Dans ce cas, la transmittivité moyenne sur une bande s'exprime par l'expression (2.27) où $\bar{k}^{\Delta\nu}$ désigne l'un des deux paramètres du modèle SNB :

$$\bar{\tau}_v^{\Delta\nu}(l) = \exp\left(-X_k P \bar{k}^{\Delta\nu} l\right). \quad (2.27)$$

À partir de cette équation, on identifie l'expression du coefficient moyen d'absorption par bande :

$$\bar{\kappa}_v^{\Delta\nu} = X_k P \bar{k}^{\Delta\nu}, \quad (2.28)$$

où P est la pression, X_k la fraction molaire de l'espèce k considérée, et $\bar{k}^{\Delta\nu}$ le coefficient d'absorption moyen réduit obtenu en adimensionnant le spectre d'absorption $\kappa_v(T)$ par $X_k P$, puis en le discrétisant en bandes. Ces coefficients sont tabulés pour plusieurs valeurs de température et pour chaque bande spectrale. Par ailleurs, pour un mélange de deux espèces gazeuses A et B , on utilise l'approximation :

$$\bar{\kappa}_v^{\Delta\nu} = \bar{\kappa}_{v,A}^{\Delta\nu} + \bar{\kappa}_{v,B}^{\Delta\nu}. \quad (2.29)$$

2.3.2 Propriétés radiatives des suies

L'état de l'art de l'étude des propriétés radiatives des suies a été détaillé par Tessé [7] et n'est pas rappelé ici. Les particules de suie sont supposées sphériques, homogènes et isothermes. De plus, on suppose que les suies sont suffisamment petites par rapport aux longueurs d'onde considérées dans le calcul de transfert radiatif. Ceci est vrai pour les particules primaires mais pas toujours pour les agrégats dont la taille peut atteindre l'ordre de grandeur des plus petites longueurs d'onde considérées. D'après la théorie de Mie pour une particule isolée, on peut dans ce cas montrer [7] que l'efficacité du phénomène de diffusion d'un rayonnement incident est fonction du rapport d_p^4/λ^4 , où d_p est le diamètre de la particule et λ la longueur d'onde du rayonnement incident, alors que l'efficacité du phénomène d'absorption varie en d_p/λ . Par conséquent, pour ce cas limite (régime de Rayleigh) où $d_p \ll \lambda$, la diffusion du rayonnement par la particule est négligeable par rapport à l'absorption.

Pour une assemblée de particules, on peut montrer [7] que le coefficient monochromatique d'absorption des particules s'exprime :

$$\kappa_v^{\text{part}} = A_v \nu f_v, \quad (2.30)$$

où ν est le nombre d'onde exprimé en m^{-1} , f_v la fraction volumique de suies et A_ν une grandeur dépendant uniquement de l'indice optique complexe des particules. Comme les parties réelle et imaginaire de cet indice ne sont pas connues pour tous les combustibles, sur tout le spectre et pour différentes température, A_ν est généralement considérée comme une constante. Le choix fait par Tessé [7] et repris ici est $A_\nu = 5,5$.

Deuxième partie

Modèles de formation des suies

État de l'art sur la formation des particules de suie

3

Dans ce chapitre, on s'intéressera tout d'abord aux théories expliquant la physique de la formation et de l'oxydation des suies. On détaillera ensuite les modèles utilisés pour représenter numériquement ces phénomènes physiques. Enfin, on donnera une vue d'ensemble des problématiques actuelles sur la caractérisation des suies dans les flammes par l'expérimentation et la simulation numérique.

Table des matières

3.1	Physique et modélisation de la formation des suies	61
3.1.1	Physique de formation et d'oxydation des suies	61
3.1.1.1	Nucléation	61
3.1.1.2	Croissance en surface	63
3.1.1.3	Oxydation	65
3.1.1.4	Coagulation	67
3.1.2	Modèles pour la simulation numérique	68
3.1.2.1	Modélisation de la cinétique de formation des suies	68
3.1.2.2	Modélisation de la dynamique des particules	72
3.2	Caractérisation expérimentale des suies dans les flammes	74
3.2.1	Diagnostics pour la caractérisation des suies dans les flammes	75
3.2.1.1	Méthodes de mesure	75
3.2.1.2	Sensibilité des méthodes de mesure	77
3.2.1.3	Conclusion	78
3.2.2	Études expérimentales des suies dans les flammes	78
3.2.2.1	Flammes laminaires prémélangées	78
3.2.2.2	Flammes laminaires de diffusion	79
3.2.2.3	Flammes turbulentes de diffusion	80
3.2.2.4	Incertitudes des mesures observées	80
3.3	Études numériques des suies en combustion	81
3.3.1	Flammes laminaires	81
3.3.2	Flammes turbulentes	83
3.3.2.1	Simulations stationnaires à pression atmosphérique	84
3.3.2.2	Simulations stationnaires à pression élevée	85
3.3.2.3	Simulations instationnaires	87
3.4	Conclusion	89

3.1 PHYSIQUE ET MODÉLISATION DE LA FORMATION DES SUIES

Les suies sont des particules solides constituées majoritairement de carbone, qui se forment au cours de la combustion d'espèces carbonées. Leur état solide et leur formation à partir d'espèces en phase gazeuse en font un composant de nature très différente des autres composants d'une flamme. La mise en œuvre de diagnostics optiques de plus en plus performants a permis d'augmenter la précision des mesures lors de l'étude expérimentale des suies dans les flammes, à partir de la deuxième moitié du XX^e siècle. Néanmoins, les incertitudes de ces mesures restent encore aujourd'hui élevées, ce qui empêche de bien comprendre les phénomènes complexes intervenant dans la formation et la destruction des suies. Nous décrivons dans un premier temps les étapes de formation et d'oxydation des suies telles que les travaux antérieurs permettent de les comprendre, avant de nous intéresser à la modélisation de ces phénomènes.

3.1.1 Physique de formation et d'oxydation des suies

Les suies sont produites à partir d'hydrocarbures lors de leur combustion ou de leur pyrolyse à haute température. Les mécanismes de formation et d'oxydation des suies sont alors en compétition. Selon l'importance relative de chacun de ces phénomènes, les suies subsistent ou non dans la partie aval de la flamme. Les particules de suie interagissent à la fois avec le gaz environnant et entre elles. Les phénomènes physiques et chimiques mis en jeu étant encore mal connus, les théories les plus communément admises pour comprendre et modéliser ces phénomènes sont décrites dans la suite de cette section. Elles sont issues d'observations expérimentales et certaines décrivent le même phénomène en adoptant des points de vue différents.

Il est généralement admis que les suies se forment et s'oxydent en suivant différents processus distincts : la nucléation, la croissance en surface, l'oxydation et la coagulation. Ces quatre phénomènes sont décrits séquentiellement dans la suite de cette section. Pour plus de détails sur chacun d'eux, le lecteur pourra consulter les articles de référence de Haynes et Wagner [61] et de Kennedy [62]. Par ailleurs, cette section s'inspire des travaux de Mehta [63] et de Kleiveland [64] qui présentent dans leur thèse une synthèse intéressante des connaissances récentes de la physique des suies.

3.1.1.1 Nucléation

La nucléation est l'étape au cours de laquelle les premières particules de suie naissent à partir des espèces gazeuses environnantes. La dégradation des hydrocarbures par pyrolyse mène à la formation d'espèces carbonées plus petites, comme l'acétylène C_2H_2 et le benzène C_6H_6 . Ces deux espèces sont souvent appelées précurseurs des suies. L'acétylène est supposé être la principale espèce intervenant dans la formation du benzène, qui constitue le premier anneau aromatique. L'assemblage en nombre de cette entité de base conduit à la formation d'une grande diversité de molécules planes de grande taille appelées PAH (*Polycyclic Aromatic Hydrocarbon*). Pour donner un exemple de la structure caractéristique des PAH, l'arrangement des quatre cycles benzéniques composant le pyrène $C_{16}H_{10}$ est schématisé sur la figure 3.1. Ces PAH croissent via l'addition d'acétylène comme proposé par Frenklach et Wang [65] avec le mécanisme HACA (H-Abstraction- C_2H_2 -Addition), dont les étapes successives sont illustrées sur la figure 3.2 dans le cas où l'addition se fait sur le benzène. Le mécanisme HACA consiste en une première étape (a) où l'acétylène se fixe au radical^(a) benzène par addition

(a). Espèce contenant un ou plusieurs électrons non appariés, obtenue après le retrait d'un atome d'hydrogène.

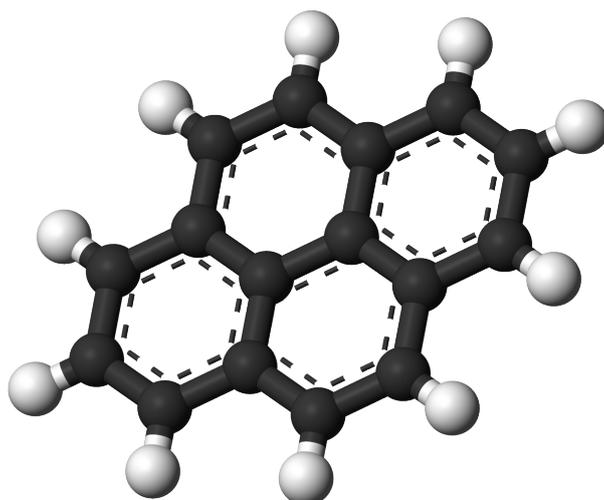


FIG. 3.1 | Structure du pyrène, avec les atomes de carbone en noir, les atomes d'hydrogène en blanc et les électrons pi délocalisés en pointillés.

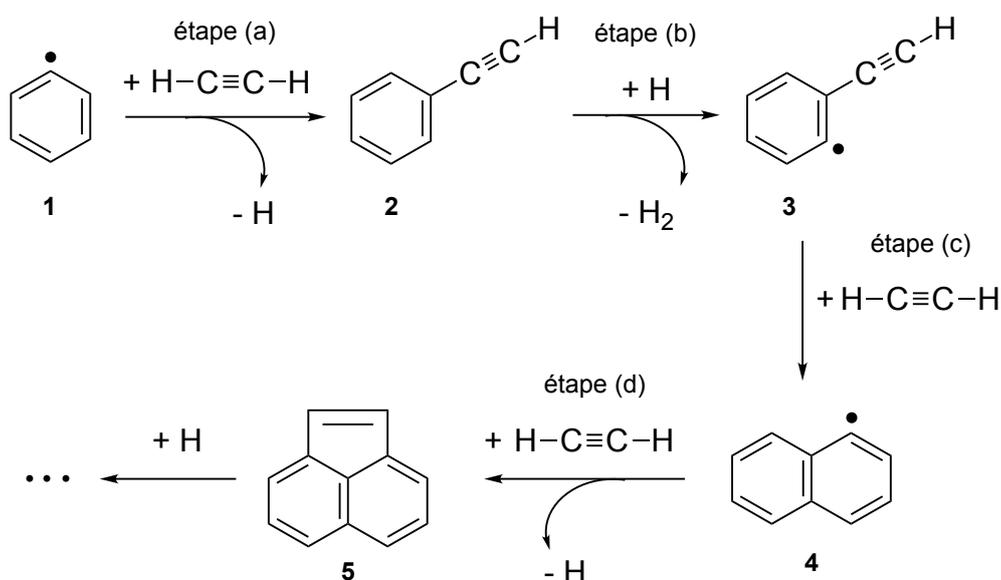


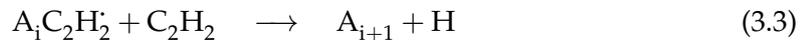
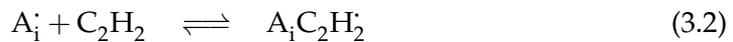
FIG. 3.2 | Étapes successives de croissance d'un PAH par le mécanisme HACA, pour un précurseur benzénique (C_6H_6). Schéma adapté de [65].

radicalaire. L'étape (b) crée un nouveau radical par extraction d'un atome d'hydrogène hors de la molécule carbonée. Cette extraction est produite par l'attaque d'un autre atome d'hydrogène présent dans le milieu. C'est cette même réaction qui a fourni le benzène radicalaire initial. Lors de l'étape (c), une autre molécule de C_2H_2 réagit avec le nouveau radical pour former un nouveau cycle. Dans ce cas, la cyclisation induit la délocalisation du site radicalaire^(b), qui est conservé. L'étape (d) consiste en une nouvelle cyclisation, et la perte du site radicalaire. Ces étapes se répètent ensuite pour former des PAH de taille de plus en plus grande.

Cette description phénoménologique a été formalisée par Frenklach [66] et reprise

(b). Atome de carbone portant un électron célibataire sur sa couche externe.

par Frenklach et Wang [65] via le mécanisme décrit par les équations (3.1) – (3.3) :



où l'espèce A_i représente une molécule contenant i cycles aromatiques fusionnés, A_i^{\cdot} est le radical associé et $A_iC_2H_2^{\cdot}$ est le radical obtenu après addition d'acétylène. C'est une simplification à l'extrême du mécanisme de polymérisation décrivant à l'origine la croissance des PAH en huit étapes. Il permet néanmoins de décrire les principaux processus : la création des radicaux A_i^{\cdot} par l'extraction d'un atome d'hydrogène lors de l'étape (3.1), et l'addition réversible ou irréversible d'acétylène lors des étapes (3.2) et (3.3). La croissance effective des PAH a lieu lors de l'étape irréversible (3.3) via la formation d'un nouveau cycle sur A_i . Ce mécanisme est valable pour des molécules ayant une taille minimale à partir de laquelle elles ne subissent plus les réactions d'initiation [66].

Les PAH croissent par ce mécanisme jusqu'à atteindre la taille — conséquente — du nanomètre. A partir de cette taille et jusqu'à environ 10 nm, on parle selon les auteurs de « particules de suies naissantes » [67] ou de NOC (*Nanoparticles of Organic Carbon*) [68, 69]. La nature de ces particules est encore mal connue et la frontière entre macro-molécule en phase gazeuse et « particule solide » est difficile à établir. Néanmoins, la précision actuelle des mesures et le développement de nouvelles méthodes permettent de les caractériser de mieux en mieux. L'équipe de D'Alessio a notamment utilisé des techniques optiques [68] pour mesurer les fractions volumiques de suies et de nanoparticules dans des flammes laminaires prémélangées et des flammes turbulentes de diffusion. Des techniques d'analyse par prélèvement pouvant détecter des particules nanométriques ont également été utilisées par la même équipe pour obtenir les distributions de taille de particules dans une flamme prémélangée [69, 70].

3.1.1.2 Croissance en surface

Une fois formées, les particules interagissent avec le gaz environnant. La croissance en surface conduit à une augmentation de la taille des particules, et l'oxydation produit l'effet inverse.

Frenklach et Wang [65] ont proposé de faire l'analogie entre les réactions chimiques qui ont lieu à la surface des PAH et celles ayant lieu à la surface des particules de suie. Le mécanisme chimique est similaire au mécanisme HACA pour les PAH. Il est formalisé par les réactions 1 à 4 présentées dans le tableau 3.1, où C_s représente une particule de suie, et C_s^{\cdot} le radical associé. Ce dernier est d'abord créé par l'attraction d'un atome d'hydrogène hors de la surface par un autre atome d'hydrogène (réaction 1). La réaction 2 est l'étape de désactivation associée. Comme pour les PAH, l'espèce clé responsable de la croissance est l'acétylène. Il s'accroche à la surface de la suie par addition radicalaire avec C_s^{\cdot} via les réactions 3 ou 4. La réaction 3 suppose que le site actif (ou site radicalaire) de C_s^{\cdot} est totalement désactivé par l'addition d'acétylène. Cette hypothèse a son importance dans les flammes à contre-courant. Wang *et al.* [71] ont observé qu'en suivant cette hypothèse, la fraction volumique de suies dans ce type de flamme est largement sous-estimée, en raison du manque d'atomes d'hydrogène et des faibles valeurs de température dans la zone de croissance des suies, ce qui ne favorise pas la création des radicaux. Ils ont largement amélioré leurs résultats en utilisant la réaction 4, qui modélise l'autre cas extrême pour lequel tous les sites actifs sont supposés conservés. Ils en concluent qu'en réalité les réactions 3 et 4 doivent avoir lieu

1	$C_s + H \rightleftharpoons C_s^{\cdot} + H_2$	[65]
2	$C_s^{\cdot} + H \rightarrow C_s$	[65]
3	$C_s^{\cdot} + C_2H_2 \rightarrow C_s + H$	[65]
4	$C_s^{\cdot} + C_2H_2 \rightarrow C_s^{\cdot} + H_2$	[71]
5	$C_s^{\cdot} + O_2 \rightarrow \text{produits}$	[65]
6	$C_s + OH \rightarrow \text{produits}$	[65]

TAB. 3.1 | Réactions du mécanisme HACA pour les suies.

simultanément, l'hypothèse de destruction des sites actifs étant plus appropriée dans les zones de fortes températures, et celle de conservation des sites actifs adéquate dans les zones de basses températures.

Des études expérimentales ont confirmé la validité de ce mécanisme, comme par exemple les mesures de Xu *et al.* [72] dans une flamme laminaire prémélangée éthylène/air à pression atmosphérique, pour trois richesses différentes. Les mesures révèlent que le taux de croissance en surface décroît avec l'augmentation du temps de résidence des particules (*i.e.* lorsqu'on se déplace vers l'aval de la flamme), malgré la présence d'acétylène. Ce phénomène est maintenant bien connu mais ses causes ne sont pas pour autant connues avec certitude. On parle souvent de vieillissement des particules pour désigner ce phénomène, qui aurait deux causes principales :

Pénurie en atomes d'hydrogène dans le milieu [72] : Elle limite la formation des sites actifs (équation 1 du tableau 3.1) nécessaires à l'addition de C_2H_2 . Le manque d'hydrogène est causé par la baisse de température, induite en partie par le fort rayonnement des suies elles-mêmes. La croissance en masse des suies est par conséquent auto-régulée.

Baisse de réactivité de surface : C'est la diminution du nombre de sites actifs à la surface des suies. Expérimentalement, Dobbins *et al.* [73] ont quantifié le taux de conversion des particules primaires en particules carbonisées, de nature très différente car plus riches en carbone et agglomérées. Ce changement de nature est très certainement la cause de la baisse de réactivité des particules. Mais l'étude ne dissociant pas les phénomènes simultanés tels que l'agglomération, la carbonisation et l'oxydation, il est difficile d'en tirer des certitudes. Liu *et al.* [74], appuyés également par Frenklach et Wang [75], expliquent cette baisse de réactivité par le phénomène de graphitisation, qui désigne le processus de réarrangement des atomes de carbone pour former une structure plus ordonnée. Cela tend à faire disparaître les défauts de surface, qui sont justement les sites actifs sur lesquels l'addition d'acétylène s'effectue préférentiellement.

Le vieillissement des particules serait donc dû à ces deux phénomènes — pénurie en H et baisse de réactivité en surface — suivant les conditions locales dans la flamme.

Dans certaines conditions, le mécanisme HACA est néanmoins mis en défaut. D'Alessio *et al.* [76] ont montré que dans des flammes pauvres en suies, la croissance en surface telle qu'elle est décrite par le mécanisme HACA (addition d'acétylène) n'avait pas lieu. Dans leur cas, les nanoparticules formées à partir des PAH se réarrangent sans interaction avec la phase gazeuse environnante pour former des particules de suie. La masse totale de carbone présente sous forme de particules reste alors uniforme dans la flamme, en-dehors de la zone de formation des nanoparticules. Le changement de nature des particules est clairement observé par absorption de la lumière : les nanoparticules sont transparentes dans le domaine spectral visible mais absorbent dans l'ultraviolet,

tandis que les suies sont transparentes dans l'ultraviolet mais absorbent dans le visible. Néanmoins, pour des flammes plus riches en suies, D'Alessio *et al.* [76] ont observé une augmentation de la masse totale de carbone présente sous forme de particules le long de l'axe de la flamme, identifiée comme étant une augmentation de la masse de suies uniquement. Ceci traduit l'existence d'interactions entre les suies et la phase gazeuse qui s'apparentent au phénomène de croissance en surface.

Comme le précisent Lautenberger *et al.* [77] ainsi que Frenklach et Wang [75], il existe au moins une alternative au mécanisme HACA pour interpréter le phénomène de croissance en surface. L'addition (ou la coalescence) de PAH à la surface des suies est en effet un mécanisme concurrent de l'addition d'acétylène. Il n'est pas limité par la présence d'atomes d'hydrogène mais par les réactions chimiques qui mènent à la formation des PAH. Le mécanisme HACA apparaît comme dominant dans les zones très chaudes et riches en hydrogène (proches du front de flamme), tandis que l'addition de PAH domine la croissance dans les zones moins chaudes de la flamme, d'après les travaux de Hwang et Chung [78] et Zelepouga *et al.* [79].

3.1.1.3 Oxydation

Le phénomène d'oxydation provoque la diminution de la masse de suie dans la flamme. Il agit par extraction d'atomes de carbone à la surface des particules primaires. Ce phénomène est en constante compétition avec la coagulation et la croissance en surface. Les deux principaux oxydants connus sont le dioxygène O_2 et le radical $OH\cdot$. L'oxygène atomique O et les espèces CO_2 et H_2O ont également été identifiés comme espèces oxydantes potentielles, mais avec un effet beaucoup moins marqué (voir l'étude de Xu *et al.* [80]). Frenklach et Wang [65] complètent leur mécanisme HACA (tableau 3.1) par les deux réactions d'oxydation 5 et 6 dans le tableau 3.1. Xu *et al.* [80] ont étudié l'oxydation des suies dans des flammes de diffusion hydrocarbure/air à pression atmosphérique. Ils ont notamment observé au microscope électronique à transmission (TEM pour *Transmission Electron Microscopy*) des échantillons de suies prélevés le long de l'axe d'une flamme éthylène/air. Les clichés de la figure 3.3 illustrent bien les rôles respectifs de l'oxydation et de l'agglomération (phénomène détaillé en section 3.1.1.4). Le long de la flamme, l'agglomération fait augmenter le nombre de particules primaires par agrégat, passant d'une dizaine à plusieurs centaines ou milliers en aval, tandis que l'oxydation fait diminuer le diamètre des particules primaires, passant de 60 nm en position (2a) à environ 10 nm en position (2c).

Récemment, Echavarria *et al.* [81] ont mis en évidence un processus peu connu induit par l'oxydation des suies par le dioxygène : la fragmentation, déjà observée par Neoh *et al.* [82] en 1985. Echavarria *et al.* [81] ont mesuré les répartitions de taille des particules le long de l'axe de la deuxième flamme d'un brûleur à deux étages. Ce type de brûleur produit une première flamme riche ayant pour but de produire massivement des suies, et une seconde flamme à richesse variable pour oxyder et brûler les suies. Cette configuration permet de découpler les deux phénomènes en concurrence (formation et oxydation) pour faciliter leur étude. Lorsque la richesse globale de la flamme est inférieure à la stœchiométrie, des nanoparticules sont formées en grande quantité au cours de l'oxydation. Elles résultent de la fragmentation d'agrégats provoquée par la diffusion du dioxygène à travers les pores des agrégats. L'oxydation se fait alors de l'intérieur et brise les liaisons entre particules primaires. Lorsque la flamme est globalement riche en combustible, la fragmentation n'a pas lieu car le dioxygène est consommé quasi-intégralement par la combustion des hydrocarbures, et les radicaux $OH\cdot$ se forment plus rapidement et dominent l'oxydation.

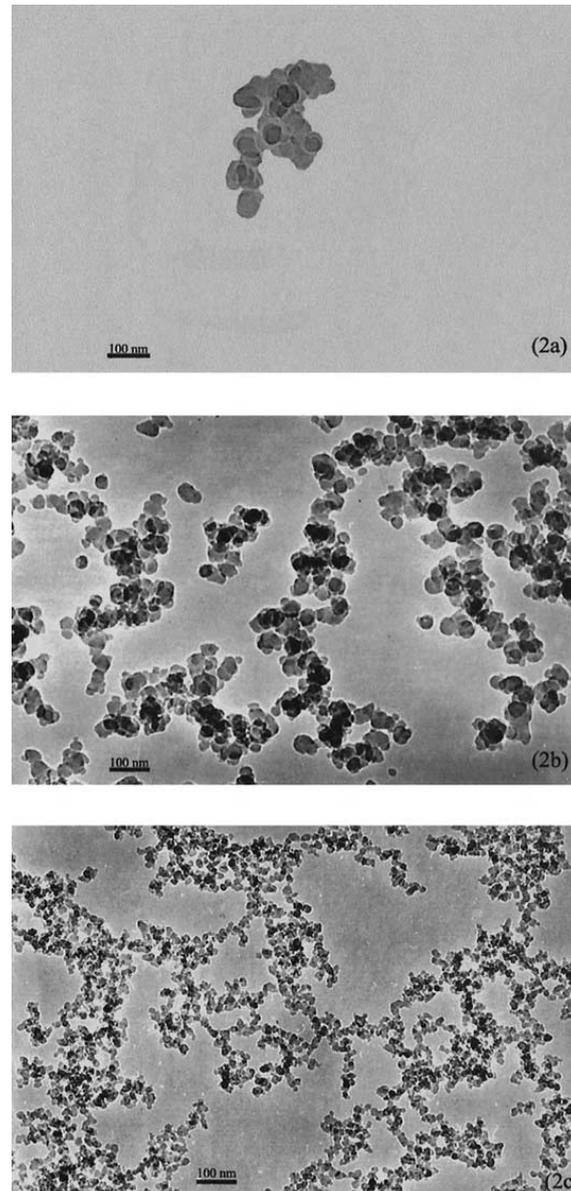


FIG. 3.3 | Clichés TEM, issus de [80], d'agrégats de suie le long de l'axe d'une flamme laminaire de diffusion éthylène/air à pression atmosphérique : (2a) position dans la zone de début de formation des suies, (2b) position correspondant à la concentration maximale de suies, (2c) position en fin de zone d'oxydation des suies.

3.1.1.4 Coagulation

Les particules nanométriques interagissent également entre elles par collision. Ce phénomène est nommé coagulation et regroupe deux régimes d'interaction : la coalescence et l'agglomération. Lorsque les deux particules fusionnent pour n'en former qu'une, on parle de coalescence. L'agglomération a lieu quant à elle lorsque les deux particules se collent entre elles tout en gardant leur propre forme, ce qui forme progressivement des chaînes de particules primaires. Il faut bien distinguer les trois termes *coagulation*, *coalescence* et *agglomération*. Dans la littérature, il arrive que l'amalgame entre ces termes soit fait. En particulier, lorsque le modèle considéré fait l'hypothèse de particules sphériques, agglomération et coalescence sont modélisées de la même façon, par une étape de coalescence. Deux points de vue distincts peuvent expliquer phénoménologiquement les mécanismes physiques qui interviennent dans ces régimes [63].

Nature visqueuse des particules naissantes

Le premier consiste à considérer le comportement mécanique des particules naissantes comme analogue à celui de gouttelettes visqueuses, de forme sphérique et déformables. Cette idée a depuis longtemps été émise en tant que concept [61]. Avec le développement des techniques de mesures, et les avancées des techniques de microscopie, les observations confirment progressivement ce concept. Zhao *et al.* [83] l'ont déduit de façon indirecte par des observations au moyen de différentes techniques de mesure, dont l'observation par TEM. Et plus récemment, Abid *et al.* [84, 85] ont observé par AFM (*Atomic Force Microscopy*) la forme tridimensionnelle des particules naissantes ayant impacté le substrat de la sonde de prélèvement, et confirment l'hypothèse d'un état pseudo-liquide analogue à celui de gouttes liquides, pour l'aspect mécanique de leur comportement. Cain *et al.* [86] confirment également cette hypothèse en démontrant que les particules naissantes sont riches en composés aliphatiques et ont un rapport atomique C/H proche de l'unité. Cette propriété des suies naissantes devra être confirmée par des études futures dans des flammes de conditions variées, mais semble déjà pleinement établie pour les flammes laminaires prémélangées éthylène/oxygène/argon. Dans le cas de particules naissantes pseudo-liquides, la coalescence est alors considérée comme prédominante. Après ce stade de leur existence, les particules se solidifient progressivement pour former des sphères rigides et l'agglomération remplace la coalescence lors des collisions.

Prédominance de la croissance en surface

L'autre point de vue ne fait pas d'hypothèse sur la nature physique des particules. Il consiste à dire que la vitesse de la croissance en surface (voir section 3.1.1.2) détermine la forme des particules agglomérées. Comme la croissance en surface est très rapide sur les particules naissantes (car leur surface est très réactive) elle tend à lisser la forme des particules entrées en collision, jusqu'à l'obtention d'une sphère. Lorsque la réactivité en surface décroît (effet de vieillissement détaillé en section 3.1.1.2), la croissance en surface est fortement ralentie. Après leur collision, les particules conservent dans ce cas leur propre forme, et l'agglomérat résultant se compose des particules sphériques alors appelées particules primaires (par exemple Tian *et al.* [87]) ou sphérules (Hu *et al.* [88]).

En réalité, les deux phénomènes de coalescence et d'agglomération doivent avoir lieu simultanément. La prédominance de l'un sur l'autre est dépendante des condi-

tions environnantes comme la température, mais aussi des propriétés des particules comme leur structure et leur composition [89]. Selon plusieurs auteurs [89, 90], la coalescence est un phénomène encore mal connu fondamentalement et difficile à caractériser expérimentalement, ce qui empêche le développement de modèles appropriés.

3.1.2 Modèles pour la simulation numérique

Pour prédire les niveaux de concentration de suie et la topologie de leur répartition spatiale dans les dispositifs industriels complexes, comme les chambres de combustion ou les fours verriers, l'outil numérique s'avère très utile. Ceci présuppose cependant de mettre en équation les phénomènes intervenant dans la physique de formation et d'oxydation des suies. Ces phénomènes encore mal connus sont non-linéaires, et couplés entre eux et avec la chimie en phase gazeuse. Leur modélisation est délicate et peut nécessiter un niveau de ressources informatiques élevé. On distingue dans ce qui suit la modélisation de la cinétique de formation des suies, qui se traduit par un mécanisme réactionnel, et la modélisation de la dynamique des particules.

3.1.2.1 Modélisation de la cinétique de formation des suies

Construire une cinétique de formation des suies consiste à considérer les phénomènes identifiés en section 3.1.1 comme autant d'étapes cinétiques fournissant des termes sources pour les propriétés locales des suies comme la fraction massique (ou volumique) et le nombre de particules (ou leur taille). On distingue plusieurs niveaux de modélisation (ou classes de modèles) [62] : les modèles empiriques, les modèles semi-empiriques et les modèles détaillés. On s'intéresse plus particulièrement dans cette étude aux deux premières classes car les ressources informatiques ne permettent pas à l'heure actuelle d'utiliser des modèles détaillés dans des codes de simulation industriels. Les revues de Kennedy [62] et de Kraft [91] constituent de bonnes sources d'information pour prendre connaissance des modèles existants. On met en valeur dans les sections suivantes les caractéristiques des modèles les plus utilisés pour guider le choix d'un modèle empirique et d'un autre semi-empirique pour les besoins des travaux de la thèse. On parlera aussi brièvement des schémas cinétiques détaillés.

Modèles empiriques

Les modèles empiriques utilisent des corrélations issues de mesures expérimentales pour évaluer la fraction volumique de suies. Ils sont peu prédictifs, et leurs conditions d'application sont restreintes aux conditions expérimentales sur lesquelles ils sont basés, mais ils ont l'avantage de ne pas être dépendants de concentrations d'espèces minoritaires. Ils ne dépendent généralement que de la concentration de combustible, ou de la fraction de mélange. On peut donc utiliser une cinétique globale pour la combustion avec un jeu réduit d'espèces chimiques, ce qui facilite l'application du modèle à des configurations exigeant des coûts de calcul élevés. L'hypothèse la plus courante est de considérer des particules sphériques de taille fixée, ce qui réduit le nombre de degrés de liberté du modèle et donc son coût.

Parmi les modèles empiriques, on distingue ceux qui utilisent une espèce intermédiaire et ceux qui sont directement basés sur la concentration de combustible. L'intermédiaire réactionnel est formé à partir du combustible et joue le rôle d'un précurseur de suie, comme l'acétylène. La formation des suies est ainsi décorrélée de l'oxydation du combustible.

Modèle de Kennedy : Parmi les modèles qui n'utilisent pas d'intermédiaire réactionnel, celui de Kennedy *et al.* [92] utilise comme paramètre la fraction de mélange pour évaluer les termes sources de croissance et d'oxydation des particules de suie. Il fait l'hypothèse d'un nombre uniforme de particules par unité de volume et s'applique à des flammes de diffusion. La chimie étant considérée comme infiniment rapide, le processus limitant de la combustion est le mélange. La fraction de mélange permet de décrire l'état local du mélange et donc dans ce cas de la combustion. Le modèle a été appliqué avec succès à deux flammes laminaires de diffusion, mais a révélé une forte sensibilité à la température, ce qui a rendu indispensable la prise en compte du rayonnement pour pouvoir estimer correctement les niveaux de suies dans les flammes calculées.

Modèle de Moss : Moss et ses collaborateurs ont développé un modèle basé sur la concentration de combustible. Il consiste à résoudre deux équations de transport pour la fraction volumique de suies f_v et le nombre de particules par unité de volume N . Les termes sources de ces équations prennent en compte la nucléation et la coagulation pour N , et la nucléation et la croissance en surface pour f_v . Les coefficients empiriques ont été ajustés sur des flammes laminaires de diffusion. Dans une première étude [93] le calcul d'une flamme turbulente de diffusion éthylène/air a été réalisé, en prenant en compte l'oxydation des suies par le dioxygène. L'effet de la pression sur la formation des suies a également été étudié expérimentalement et numériquement [94]. Les mesures ont confirmé la dépendance de f_v au carré de la pression, induite par la présence dans le terme source de f_v de la masse volumique et de N , dépendant linéairement de la pression. Le modèle a ensuite été amélioré, comme décrit dans la sous-section suivante portant sur les modèles semi-empiriques.

Modèle de Zhubrin : Très récemment, Zhubrin [95] a proposé un modèle original. Il différencie quatre régimes de combustion différents et se base sur la conservation des atomes pour calculer la composition des espèces chimiques et des suies via des relations algébriques, en fonction du régime identifié localement. Le modèle est moins empirique que les précédents et peu gourmand en ressources puisqu'il n'utilise que des relations algébriques. Cependant il n'a pas été validé sur une flamme académique pour évaluer la précision des prédictions de niveaux de suie.

Modèle de Said : Un modèle utilisant un intermédiaire réactionnel a été élaboré par Said *et al.* [96]. Il a été conçu pour être appliqué à la fois à des flammes de prémélange et de diffusion. Deux équations de transport sont résolues pour les fractions massiques de l'intermédiaire réactionnel et des suies. Les constantes du modèle sont nombreuses et certaines dépendent du combustible utilisé. Toutefois la formulation du modèle permet de réduire le nombre de ces constantes en utilisant une cinétique réduite ou détaillée plutôt qu'une réaction globale. Une flamme turbulente a été calculée en utilisant l'approche Euler-Lagrange de Borghi [97] pour prendre en compte les fluctuations turbulentes de grandeurs comme la concentration de dioxygène et la température auxquelles la formation et l'oxydation des suies sont très sensibles.

Modèle de Tesner-Magnussen : Ce modèle a été initialement élaboré par Tesner *et al.* [98, 99] à partir de mesures de suies dans une flamme laminaire de diffusion acétylène/hydrogène [98] et dans quatre autres mélanges hydrocarbure/hydrogène [99]. La cinétique de formation des suies est construite sur le modèle d'un processus

de réaction en chaîne radicalaire. L'espèce radicalaire est représentée sous la forme de particules fictives appelées noyaux radicalaires, qui jouent le rôle d'intermédiaire réactionnel. Le modèle a été repris par Magnussen et Hjertager pour l'intégrer dans l'approche EDC (Eddy-Dissipation Concept) pour la combustion turbulente [100]. Ils ajoutent au modèle original un terme source d'oxydation dépendant des grandeurs turbulentes locales. Le calcul de deux flammes de diffusion turbulentes acétylène/air a montré que le modèle est capable de prédire assez précisément les niveaux de suies dans ces flammes, à condition de choisir un diamètre moyen de particule de suie différent pour chaque flamme, et de modifier un paramètre numérique — identique pour les deux flammes — par rapport au modèle original. Plus récemment, Magnussen [101] a proposé une deuxième version du modèle qui prend en compte la proportion de carbone dans le combustible, et ajoute une dépendance de la nucléation au diamètre des particules de suie. Par ailleurs, une version généralisée a été développée par l'équipe de Magnussen [102] (référence introuvable) et détaillée par Kleiveland dans sa thèse [64]. Elle consiste à exprimer les termes sources du modèle en fonction de la quantité maximale de suie potentiellement formée, qui ne dépend que des constantes du modèle et de la masse volumique du mélange. On choisit alors la quantité de carbone contenue dans le combustible comme valeur pour la quantité maximale de suies formée, ce qui permet au modèle d'être adapté à un combustible quelconque.

Pour finir, certaines constantes du modèle ont été exprimées en fonction des conditions d'injection du combustible et des caractéristiques de la flamme dans l'étude de Lopez-Parra et Turan [103], pour rendre le modèle plus général dans le cadre d'une application aux flammes jet.

Modèles semi-empiriques

Les modèles semi-empiriques comportent les aspects les plus simples de la chimie et de la physique des processus intervenant dans la physique des suies. Pour chacun, on calcule un taux d'avancement fonction de coefficients ajustés sur les niveaux de suies mesurés sur une ou plusieurs flammes expérimentales. Ils sont basés sur la concentration en acétylène, ce qui nécessite de décrire la formation de C_2H_2 via un mécanisme cinétique détaillé ou une méthode de tabulation. En général, deux équations de transport sont résolues pour évaluer la fraction volumique (ou massique) de suies et le nombre de particules (par unité de volume ou de masse). Avec ces deux grandeurs, on peut calculer le diamètre des particules, supposées sphériques avec une distribution en taille localement monodisperse.

Les deux modèles les plus utilisés pour calculer les niveaux de suies dans des flammes turbulentes sont présentés ici. On détaillera dans la section 3.3 les simulations réalisées avec ces modèles.

Modèle de Moss : Le modèle de Moss décrit précédemment a été par la suite amélioré [104] sur deux aspects :

- (i) La nucléation et la croissance en surface dépendent de la concentration en acétylène plutôt que de la concentration en combustible ;
- (ii) L'oxydation des suies par le radical OH, identifié comme la principale espèce oxydante dans la flamme simulée [104], est prise en compte.

Le modèle est appliqué à la prédiction des suies dans une flamme de diffusion laminaire 2D éthylène/air. Les niveaux de suies prédits suivent les niveaux expérimentaux à condition de modéliser l'oxydation des suies par OH.

Plus tard, Brookes et Moss [105] repartent de la version de Moss [94] pour reformuler le modèle en introduisant des dépendances en pression et en concentration d'acétylène pour la nucléation et la croissance en surface, ainsi qu'une dépendance en surface totale de suie pour la croissance en surface. Cette dernière dépendance a pour but de modéliser la proportion de sites actifs disponibles en surface pour la réaction de croissance. En comparant le modèle avec les mesures réalisées par Syed *et al.* [106] sur une flamme laminaire de diffusion, les auteurs ont montré que la quantité de sites actifs peut être considérée comme proportionnelle à la surface totale de suie. L'application de ce modèle amélioré à une flamme turbulente à différents niveaux de pression est détaillée dans la section 3.3.

Modèle de Leung : Leung *et al.* [107] formulent un modèle analogue à celui de Moss [105] et l'appliquent à des flammes à contre-courant d'éthylène et de propane. Les deux modèles diffèrent sur trois points :

- (i) le taux de croissance est supposé proportionnel à la racine carrée de la surface de suies, plutôt que dépendant linéairement de la surface de suies ;
- (ii) l'espèce oxydante considérée n'est plus le radical hydroxyle mais le dioxygène ;
- (iii) les valeurs des paramètres empiriques sont différentes.

Notons que le point (i) est difficile à justifier car intuitivement, la croissance en surface doit dépendre linéairement du nombre de particules, et par conséquent de la surface de suies plutôt que de sa racine carrée.

Le modèle a d'abord été mis au point sur une flamme éthylène/air pour ajuster la valeur des constantes pré-exponentielles des étapes de nucléation et de croissance en surface. Appliqué ensuite sur une flamme propane/air, il a été nécessaire de doubler la constante pré-exponentielle de croissance pour obtenir des fractions volumiques de suies acceptables. Comme Leung *et al.* utilisent un mécanisme chimique détaillé composé de 34 espèces et 111 réactions directes, les erreurs liées à la prédiction de l'acétylène sont fortement réduites. Il reste donc à améliorer le modèle en lui-même pour qu'il soit plus prédictif.

Dans cette optique, Lindstedt [108] s'est intéressé à la sensibilité du modèle à l'étape de nucléation, ainsi qu'à l'interaction entre la phase gazeuse et la surface des suies. En utilisant comme précurseur de l'étape de nucléation le benzène plutôt que l'acétylène, les niveaux de suie dans des flammes à contre-courant propane/air sont proches des mesures expérimentales, sans devoir modifier les paramètres du modèle. Le modèle est alors applicable à des combustibles différents tout en restant très simple. Par ailleurs, Lindstedt a évalué l'influence de plusieurs formes de dépendance de la croissance en surface vis-à-vis de la surface ou de la masse de suies. Il obtient les meilleurs résultats avec un taux de croissance indépendant de la surface de suies, mais proportionnel au nombre de particules, même si cette hypothèse n'a pas de justification théorique admise.

Lindstedt et Louloudi [109] ont récemment amélioré le modèle en ajoutant deux termes d'oxydation par les espèces OH et O. Ils ont également couplé le modèle original avec la méthode des moments pour modéliser la dynamique des particules, en particulier l'agglomération des particules primaires en structures chainées à caractère fractal (voir section 3.1.2.2).

Modèles détaillés

Peu de schémas cinétiques détaillés ont été élaborés pour modéliser la formation des suies. Décrire la formation de toutes les espèces intermédiaires menant à la formation

des suies nécessite des données expérimentales qui ne sont pas toujours disponibles. Wang et Frenklach [110] et Appel *et al.* [111] ont développé des schémas très détaillés pour étudier les phénomènes cinétiques liés aux suies dans les flammes laminaires. Ces schémas décrivent les phénomènes de pyrolyse et d'oxydation du combustible et la formation des précurseurs de suies tels que l'acétylène, le benzène et les PAH. Pour cela, jusqu'à 100 espèces sont décrites via plus de 500 réactions. Ces schémas sont le plus souvent utilisés conjointement avec une modélisation de la cinétique de formation des suies et une méthode de dynamique des particules (voir section 3.1.2.2) pour pouvoir décrire leur distribution en taille (ou PSDF pour *Particle Size Distribution Function*) et ainsi obtenir une modélisation complète de l'évolution des particules de suie dans les flammes. C'est le cas de l'étude de D'Anna *et al.* [112] et plus récemment de celle de Zhang *et al.* [89] décrite plus loin dans la section 3.3. Cependant, ces modèles détaillés ne peuvent être utilisés que pour simuler des flammes simples de laboratoire, en raison du coût de calcul élevé nécessaire au traitement d'une centaine d'espèces et de la dynamique des particules.

3.1.2.2 Modélisation de la dynamique des particules

On appelle dynamique des particules les interactions des particules entre elles, par opposition à la cinétique des suies représentant les interactions gaz-particules. Elle correspond au phénomène de coagulation présenté en section 3.1.1.4, qui participe à la diversification des particules de suie en termes de masse et de structure (particules sphériques ou agrégats de forme fractale). Modéliser ce phénomène revient à caractériser la PSDF dans la flamme, ce qui fournit une information supplémentaire par rapport aux modèles cinétiques qui ne caractérisent que les concentrations de suies en masse (ou en volume) et en nombre. Remarquons cependant que certains modèles cinétiques, comme celui de Leung *et al.* [107], proposent une modélisation cinétique de la coagulation censée améliorer la prédiction du nombre de particules de suies lorsqu'aucun modèle de dynamique des particules n'est utilisé. Néanmoins lorsque les suies sont supposées sphériques, la modélisation de la coagulation n'est pas forcément plus proche de la réalité (on pourra se référer à la section B.2.2.4 de l'annexe B).

L'évolution temporelle d'un ensemble de particules est décrite par les équations de Smoluchowski [113] qui sont ici retranscrites suivant leur reformulation par Mehta [63], Lindstedt et Louloudi [109] :

$$\frac{dN_1}{dt} = - \sum_{j=1}^{\infty} \beta_{1,j} N_1 N_j, \quad (3.4)$$

$$\frac{dN_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{j,i-j} N_j N_{i-j} - \sum_{j=1}^{\infty} \beta_{i,j} N_i N_j, \quad \text{pour } i = 2, 3, \dots, \infty. \quad (3.5)$$

Dans ces équations, N_i est le nombre de particules de taille i par unité de volume. La valeur $i = 1$ concerne les plus petites particules. $\beta_{i,j}$ est le coefficient de collision entre les particules de taille i et celles de taille j . Ce coefficient est généralement dépendant de N_i , N_j , et des masses des particules m_i et m_j . Le premier terme du membre de droite de l'équation (3.5) représente la création des particules de taille i à partir de particules plus petites, et le second terme représente la disparition des particules de taille i par collision avec d'autres particules de taille quelconque. Ces équations ne représentent que les phénomènes induits par les collisions. Pour décrire le phénomène de nucléation et les réactions en surface, il est nécessaire de compléter les membres de droite des équations (3.4) et (3.5) (voir la thèse de Mehta [63]).

Lorsque N_i est connu pour $i \in [1, \infty[$, la PSDF est totalement déterminée et les propriétés physiques de l'ensemble des particules peuvent être facilement déduites. Deux difficultés apparaissent pour déterminer les N_i :

- l'étendue de la gamme de classes de particules, qui induit un coût de calcul élevé pour le traitement des équations (3.5) ;
- l'évaluation du coefficient de collision $\beta_{i,j}$ suivant les valeurs de i et j .

Deux approches sont principalement utilisées pour résoudre les équations (3.4) et (3.5) avec un coût raisonnable : la méthode des moments et les méthodes sectionnelles. Leur principe est expliqué succinctement dans les paragraphes ci-dessous.

On peut également noter que les méthodes de dynamique des particules de suies peuvent également être utilisées pour modéliser la dynamique des PAH. Les phénomènes mis en jeu sont en effet très proches. Cette modélisation permet ensuite d'utiliser un modèle de suies qui s'appuie sur les PAH. Zamuner et Dupoirieux [8] et récemment Di Domenico *et al.* [5] ont utilisé l'approche sectionnelle pour calculer des flammes laminaires [5] et turbulentes [8], avec pour objectif l'application de cette approche à la simulation de chambres de combustion.

Méthode des moments

La méthode des moments consiste à décrire l'évolution temporelle des moments statistiques de la PSDF, sans hypothèse sur la forme de cette PSDF. Le moment M_r d'ordre r est formulé de la façon suivante [63] :

$$M_r = \sum_{i=1}^{\infty} m_i^r N_i, \quad (3.6)$$

avec m_i la masse d'une particule de la classe i . On remarque que les moments d'ordre 0 et 1 sont par définition identiques respectivement au nombre total de particules par unité de volume N_s , et à la masse totale de particules par unité de volume. Ces deux moments permettent donc de caractériser les deux grandeurs globales N_s et $f_v = M_1/\rho_s$, à l'instar des modèles de cinétique pure comme ceux présentés dans la section 3.1.2.1.

En multipliant les équations (3.4) et (3.5) par m_i^r et en les sommant sur toutes les classes $i \in [1, \infty[$, on obtient l'équation suivante :

$$\frac{dM_r}{dt} = G_r, \quad (3.7)$$

où G_r est fonction des N_i , m_i^r et $\beta_{i,j} \forall i, j \in [1, \infty[$. On peut montrer que la détermination de l'ensemble des moments (pour $r \in [0, \infty[$) équivaut à définir totalement la PSDF. En pratique, seuls quelques moments sont considérés (6 au maximum) et suffisent à obtenir une bonne définition de la PSDF (voir Lindstedt et Louloudi [109] ou Mehta *et al.* [6]). La méthode des moments permet alors de modéliser la dynamique des particules de suie en résolvant un nombre restreint d'équations de transport basées sur l'équation (3.7), ce qui à l'avantage d'être peu coûteux en temps de calcul. Cette méthode a été par conséquent largement utilisée dans la modélisation des particules de suie [6, 75, 109, 114–119].

Méthodes sectionnelles

On a vu dans la sous-section précédente que la méthode des moments ne fournit qu'une description statistique de la PSDF, en transportant ses moments (moyenne, variance, dissymétrie. . .). En revanche, les méthodes sectionnelles décrivent la PSDF de façon exacte, mais un nombre élevé de sections doit être considéré (35 [120] à 100 [121] sections).

L'approche sectionnelle consiste à diviser la PSDF en catégories de particules de volume proche. Ces catégories sont appelées sections. Pour délimiter ces sections, différentes solutions sont possibles. Netzell *et al.* [121] proposent par exemple comme définition du volume maximal des particules de la section i :

$$v_{i,\max} = v_{\text{MIN}} \left(\frac{v_{\text{MAX}}}{v_{\text{MIN}}} \right)^{i/i_{\max}}, \quad (3.8)$$

où i_{\max} est le nombre total de sections, v_{MIN} est le volume de la plus petite particule, et v_{MAX} celui de la plus grosse particule. La limite basse de la section est identique à la limite haute de la section précédente, soit $v_{i,\min} = v_{i-1,\max}$. Un scalaire Q_i conservé doit être choisi pour caractériser chaque section. Celui-ci est calculé par intégration de la PSDF :

$$Q_i = \int_{v_{i,\min}}^{v_{i,\max}} q_i(v) dv \quad (3.9)$$

Netzell *et al.* [121] ont par exemple choisi la fraction volumique de suies pour q_i . Une évolution de q_i à l'intérieur des sections doit être supposée pour calculer Q_i . Généralement, une évolution linéaire est supposée et calculée en fonction des sections voisines. La quantité Q_i obéit alors à l'équation de transport d'un scalaire sans utiliser de paramètres de transport dépendant de la taille des particules de la section i .

Par ailleurs, on peut chercher à modéliser la formation d'agglomérats de forme fractale, et pour cela, une possibilité est de transporter deux scalaires au lieu d'un seul. Park et Rogak [122] ont choisi de transporter les nombres d'aggrégats N_i et de particules primaires $N_{p,i}$ par unité de volume et par section. Ces deux scalaires permettent alors de quantifier le nombre moyen de particules primaires par aggrégat de la section i . Wen *et al.* [120] considèrent en plus de ces deux scalaires la masse représentative d'un aggrégat de la section i pour les besoins de leur modèle.

La méthode à sections fixes présentée ci-dessus induit une dissipation numérique trop forte si le nombre de sections est faible [120], en particulier pour modéliser le phénomène de croissance en surface. C'est pourquoi des alternatives ont été développées, comme la méthode à sections mobiles développée par Tsantilis *et al.* [123], dans laquelle la taille représentative des aggrégats d'une section évolue sous l'effet de la croissance en surface. Cette méthode convient parfaitement à la modélisation de la croissance en surface, mais des difficultés supplémentaires apparaissent pour prendre en compte la nucléation et la coagulation, et également les phénomènes de transport de particules en milieu spatialement inhomogène (diffusion, thermophorèse. . .).

Park et Rogak [122] ont développé une nouvelle méthode pour diminuer la diffusion numérique de la méthode à sections fixes sans adopter le formalisme de la méthode à sections mobiles. Avec cette méthode à sections fixes, ils ont obtenu un bon accord avec la méthode à sections mobiles.

3.2 CARACTÉRISATION EXPÉRIMENTALE DES SUIES DANS LES FLAMMES

On s'attache dans cette section à donner une vue d'ensemble des travaux récents concernant la caractérisation expérimentale des suies dans des flammes laminaires et turbulentes. L'objectif est de montrer quelles sont les données expérimentales dont on dispose dans la littérature pour la validation des modèles numériques, et quel est leur niveau de précision. Il s'agit aussi de mettre en évidence les axes de recherche actuels sur la caractérisation expérimentale des suies.

Pour cela, on décrit d'abord les principales méthodes existantes pour caractériser les suies dans les flammes. On fournit ainsi les éléments de compréhension nécessaires

à la distinction des nombreuses études expérimentales réalisées sur les suies dans des conditions de combustion variées. Une vue d'ensemble de ces travaux est ensuite donnée en section 3.2.2.

3.2.1 Diagnostics pour la caractérisation des suies dans les flammes

Ce travail de thèse n'ayant pas un caractère expérimental, la description des méthodes présentées ici est relativement peu détaillée, mais elle permet de situer leur principe de mesure, d'avoir une idée des avantages et inconvénients de chacune des méthodes et de connaître les sources d'incertitude qui peuvent influencer les mesures. Ces informations permettront de choisir au mieux des études expérimentales pour la validation des modèles numériques.

Cette partie s'inspire largement de la revue de D'Anna [124] qui répertorie les méthodes de détection des particules dans les flammes. En outre, quelques précisions supplémentaires seront apportées sur les méthodes de mesures par extinction et par diffusion. On distingue deux groupes de méthodes : les mesures optiques, qui sont pour la plupart non-intrusives mais qui sont indirectes et reposent sur le choix *a priori* de paramètres caractéristiques des particules mesurées, comme l'indice de réfraction complexe ou la dimension fractale des agrégats ; et les techniques de prélèvement et d'analyse de particules dans les flammes, forcément intrusives mais ne nécessitant pas d'hypothèses comme les mesures optiques indirectes.

3.2.1.1 Méthodes de mesure

Light Extinction (LE) : L'un des premiers diagnostics optiques à avoir été utilisé est basé sur la mesure de l'extinction d'un rayonnement incident lors de son passage à travers la flamme. On assimile alors les suies à l'ensemble des composés de la flamme qui absorbent ou diffusent la source de lumière incidente. La méthode consiste à calculer un coefficient d'extinction K_{ext} dépendant du rapport des luminances transmise et incidente I/I_0 qui s'exprime, sur une trajectoire non-uniforme de longueur Δs :

$$\frac{I}{I_0} = \exp \left(- \int_0^{\Delta s} K_{\text{ext}} ds \right). \quad (3.10)$$

Deux méthodes sont en mesure de déterminer ce coefficient K_{ext} . La première — la plus classique dans le cas d'une flamme à symétrie axiale — consiste à mesurer la luminance transmise à travers l'épaisseur de la flamme Δs , à plusieurs positions radiales dans un même plan orthogonal à l'axe, pour une hauteur donnée au-dessus du brûleur^(c). Il faut alors utiliser une méthode de déconvolution pour en déduire le profil radial de K_{ext} dans la flamme. La seconde méthode consiste à insérer une sonde optique dans la flamme pour effectuer une mesure ponctuelle. On obtient directement K_{ext} par l'équation (3.10), si Δs , l'épaisseur de flamme traversée par la source, est assez petite pour que K_{ext} soit uniforme sur celle-ci :

$$K_{\text{ext}} = \frac{\ln(I_0/I)}{\Delta s}. \quad (3.11)$$

Cette seconde méthode rend la mesure d'extinction possible dans les flammes optiquement épaisses, dont la luminance transmise à travers toute l'épaisseur de la flamme est trop faible pour pouvoir réaliser une mesure précise. Cette seconde méthode présente

(c). On dit que cette mesure est réalisée sur une ligne de vue, par traduction littérale du terme anglais *line-of-sight*.

cependant l'inconvénient d'être intrusive. Néanmoins, Yang *et al.* [125] ont comparé les deux méthodes sur une flamme d'éthylène et ont montré que la sonde ne perturbe presque pas la flamme à l'endroit de la mesure. Cette méthode a été utilisée entre autres par l'équipe de Köylü [88, 126, 127] et par Coppalle et Joyeux [128].

Pour déduire la fraction volumique de suies f_v de la valeur de K_{ext} , il ne faut pas oublier que la mesure de l'extinction inclut l'absorption et la diffusion du rayonnement par les particules. Deux solutions sont possibles. Dans le cas où les particules de rayon moyen r sont petites devant la longueur d'onde λ de la source lumineuse monochromatique utilisée pour la mesure, *i.e.* :

$$\frac{2\pi r}{\lambda} \ll 1, \quad (3.12)$$

on peut utiliser l'approximation de Rayleigh, qui consiste à exprimer l'absorption et la diffusion de la façon suivante :

$$K_{\text{abs}} \propto \frac{1}{\lambda} \quad \text{et} \quad K_{\text{diff}} \propto \frac{1}{\lambda^4}. \quad (3.13)$$

Dans ce cas, on peut négliger la diffusion des particules par rapport à l'absorption. On a donc $K_{\text{ext}} = K_{\text{abs}} + K_{\text{diff}} \simeq K_{\text{abs}}$. On exprime alors K_{ext} en fonction de f_v [129] :

$$K_{\text{ext}} \simeq -\mathcal{I} \left\{ \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right\} \frac{6\pi f_v}{\lambda}, \quad (3.14)$$

où \mathcal{I} est l'opérateur partie imaginaire, et m est l'indice de réfraction complexe des suies, choisi au préalable.

Dans le cas où l'approximation de Rayleigh n'est pas applicable (faisceau laser dans le bleu ou l'ultraviolet), l'équation (3.14) est étendue pour prendre en compte la diffusion des particules via le coefficient $\rho_{\text{sa}} = K_{\text{diff}}/K_{\text{abs}}$ [125] :

$$K_{\text{ext}} = -\mathcal{I} \left\{ \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right\} \frac{6\pi f_v}{\lambda} (1 + \rho_{\text{sa}}). \quad (3.15)$$

Le coefficient ρ_{sa} dépend de la flamme mesurée et varie le long de son axe. Sa détermination nécessite des mesures de diffusion (voir le prochain paragraphe) couplées à une théorie approximative sur la diffusion des agrégats.

Les nanoparticules, mis en évidence par Commodo *et al.* [68] par exemple, ont un comportement proche des espèces en phase gazeuse et absorbent dans l'ultraviolet plutôt que dans le visible (jusqu'à 350 nm). Pour les détecter, il faut adapter la longueur d'onde de la source lumineuse et retrancher à l'extinction mesurée l'absorption d'autres composés comme les espèces CO_2 , H_2O et les composés aromatiques, qui absorbent fortement dans l'UV. Joutsenoja *et al.* [130] et Jensen *et al.* [131] ont en effet montré que le CO_2 à haute température peut fortement absorber un rayonnement jusqu'à 230 nm. D'Alessio *et al.* [132] a également mis en évidence la présence dans des flammes de composés aromatiques absorbant à 266 nm.

Light Scattering (LS) : La mesure de diffusion est analogue à celle de l'extinction, mais la mesure ne se fait pas dans l'axe du faisceau incident. En utilisant les expressions des coefficients d'absorption et de diffusion dans l'approximation de Rayleigh [129], on peut exprimer le diamètre des particules, pour une assemblée de particules sphériques de taille uniforme :

$$d_p = \left(-\frac{3}{2} \frac{K_{\text{diff}}}{K_{\text{ext}}} \frac{\mathcal{I} \left\{ \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right\}}{\left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right|^2} \right)^{1/3} \frac{\lambda}{\pi}. \quad (3.16)$$

Ce raisonnement est généralisable à plusieurs classes de particules de tailles différentes [124]. Yang et Köylü [127] améliorent le raisonnement en découplant le diamètre des particules primaires de la taille des agrégats. Ils calculent le diamètre des particules primaires en fonction d'une mesure d'extinction, d'une mesure de diffusion et de deux paramètres empiriques caractérisant les agrégats de forme fractale. Le rayon de giration des agrégats est par ailleurs calculé à partir de la variation relative de l'intensité du rayonnement diffusé entre deux mesures de diffusion à des angles différents par rapport à la direction du faisceau incident. On peut en déduire le nombre de particules primaires par agrégat.

Laser Induced Incandescence (LII) : Cette méthode plus récente permet d'établir de manière directe une cartographie de fraction volumique de suies dans un plan traversant la flamme ou simplement de manière ponctuelle. Les particules sont chauffées intensément par une impulsion laser (plane ou ponctuelle) et le rayonnement induit est mesuré. L'intensité du rayonnement est corrélée à la fraction volumique de particules, et son évolution temporelle est corrélée à la taille des particules. Néanmoins cette méthode nécessite une calibration par une mesure d'extinction pour pouvoir fournir des mesures quantitatives.

Laser Induced Fluorescence (LIF) : Analogue à la LII, la LIF utilise un laser dans l'UV pour induire non pas un échauffement mais des transitions électroniques à certaines classes de molécules comme les PAH, aux nanoparticules de suie et aux molécules riches en atomes d'oxygène. La désexcitation de ces molécules provoque une émission de photons : c'est la fluorescence. La difficulté de la mesure réside dans la distinction des nanoparticules de suie et des PAH, dont les spectres de fluorescence sont très ressemblants. Ce problème est résolu en utilisant un laser polarisé qui permet de remonter à la taille des particules (voir D'Anna [124] pour plus d'informations).

Differential Mobility Analysis (DMA) : L'analyse par DMA permet de déterminer la distribution en taille des particules prélevées dans la flamme. Un système de prélèvement à taux de dilution élevé doit être utilisé pour baisser la température de l'échantillon et ainsi figer les réactions chimiques, ainsi que pour éviter toute interaction entre les particules. La classification des particules s'effectue suivant leur mobilité électrique. Ce dispositif permet de détecter des particules de 1 à 100 nanomètres de diamètre.

Thermophoretic Sampling (TS) : Cette autre méthode de prélèvement utilise les forces de thermophorèse pour attirer les particules dans la flamme en y insérant une surface froide parallèle à l'écoulement pendant quelques dizaines de millisecondes, en un point localisé de la flamme. Les particules sont piégées dans un substrat et peuvent être analysées et observées ultérieurement. On obtient la distribution en taille et la morphologie des particules par observation avec un microscope électronique à transmission de haute résolution (TEM) ou un microscope à force atomique (ATM). Le microscope à force atomique fournit une topologie 3D de grande précision (entre 1 Å et 1 nm) de la surface du substrat tandis que le microscope électronique à transmission ne fournit qu'une image 2D (voir figure 3.3).

3.2.1.2 Sensibilité des méthodes de mesure

Les méthodes décrites ci-dessus sont sensibles à différents paramètres. Les mesures d'extinction et de diffusion nécessitent le choix empirique de l'indice de réfraction des

particules, qui dépend de leur nature chimique et de la longueur d'onde du rayonnement incident. Il faut également prendre en compte l'absorption partielle de la phase gazeuse dans l'UV. Pour les mesures d'extinction sans sonde optique, des erreurs numériques non négligeables sont créées par l'opération d'inversion, d'autant plus dans les flammes turbulentes. La fonction d'extinction (3.10), en exponentielle, est en effet une fonction non linéaire du coefficient d'extinction, ce qui nécessite d'utiliser en milieu turbulent des méthodes d'inversion complexes et moins précises. Les méthodes LII et LIF ont l'avantage de s'affranchir de ces techniques d'inversion. Elles permettent d'obtenir des évolutions temporelles de fraction volumique dans des plans, ce qui est très utile pour la validation des simulations numériques instationnaires. Néanmoins leur calibration par méthode d'extinction rend les mesures quantitatives dépendantes des paramètres de sensibilité de la méthode LE. Enfin, le prélèvement de particules dans la flamme est particulièrement délicat. La DMA est sensible à la perte de particules (*a fortiori* les plus petites) dans le système de dilution. Malgré tout, le taux de dilution doit être élevé pour éviter tout phénomène d'interaction entre les particules après leur prélèvement. Pour le TS, la sonde doit être protégée avant et après l'exposition ponctuelle dans la flamme, pour éviter tout dépôt parasite lorsque la sonde traverse la flamme pour son insertion ou son retrait.

3.2.1.3 Conclusion

Les méthodes qui ont été décrites permettent de réaliser des diagnostics de fraction volumique de suies et de nanoparticules, de distribution en taille et de morphologie des suies dans les flammes laminaires et turbulentes. Ces méthodes sont cependant sensibles à différents paramètres difficiles à évaluer.

3.2.2 Études expérimentales des suies dans les flammes

On présente dans cette section des études expérimentales choisies afin de montrer quelles sont les mesures disponibles dans la littérature pour la validation des modèles numériques, et mettre en évidence le niveau de précision actuel des techniques de mesure utilisées. On révèle également les axes de recherche actuels sur la caractérisation expérimentale des suies.

On se base pour cela sur le tableau A.2, présent en annexe A, qui synthétise une trentaine d'études expérimentales regroupées par régime de combustion. En régime laminaire, les flammes générant beaucoup de suies sont de type prémélangées riches ou de diffusion. En régime turbulent, la réalisation de flammes prémélangées riches est plus dangereuse, car la flamme peut remonter dans le système d'injection si les débits sont mal contrôlés. Les flammes turbulentes généralement étudiées sont donc des flammes de diffusion. En outre, les études utilisent des configurations expérimentales récurrentes. C'est pourquoi, dans notre tableau, elles sont regroupées préférentiellement par configuration de référence.

3.2.2.1 Flammes laminaires prémélangées

On distingue en premier lieu les flammes laminaires prémélangées, qui sont généralement produites par un brûleur poreux. Ce type de brûleur permet la stabilisation d'une flamme plane au-dessus de la surface du brûleur, et empêche sa remontée à travers le système d'injection. Pour leur modélisation, on peut considérer cette flamme comme une flamme monodimensionnelle, du fait que les grandeurs physiques la caractérisant

varient essentiellement suivant une seule direction. Cette hypothèse simplifie énormément les équations qui permettent de les modéliser. La conception de codes de calcul dédiés à la simulation de ce type de flamme permet d'utiliser des cinétiques chimiques détaillées et des modèles de suies complexes avec un coût de calcul acceptable, afin d'étudier en détails la formation des suies et d'améliorer les modèles. Ce type de flamme constitue en outre le premier cas de validation de tout modèle de suies.

Parmi les études présentées dans le tableau A.2, on distingue les travaux de Zhao et ses collaborateurs [67, 133, 134] qui fournissent une caractérisation détaillée de la distribution en taille des particules de suie dans une flamme $C_2H_4-O_2$ diluée. Ils ont veillé à s'affranchir des biais introduits par l'extraction des particules hors de la flamme, comme la perte de particules dans le système de dilution et la coagulation des particules au cours de leur transport vers l'analyseur. Ils ont également étudié l'influence de la température sur la distribution en taille des particules. Ils ont ainsi montré que la nucléation peut persister dans la zone de croissance en-dessous d'une température critique d'environ 1850 K, ce qui induit une distribution en taille bimodale. L'observation d'une corrélation entre cette nucléation persistante et la concentration de PAH en fonction de T confirme l'hypothèse faite par la plupart des modèles [65, 75, 111] d'une nucléation basée sur la dimérisation de monomères PAH.

Une autre étude récente semble très intéressante pour la validation des simulations numériques de flammes 1D prémélangées. Abid *et al.* [135] proposent en effet une nouvelle sonde de prélèvement intégrée à une plaque plane à température imposée. La flamme n'est plus libre mais impacte sur la plaque. Cette sonde se substitue aux sondes tubulaires [67, 133] dont la perturbation induite dans la flamme est souvent négligée dans les modélisations monodimensionnelles. Dans le cas d'un impact sur une plaque plane, on peut transformer les équations à résoudre pour simuler l'écoulement en leur donnant un caractère monodimensionnel. On peut alors simuler l'écoulement en prenant en compte de façon rigoureuse la perturbation induite par la sonde. Abid *et al.* montrent par ailleurs qu'une sonde tubulaire se comporte aussi localement comme une plaque plane. Les résultats des études précédentes sont donc exploitables à condition de simuler une flamme impactante et non une flamme libre comme cela est fait couramment. L'avantage d'une sonde plane est la possibilité d'en imposer la température, ce qui est difficile avec les sondes tubulaires. On arrive alors à définir correctement les conditions aux limites utilisées pour la simulation.

3.2.2.2 Flammes laminaires de diffusion

L'étude des suies dans les flammes laminaires de diffusion est plus complexe que dans les flammes 1D laminaires prémélangées. Les flammes de diffusion sont généralement à symétrie axiale et les phénomènes de formation et d'oxydation des suies doivent être décrits dans les directions axiale et radiale. Certaines flammes comme celles de Santoro *et al.* [136], McEnally *et al.* [137] et Snelling *et al.* [138] ont été largement documentées (voir tableau A.2, annexe A). Les mesures ont permis de caractériser les particules primaires et les agrégats, et les méthodes de mesure et d'analyse ont pu être améliorées. Tian *et al.* [87] ont par exemple développé une méthode d'analyse d'images TEM qui extrait des informations sur la nature tridimensionnelle des agrégats à partir des clichés TEM bidimensionnels, pour déterminer le nombre de particules primaires par agrégat. Cette méthode s'affranchit des paramètres empiriques nécessaires à la méthode d'analyse conventionnelle. Elle est basée sur l'exploitation des différents niveaux de gris observés sur les images d'agrégat, qui traduisent l'épaisseur locale de l'agrégat dans la direction normale au plan de l'image. De plus, on peut identifier avec

cette méthode des structures carbonées qui ne sont pas des agrégats, et qui ne peuvent pas être éliminées de l'analyse avec la méthode conventionnelle.

En marge de ces configurations de référence à la pression atmosphérique, certaines équipes ont étudié l'effet de la pression sur la formation des suies [74, 139], ce qui est particulièrement intéressant pour la simulation numérique de chambres de combustion. Liu *et al.* [74] fournissent les distributions de fraction volumique de suies dans des flammes de 5 à 40 atm. Une étude numérique de ces flammes leur a permis de tester la dépendance du taux de croissance en surface vis-à-vis de la surface totale des particules. Quant à Kim *et al.* [139], ils ont caractérisé à la fois les suies (T , f_v et d_p), les espèces majoritaires et les radicaux O, H et OH dans des flammes de 1 à 8 atm. Ils ont constaté que l'effet de la pression sur les processus de formation et d'oxydation des suies est reproductible avec les théories existantes. En particulier, ils ont montré que le mécanisme HACA est capable de modéliser la croissance en surface jusqu'à une pression d'au moins 8 atm.

Notons que les mesures dans des flammes partiellement prémélangées sont assez rares dans la littérature. Comme la combustion dans les foyers industriels récents est partiellement prémélangée, ce type de flamme laminaire est nécessaire pour valider les modèles de suies. Deux études [140, 141] sont mentionnées dans le tableau A.2. Arana *et al.* [140] fournissent des résultats adéquats pour la validation numérique (profils radiaux de f_v pour six positions axiales et cinq richesses de flamme). Ils ont mis en évidence l'évolution non monotone de la fraction volumique de suie en fonction de la richesse, qui présente un maximum à richesse élevée supérieur au niveau mesuré dans la flamme de diffusion correspondante.

3.2.2.3 Flammes turbulentes de diffusion

Les flammes de diffusion turbulentes étudiées en laboratoire sont souvent proches de celles rencontrées dans les systèmes de combustion industriels, tout en ayant une complexité abordable pour la mesure et l'étude de la formation des suies dans ces flammes. L'équipe de Hu, Yang et Köylü [88, 125–127] a caractérisé deux flammes turbulentes éthylène/air et acétylène/air au moyen de méthodes optiques (LE, LS) et de prélèvement (TS-TEM). La flamme acétylène/air se distingue de la flamme éthylène/air par son épaisseur optique élevée similaire à celle rencontrée à haute pression dans les moteurs. Les auteurs ont veillé à confronter les résultats obtenus par les différentes méthodes de mesure et à distinguer la caractérisation des particules primaires et des agrégats.

L'autre étude remarquable parmi celles présentées dans le tableau A.2 a été réalisée par Brookes et Moss [142] sur une flamme méthane/air à 1 et 3 atm. Ils ont en particulier utilisé deux méthodes de reconstruction de la fraction volumique de suie à partir des mesures d'extinction sur une ligne de vue, afin de limiter l'influence des artefacts numériques sur les résultats. Ils font également partie des rares auteurs à avoir mesuré le spectre d'émission de la flamme, ce qui donne aux numériciens le moyen de valider le calcul du rayonnement des gaz et des suies dans une flamme turbulente. Ils ont d'ailleurs réalisé cette validation dans l'article complémentaire [105].

3.2.2.4 Incertitudes des mesures observées

Les mesures dans les flammes turbulentes comportent un large degré d'incertitude. Les mesures de température par thermocouple sont perturbées par différents facteurs comme le rayonnement de la jonction, ainsi que le dépôt de suies sur la jonction qui modifie ses propriétés radiatives. Pour corriger les mesures, l'estimation de l'émissivité

de la jonction constitue la plus grande source d'incertitude [135]. En conséquence, elles sont précises à ± 100 K près, à la fois dans les flammes turbulentes [127] et dans les flammes laminaires [143]. La fraction volumique de suies mesurée par extinction est connue avec une incertitude comprise entre 30 % [126, 127] et 50 % [142].

3.3 ÉTUDES NUMÉRIQUES DES SUIES EN COMBUSTION

La simulation de flammes de laboratoire et la validation systématique des résultats numériques par confrontation avec les mesures expérimentales ont permis le développement et l'amélioration de modèles pour la formation des suies. Des méthodes numériques ont été développées pour permettre l'utilisation de modèles de plus en plus complexes, permettant de simuler la dynamique des particules de suie. Cette section a pour but de mettre en évidence les problématiques actuelles de la modélisation de la formation des suies. Pour cela, des études récentes sont présentées. On distingue deux principaux axes d'étude :

- l'amélioration de la modélisation de la formation des suies ;
- le développement de méthodes numériques visant à réduire le coût d'utilisation des modèles de plus en plus détaillés.

On distingue les flammes laminaires et les flammes turbulentes. Les flammes laminaires permettent de valider les modèles en s'affranchissant de l'effet des interactions de la turbulence avec la chimie et le rayonnement. La turbulence rapproche les conditions d'étude de celles d'un dispositif industriel mais ajoute un degré de complexité supplémentaire à la modélisation de la formation des suies.

3.3.1 Flammes laminaires

Mehta *et al.* [114] ont réalisé une étude paramétrique en simulant huit flammes 1D éthylène/air à pression atmosphérique dont quatre prémélangées et quatre de diffusion et en évaluant sept mécanismes cinétiques, certains très détaillés (100 espèces) et d'autres réduits (une vingtaine d'espèces). L'objectif de cette étude est de sélectionner parmi les 36 combinaisons de modèles testées des modèles précis sur un intervalle étendu de conditions de fonctionnement et économes en ressources numériques. Le but à plus long terme est de pouvoir utiliser ces modèles pour la simulation des suies dans des flammes turbulentes. Pour modéliser la formation des suies, deux sous-modèles de nucléation, basés soit sur l'acétylène soit sur les PAH, ont été testés. La croissance en surface a été modélisée par le mécanisme HACA et le phénomène d'agglomération a été négligé. La méthode des moments a été utilisée pour caractériser la fonction de distribution de la taille des particules (PSDF) (voir section 3.1.2.2). Différents calculs ont été réalisés :

- des calculs ont été effectués avec et sans l'hypothèse d'une consommation totale des radicaux en surface des particules lors de l'addition d'acétylène (croissance modélisée avec soit l'équation 3 soit l'équation 4 du tableau 3.1) ;
- deux expressions pour le facteur stérique^(d) α intervenant dans le taux de réaction en surface (croissance et oxydation) ont été testées ;
- l'influence de la prise en compte de la condensation des PAH à la surface des particules a été étudiée.

L'évaluation des mécanismes cinétiques a porté en particulier sur la prédiction du niveau d'acétylène dans les flammes testées. L'acétylène est en effet l'espèce déterminante pour

(d). Paramètre représentant la proportion de sites actifs à la surface des suies disponibles pour les réactions du mécanisme HACA (voir section 3.1.1.2). Il a été introduit dans la modélisation pour représenter le phénomène de vieillissement des particules, et dépend de leur taille et de leur température [75, 111].

la nucléation et la croissance en surface des suies (voir la section 3.1.1). Les résultats ont montré que les modèles les plus polyvalents prédisent sur les huit flammes testées des fractions volumiques de suies proches des valeurs expérimentales à un facteur 5 à 10 près. Les paramètres les plus importants sont le facteur stérique et la consommation ou non des radicaux en surface. De plus, la nucléation basée sur l'acétylène apparaît comme suffisante, ce qui permet de s'affranchir de la prédiction des PAH et d'utiliser des mécanismes cinétiques relativement légers. Néanmoins, l'agglomération n'a pas été modélisée dans cette étude, alors que Kim *et al.* [139] ont observé la formation d'agrégats à pression atmosphérique dans une flamme de diffusion analogue. Dans les flammes de prémélange en revanche, la formation d'agrégats est beaucoup plus réduite, comme l'ont observé Öktem *et al.* [144] et Abid *et al.* [84].

Di Domenico *et al.* [5] ont proposé très récemment un nouveau modèle pour la simulation des suies dans les chambres de combustion industrielles. Leur objectif est de formuler un modèle assez général pour être indépendant du combustible utilisé et du régime de combustion, tout en étant peu coûteux pour pouvoir réaliser des calculs de configurations industrielles. Ils valident le modèle sur trois flammes laminaires :

- de diffusion méthane/air ;
- partiellement prémélangée éthylène/air ;
- de diffusion kérosène/air.

La chimie en phase gazeuse est décrite par différents schémas cinétiques selon le combustible utilisé, détaillés jusqu'au benzène C_6H_6 et impliquant 39 à 71 espèces. Pour modéliser la dynamique des PAH et leur rôle dans la formation des suies, une méthode sectionnelle a été utilisée (voir section 3.1.2.2). Elle permet de décrire toute l'étendue des tailles de PAH sur seulement quatre classes. Comme une seule équation de transport est résolue par classe de PAH, le coût du calcul n'est pas fortement pénalisé. Le modèle de suies est basé sur celui de Lindstedt [108] et modifié pour prendre en compte les PAH. La nucléation est représentée par la collision de deux PAH dont la masse résultante atteint un certain seuil. La croissance en surface s'effectue par addition d'acétylène et de PAH. Une fois les paramètres du modèle de suies ajustés sur la flamme de diffusion méthane/air, ceux-ci n'ont pas été modifiés pour l'application aux autres cas de validation. L'ensemble de ces modèles a été mis en œuvre dans un code incompressible, ce qui permet un gain important en temps de calcul par rapport à une approche compressible. Les niveaux de température, de fractions massiques d'acétylène et de benzène et de fractions volumiques de suies sont globalement bien reproduits sur les trois flammes testées. Ce modèle est prometteur pour les calculs de flammes turbulentes mais le nombre d'espèces à transporter — une trentaine minimum — reste prohibitif pour des calculs instationnaires dans des géométries complexes avec un code compressible. La tabulation de la chimie peut constituer une bonne solution pour réduire le nombre d'espèces transportées.

Zhang *et al.* [145] détaillent la mise en œuvre d'une méthode sectionnelle avancée dans le but de prédire les distributions en taille des agrégats et des particules primaires (voir section 3.1.2.2). Pour modéliser la formation et la croissance des agrégats, une équation de transport pour le nombre de particules primaires par unité de masse de gaz est résolue pour chaque section. Pour modéliser la dynamique des agrégats, on transporte aussi le nombre d'agrégats par unité de masse de gaz, pour chaque section. Les sous-modèles de nucléation, coagulation, croissance et oxydation issus du papier de Fairweather *et al.* [146] ont été adaptés pour chaque section. Le modèle a été validé sur la flamme laminaire de diffusion méthane/air à pression atmosphérique de Smooke *et al.* [147] en utilisant 35 sections et un schéma cinétique de 36 espèces. Deux méthodes ont été utilisées pour calculer le rayonnement des gaz et des suies : l'hypothèse de milieu

optiquement mince^(e) (ou OTL pour *Optically Thin Limit*) et la méthode des ordonnées discrètes (voir section 2.2.2). Les faibles différences constatées entre les résultats donnés par les deux méthodes confirment la validité de l'hypothèse de milieu optiquement mince dans le cas précis de la flamme de Smooke étudiée. Les niveaux expérimentaux de température, de fractions massiques de méthane et d'acétylène ainsi que les fractions volumiques de suie sont bien reproduits par la simulation. Toutefois la résolution des 110 équations de transport nécessaires est fortement prohibitive pour la réalisation de calculs instationnaires et/ou en géométrie complexe. Il reste à déterminer quel est le nombre minimal de sections qui doivent être simulées pour obtenir des résultats corrects, afin d'optimiser le temps de calcul.

L'équipe de Zhang [89] a récemment repris l'approche sectionnelle décrite dans [145] en la combinant avec un modèle de suies basé sur le pyrène $C_{16}H_{10}$, un PAH à quatre cycles aromatiques. Ce dernier a été formulé par Appel *et al.* [111] et est basé sur un mécanisme chimique comprenant 100 espèces et 542 réactions. L'étude de Zhang *et al.* [89] fait suite à leur précédente étude [148] et son but est d'améliorer la modélisation du phénomène de coagulation des agglomérats. Un rendement de coagulation (ou probabilité de coagulation lors de la collision de deux agrégats) est introduit pour modéliser l'effet d'interactions particule-particule et gaz-particule mal connues théoriquement et expérimentalement. Les tests sont réalisés sur la flamme laminaire de diffusion éthylène/air largement documentée par Santoro et son équipe [136, 149–151]. Les auteurs se sont intéressés à la prédiction du nombre de particules primaires par agrégat, fortement dépendant du rendement de coagulation, en tentant de modéliser le phénomène de rebond thermique^(f) des agrégats de petite taille et le phénomène de fragmentation entre agrégats de grande taille^(g), deux phénomènes encore très peu connus. Face au manque d'informations quantitatives sur ces phénomènes, ils proposent un rendement uniforme de 20% quelle que soit la taille des agrégats, qui permet de retrouver les valeurs expérimentales du nombre de particules primaires par agrégat et du nombre d'agrégats par unité de masse de gaz. Les auteurs ont également évalué l'effet de la coalescence des particules primaires entre elles, négligé jusqu'à maintenant. Ils ont montré avec un modèle simple que la coalescence modifie de façon non négligeable la fraction volumique de suies et la nanostructure des agrégats. En outre, la cinétique de la coalescence est actuellement mal connue théoriquement. Les modèles existants pour la représenter sont très simplifiés et peuvent conduire à surestimer ses effets. Des travaux théoriques et expérimentaux restent à accomplir dans ce domaine.

3.3.2 Flammes turbulentes

Dans les flammes turbulentes, il est nécessaire de prendre en compte les interactions entre la turbulence et la chimie, le rayonnement et les suies. En effet, les fluctuations des grandeurs d'état telles que la température et les concentrations d'espèces doivent être prises en compte pour le calcul des termes sources chimiques et radiatifs. Des approches ont donc été développées pour modéliser l'interaction chimie-turbulence, comme la méthode CMC (*Conditional Moment Closure*) ou l'approche par PDF (*Probability Density Function*) transportée.

(e). L'hypothèse de milieu optiquement mince consiste à négliger l'absorption du rayonnement par le milieu. La résolution de l'équation des transferts radiatifs est alors triviale (voir section 2.1).

(f). Rebond des particules lors de leur collision mutuelle pouvant avoir lieu lorsque leur énergie cinétique est suffisamment élevée pour leur permettre d'échapper aux forces d'attraction entre particules, ce qui empêche leur coagulation.

(g). Phénomène lié aux forces hydrodynamiques, dont l'effet accru sur les agrégats de grande taille peut les empêcher de coaguler et mener à leur fragmentation lors de collisions.

Dans ce qui suit, on distingue trois catégories d'études numériques :

- les simulations stationnaires à pression atmosphérique, qui sont les plus courantes étant donné le coût relativement réduit des calculs stationnaires et le grand nombre d'études expérimentales réalisées à pression atmosphérique ;
- les simulations stationnaires à pression élevée, très intéressantes pour leurs conditions proches de celles des chambres de combustion de turbine à gaz ;
- les simulations instationnaires, beaucoup plus coûteuses mais qui apportent une précision supplémentaire par rapport aux calculs stationnaires.

3.3.2.1 Simulations stationnaires à pression atmosphérique

Yunardi *et al.* [152] ont combiné la méthode de résolution CMC avec le modèle de formation des suies de Leung [107] pour calculer trois flammes turbulentes de diffusion éthylène/air [128, 153, 154]. Leur but était d'observer l'effet de la diffusion différentielle des suies sur les prédictions numériques de la méthode CMC et de valider les niveaux de suies prédits sur des mesures expérimentales. La méthode CMC est utilisée pour prendre en compte le couplage entre turbulence et chimie, en particulier afin de pouvoir prédire les concentrations d'espèces minoritaires dans les écoulements turbulents. Pour pouvoir prendre en compte le couplage entre les suies et le rayonnement, l'enthalpie du mélange est transportée, et les transferts radiatifs dus aux espèces CO_2 , CO , CH_4 , H_2O et des suies sont calculés dans le cadre de l'hypothèse OTL. Par ailleurs, un schéma cinétique détaillé composé de 70 espèces et 463 réactions [155] permet de prédire les niveaux de C_2H_2 , espèce considérée comme précurseur des suies. Les auteurs ont montré que la stratégie mise en œuvre permet de prédire quantitativement les valeurs moyennes de température, fraction de mélange et fraction volumique de suies dans des flammes turbulentes, à condition de prendre en compte la diffusion différentielle des particules de suie par rapport à la phase gazeuse. Les résultats obtenus sont comparables à ceux obtenus par l'approche des flammelettes [156] et l'approche par PDF transportée [109]. Cependant deux facteurs peuvent modifier les résultats. D'une part, le couplage entre les suies et la phase gazeuse n'est effectué que dans un sens, de telle sorte que la consommation et la production d'espèces chimiques par le modèle de suies ne sont pas prises en compte dans le mélange gazeux réactif. L'équilibre entre la phase gazeuse et les particules de suie ne peut donc pas être atteint. C'est d'autant plus ennuyeux que cela joue sur la prédiction des espèces minoritaires participant à la formation ou à l'oxydation des suies telles que C_2H_2 et OH . D'autre part, le transport thermophorétique est négligé dans cette étude, ce qui peut avoir aussi un léger effet sur les résultats.

Ma *et al.* [156] ont calculé les niveaux de suies dans les flammes de Kent et Honnery [153] et de Young *et al.* [154] avec un modèle de formation des suies analogue à ceux de Moss [105] et de Leung [107]. Leur objectif était d'étudier le rôle de chaque processus de formation ou d'oxydation des suies, afin de déterminer la combinaison optimale de sous-modèles à utiliser pour la simulation de chambres de combustion industrielles. En particulier, ils ont testé différentes modélisations de l'étape de nucléation, basées sur l'acétylène, les PAH ou le naphthalène C_{10}H_8 , ainsi que différentes fonctions de dépendance du taux de croissance vis-à-vis de la surface totale de suie. Pour prédire les niveaux de PAH, les auteurs ont utilisé un schéma cinétique détaillé jusqu'aux espèces C_{10}H_y ^(h). Pour rendre le calcul réalisable dans un code industriel, une méthode de tabulation a été utilisée avec l'approche des flammelettes laminaires. Les résultats d'un certain nombre de flammes de diffusion 1D sont donc tabulés en fonction du taux de dissipation scalaire de la flamme et de la fraction de mélange dans la flamme.

(h). espèces contenant 10 atomes de carbone

En résolvant une équation de transport pour la fraction de mélange moyenne et sa variance, on peut alors en déduire la composition locale du mélange. L'interaction chimie-turbulence est modélisée par une PDF présumée pour la fraction de mélange et le taux de dissipation scalaire. Pour le modèle de nucléation basé sur $C_{10}H_8$, le taux de formation de $C_{10}H_8$ a également été tabulé. Les auteurs ont effectué une étude paramétrique détaillée concernant tous les principaux paramètres et sous-modèles considérés. Les résultats obtenus montrent la forte sensibilité des prédictions à la modélisation de la croissance en surface. Une dépendance de ce phénomène en racine carrée de la surface de suie permet de réduire la sensibilité du modèle à d'autres phénomènes comme la nucléation ou la coagulation, mais cette dépendance n'a cependant pas de justification physique, comme expliqué dans la section B.2.2.2 de l'annexe B. D'autres formes de dépendances de la croissance vis-à-vis de la surface de suie nécessitent le choix judicieux des sous-modèles et de leurs paramètres pour les autres phénomènes. Par ailleurs la nucléation basée sur le naphthalène a donné dans la plupart des cas les meilleurs résultats. Cette étude améliore la compréhension du comportement du modèle semi-empirique à deux équations. Cependant, comme pour les travaux de Yunardi *et al.* [152], la phase gazeuse et les suies sont découplées. La composition du mélange gazeux n'est pas modifiée par la formation des suies. Cela peut avoir un impact sur les niveaux de suie calculés.

Lindstedt et Louloudi [109] ont cherché à évaluer dans des flammes turbulentes l'approche de PDF transportée combinée avec une modélisation de la dynamique des particules de suie par la méthode des moments et une modélisation avancée de la cinétique de formation et d'oxydation des suies. La modélisation de la cinétique de formation des suies est basée sur le modèle de Leung [108]. En outre, les auteurs se sont affranchis de l'hypothèse de sphéricité des particules, en étendant la méthode des moments pour décrire les phénomènes de coalescence et d'agglomération des particules en agrégats de forme fractale. Une analogie entre les réactions en surface du naphthalène $C_{10}H_8$, un PAH, et les réactions en surface des suies a été utilisée pour estimer le taux de croissance en surface des suies. Les auteurs ont validé leur approche en simulant les flammes turbulentes C_2H_4 /air de Coppalle et Joyeux [128] et de Kent et Honnery [153]. Une cinétique réduite de 15 espèces et de 144 réactions a été utilisée. Seule l'émission de rayonnement par les espèces CO_2 , CO , CH_4 , H_2O et par les suies a été intégrée au calcul de l'enthalpie du mélange (hypothèse OTL). Les auteurs ont constaté que la prise en compte de la structure fractale des agrégats n'induit qu'une amélioration modeste des prédictions des niveaux de suies dans les flammes considérées, par rapport à celles obtenues avec l'hypothèse de sphéricité. On peut donc retenir que le modèle de Leung, utilisé avec l'approche de PDF transportée, permet d'estimer les niveaux de suies dans des flammes turbulentes. Néanmoins, l'étude de la croissance en surface a montré que les prédictions sont particulièrement sensibles à la densité de sites actifs à la surface des particules de suie. Elle n'est probablement pas constante comme supposé dans cette étude, mais doit évoluer en fonction de différents paramètres dont l'âge des particules. Il reste à généraliser cet aspect de la modélisation pour diminuer le degré d'empirisme du modèle.

3.3.2.2 Simulations stationnaires à pression élevée

De nombreux dispositifs industriels (turbines à gaz, moteurs à combustion interne et externe) réalisent une combustion à pression élevée. Pour la simuler il est nécessaire d'étudier le comportement des modèles de formation des suies en fonction de la pression. La flamme turbulente méthane/air de Brookes et Moss [142] constitue un bon objet

d'étude en raison des nombreuses mesures réalisées à la fois à pression atmosphérique et à une pression de 3 atm (voir le tableau A.2, annexe A). Trois études numériques de cette flamme sont détaillées ci-dessous.

La première étude est celle de Brookes et Moss [105] qui accompagne leur étude expérimentale [142]. Ils démontrent qu'il est indispensable de modéliser le couplage entre le rayonnement et la formation des suies pour pouvoir estimer précisément les niveaux de suies et le rayonnement dans des flammes turbulentes. Pour réaliser un tel calcul, ils ont utilisé le modèle de flammelette laminaire étendu aux flammelettes multiples pour introduire les pertes radiatives comme paramètre supplémentaire. Le calcul de ces pertes radiatives est effectué avec l'approximation d'une flamme optiquement mince (OTL pour *Optically Thin Limit*), en calculant l'émission de CO₂, H₂O et des suies. Le modèle de suies utilisé est basé sur celui de Moss *et al.* [94]. Les auteurs ont étudié en détails le problème de la fermeture des termes sources moyens relatifs aux suies, et en particulier la corrélation entre les paramètres du champ de suie (fraction massique et nombre de particules) et la fraction de mélange. Ils ont d'abord testé une fermeture décorrélée qui n'a pas donné satisfaction malgré un ajustement *ad hoc*. Les auteurs ont alors proposé une fermeture corrélée qui ne donne pas de résultats sensiblement meilleurs mais est dépourvue d'ajustement empirique. Le modèle a ensuite été confronté à la montée en pression. Pour obtenir des niveaux de suies raisonnables, les paramètres du modèle ont dû être ajustés. Les luminances spectrales calculées à partir des champs moyens ont été comparées aux mesures expérimentales. L'émission des espèces gazeuses correspondant à des bandes spectrales caractéristiques a été correctement calculée, mais l'émission des suies, continue sur le spectre, a été mal reproduite. En utilisant pour le calcul de l'émission une valeur de température des suies mesurée dans la flamme (déduite du rapport des luminances mesurées à deux longueurs d'onde) plutôt que la température moyenne des gaz calculée par la simulation, Brookes et Moss ont largement amélioré la prédiction de la part d'émission continue sur le spectre, attribuée aux suies. Ils ont ainsi montré que les interactions entre le rayonnement et la turbulence, négligées dans cette étude, étaient la cause de l'erreur faite sur l'émission des suies. L'évaluation correcte des transferts radiatifs n'est alors qu'en partie prédictive.

L'équipe de Kronenburg [157] a également calculé la flamme de Brookes et Moss [142] à 1 et 3 atm dans le but d'évaluer la méthode CMC pour la prédiction des suies dans les flammes turbulentes de diffusion. Ils ont en particulier étudié le phénomène de diffusion différentielle des suies. Pour simuler la chimie dans la flamme, des mécanismes chimiques réduits (19 espèces) ou détaillés (48 espèces) pour la combustion du méthane ont été testés, sans succès pour la cinétique réduite qui sous-estime les niveaux de C₂H₂ dans la flamme d'un facteur 2 à 3 par rapport aux niveaux prédits par le schéma détaillé. Pour la modélisation des suies, le modèle de Leung [108] a été retenu sans modification particulière. Comme Yunardi *et al.* [152], les auteurs mettent en évidence l'effet non négligeable de la diffusion différentielle sur la prédiction des niveaux de suies dans les flammes turbulentes. La formation des suies est fortement dépendante du milieu environnant et donc de la modélisation de leur transport dans la flamme. Les auteurs ont montré que négliger la diffusion différentielle induit une sous-estimation de la quantité de suies d'environ 40 %. En utilisant la méthode CMC, les auteurs ont résolu le problème rencontré par Brookes et Moss [105] sur la fermeture des termes sources moyens relatifs aux suies. Contrairement à l'approche des flammelettes, la méthode CMC fournit en effet une fermeture exacte pour les termes sources d'oxydation du modèle de suies, cela sans nécessiter d'ajustement empirique. Les auteurs soulignent l'importance d'inclure dans la modélisation l'oxydation des suies à la fois par OH et par O₂. Les niveaux de suies obtenus à 1 et 3 atm sont satisfaisants tout en ayant été obtenus

sans ajustement ni correction du modèle de suies, à la différence de Brookes et Moss [105].

Roditcheva *et al.* [158] ont quant à eux utilisé une méthode de tabulation de flammelettes laminaires pour calculer la flamme de Brookes et Moss [142] avec le modèle de suies à deux équations de Moss [94]. La température, la fraction molaire de C_2H_2 et la masse volumique ont été tabulées en fonction de la fraction de mélange et du taux de dissipation scalaire. Pour cela, des flammes de diffusion à contre-courant ont été calculées avec un mécanisme chimique détaillé jusqu'au C_3H_y comprenant 30 espèces. Les termes sources moyens du modèle de suies ont été calculés à partir des grandeurs tabulées et d'une PDF présumée dépendant de la fraction de mélange et du taux de dissipation scalaire. La méthode de tabulation permet de reproduire correctement les champs de fraction de mélange et de température dans la flamme. Pour reproduire les niveaux de suies expérimentaux, les auteurs ont dû ajuster le taux de croissance en surface. Ils ont introduit une dépendance linéaire du taux de croissance en fonction de la pression. La détermination des niveaux de suies avec cette méthode reste néanmoins très empirique. Par ailleurs, les auteurs démontrent que l'augmentation de la fraction volumique de suies avec la pression n'est pas due à celle du temps de résidence dans la flamme. Elle est plutôt induite par l'augmentation de la masse volumique et de la concentration de précurseurs avec la pression.

Pour les trois études décrites ci-dessus, le rayonnement a été calculé avec l'hypothèse OTL. La validité de cette hypothèse est difficile à évaluer, spectralement et spatialement. Cependant, elle apparaît valable à la pression atmosphérique. Mais à une pression de 3 atm, la fraction volumique de suies est multipliée par dix par rapport à la pression atmosphérique. L'épaisseur optique de la flamme augmente d'autant et on peut douter de la validité de l'OTL. Pour s'en assurer, il faudrait calculer l'absorption propre de la flamme à l'aide d'une méthode de résolution de l'ETR (Équation du Transfert Radiatif). L'absorption du rayonnement par la flamme va nécessairement modifier le champ de température dans la flamme et indirectement le champ de concentration de suie. L'effet global sur les niveaux de suies et le rayonnement reste difficile à prévoir puisque ceux-ci sont couplés de manière non-linéaire.

3.3.2.3 Simulations instationnaires

Les calculs instationnaires de flamme avec suies sont assez rares en raison de leur coût bien supérieur à celui d'un calcul stationnaire.

Récemment, El-Asrag et Menon [159] ont simulé avec une approche instationnaire LES (Large Eddy Simulation) la flamme turbulente éthylène/air à pression atmosphérique de l'équipe de Hu, Yang et Kooylu [88, 125, 126]. L'approche LEM (Linear Eddy Mixing) utilisée ici consiste à résoudre les équations de transport des espèces uniquement à l'échelle de sous-maille. Les réactions chimiques, la diffusion moléculaire et la dynamique de formation des suies sont modélisées par des modèles de mélange et de combustion de sous-maille. Pour la cinétique et la dynamique des suies, le modèle de Leung [108] a été adapté au formalisme de la méthode des moments pour être incorporé dans l'approche LEM. La température axiale moyenne est surestimée par le calcul d'environ 15 % dans la moitié aval de la flamme. La modélisation très simplifiée du rayonnement pour la phase gazeuse adoptée ici et issue de l'article de Magnussen et Hjertager [100] en est certainement la cause. En effet les coefficients d'absorption pour CO_2 et H_2O sont pris égaux et uniformes sur le spectre, ce qui représente mal les spectres d'absorption discontinus des deux espèces. Cette erreur sur la température impacte nécessairement les niveaux de suies. En particulier le nombre moyen de particules

par unité volume, le diamètre moyen des particules et la surface totale moyenne de suies sont mal estimés, en raison d'une sur-estimation du taux de coagulation. Celui-ci dépend principalement de la fréquence de collision entre les particules, elle-même fonction de la température. Les résultats ont toutefois permis de constater que la diffusion différentielle des suies est importante dans la zone de nucléation tandis que le transport thermophorétique des suies joue un rôle significatif dans la répartition radiale des particules en aval de la flamme.

Ces dernières années, l'équipe de Lignell et Chen s'est intéressée à la simulation DNS (Direct Numerical Simulation) d'écoulements réactifs avec suies en 2D [160] puis en 3D [117, 118]. La DNS a un double objectif : le premier est de permettre une analyse fine des phénomènes car toutes les échelles de l'écoulement sont résolues. Cela doit permettre de mieux comprendre l'interaction entre la flamme et les suies. Le deuxième objectif de la DNS est de fournir des données détaillées pour le développement et la validation de modèles de sous-maille pour la LES. Pour la simulation instationnaire de configurations industrielles ou de grandes dimensions, on est en effet obligé pour le moment d'utiliser l'approche LES, beaucoup moins coûteuse que la DNS. Les auteurs ont réalisé les toutes premières simulations DNS 3D d'une flamme turbulente de diffusion avec un modèle de suies standard et une description réaliste de la chimie [117, 118]. La flamme étudiée est une flamme plane éthylène/air à pression atmosphérique. C'est un cas idéal, non documenté expérimentalement, mais représentatif des écoulements turbulents pilotés par le cisaillement. La dynamique de la formation des suies a été simulée avec la méthode des moments, en transportant les trois premiers moments de la PSDF (voir section 3.1.2.2) et en calculant les termes sources de suies avec le modèle de Leung [107]. Le schéma cinétique est une réduction à 19 espèces transportées du mécanisme détaillé de Qin *et al.* [155]. Le rayonnement de la flamme a été calculé avec l'hypothèse OTL. Les auteurs se sont d'abord intéressés à la formation des suies et à sa corrélation avec la fraction de mélange [118]. Les suies sont transportées principalement par convection et thermophorèse, tandis que la surface de flamme, définie comme étant la surface de fraction de mélange à la stœchiométrie, subit des effets de diffusion et de convection. Les auteurs ont quantifié le déplacement des suies relativement à la flamme, et ont montré que les suies peuvent être convectées en direction de la flamme, ce qui est la situation opposée des flammes à contre-courant utilisées pour la mise au point des modèles. La proximité de la flamme conditionne l'environnement des suies (température et composition des gaz), ce qui influence directement leur taux de production, et donc leur fraction volumique et l'émission radiative induite. Les auteurs ont par ailleurs montré que le transport thermophorétique était négligeable dans cet écoulement par rapport aux effets de diffusion entre espèces gazeuses et particules de suie.

Les auteurs ont également utilisé la DNS pour analyser *a priori* la méthode CMC [117] et tester les différents modèles de fermeture existants. Ils ont utilisé une nouvelle formulation de la méthode CMC qui ne nécessite pas la résolution d'équations de transport supplémentaires pour prendre en compte la diffusion différentielle. Cette méthode est donc plus performante que celle utilisée par Yunardi *et al.* [152] et Kronenburg *et al.* [157]. Pour les espèces CO_2 , OH et H, on observe que la diffusion différentielle n'est pas négligeable. Les termes exacts de dissipation et de diffusion différentielle ont été comparés aux termes modélisés. Les erreurs faites par les modèles restent acceptables et les tendances sont bien reproduites. Pour les suies, la modélisation du terme source de diffusion différentielle nécessite de modéliser des termes résiduels sous peine de ne pas reproduire les tendances.

Cependant, une analyse aussi fine des mécanismes de formation des suies ne peut se faire avec un modèle de suies semi-empirique. Celui-ci ne prend pas en compte en

particulier le rôle des PAH et des espèces radicalaires comme l'hydrogène atomique sur la formation des suies. Ces détails peuvent influencer quantitativement sur les résultats mais selon les auteurs, les résultats qualitatifs sur la dynamique de la flamme et son interaction avec les suies ne doivent pas être sensibles aux aspects de la formation des suies négligés dans ces études.

3.4 CONCLUSION

Dans ce chapitre 3, l'état actuel des connaissances et des travaux sur les suies a été détaillé. En premier lieu ont été présentées les connaissances actuelles des phénomènes de formation des suies : nucléation, coagulation, croissance en surface et oxydation. Même si ces phénomènes sont étudiés depuis presque un siècle, leur compréhension détaillée est incomplète. Les expérimentations ont permis de formuler des théories qui se complètent ou parfois se contredisent, suivant les conditions d'expérimentation.

Ces théories ont permis de formuler des modèles pour la simulation numérique. Trois catégories de modèles pour la cinétique de formation des suies ont été distinguées : les modèles empiriques, les modèles semi-empiriques et les modèles détaillés, suivant un niveau de complexité et un coût croissants. Cette liste des modèles les plus utilisés permettra de choisir au mieux les modèles nécessaires aux travaux de cette thèse. Pour modéliser la dynamique des particules de suie, les deux principales méthodes utilisées ont été présentées, à savoir la méthode des moments et l'approche sectionnelle.

On s'est ensuite intéressé à l'état de l'art concernant l'étude des suies dans les domaines de l'expérimentation et de la simulation numérique. Une vue d'ensemble des différentes méthodes de mesure pour caractériser les suies dans les flammes a permis de souligner les avantages et les inconvénients de chaque méthode, et de mettre en évidence leur sensibilité à différents paramètres. Un bilan des travaux expérimentaux récents a permis de mettre en évidence des résultats de campagnes de mesure disponibles pour la validation des modèles, et de dégager les axes nécessitant encore des progrès :

- La caractérisation des agglomérats. Cela passe par la distinction entre particules primaires et agglomérats, la détermination de leur répartition mutuelle et de leur PSDF, et la détermination de la structure des agglomérats via en particulier le nombre de particules primaires par agglomérat.
- Une meilleure définition des conditions d'expérience, afin de diminuer le nombre de paramètres incertains dans les études numériques.
- La validation des différentes méthodes de mesure par croisement de leurs résultats, dans le but de renforcer la fiabilité des mesures.
- L'étude de la formation des suies dans les flammes partiellement prémélangées, correspondant au régime de combustion des nouveaux foyers aéronautiques orientés vers la diminution des émissions polluantes.

De plus, on a pu constater le niveau élevé de l'incertitude des mesures réalisées.

Un passage en revue des études numériques marquantes de ces dernières années a mis en lumière les avancées de la modélisation et les sujets d'étude actuels. Que ce soit en laminaire ou en turbulent, le niveau de détail croissant des études expérimentales a permis de développer des modèles sur la formation des agglomérats, dans le but de reproduire les PSDF caractérisées expérimentalement. Des efforts ont été également réalisés pour optimiser ces modèles du point de vue du coût de calcul, en vue de les appliquer à des calculs instationnaires. Les simulations laminaires permettent, en raison de leur coût réduit dans des codes dédiés, d'étudier des phénomènes encore mal connus, comme les interactions entre particules. Pour simuler des flammes turbulentes, il a fallu développer des méthodes pour modéliser l'interaction entre les suies et la

turbulence. L'importance du rayonnement nécessite également des modèles avancés, surtout lorsque la pression est élevée car l'hypothèse d'un milieu optiquement mince n'est alors plus valable. Certains ont recours à la simulation instationnaire (LES et même DNS) pour mieux comprendre les interactions entre la flamme et les suies et développer des modèles.

Les travaux de cette thèse s'orientent vers la simulation instationnaire d'une flamme turbulente de foyer de turbine à gaz à pression élevée, comprenant la modélisation de la formation des suies et du rayonnement de manière couplée, en utilisant un code industriel compressible. À notre connaissance, ce genre de travail n'a encore jamais été publié. Néanmoins, au vu de la littérature disponible, on peut orienter les choix de modèles et de méthodes vers une modélisation relativement simple de la formation des suies, pour conserver un coût de calcul abordable. Dans la suite de l'étude, on va donc chercher à prédire les niveaux de suies dans les flammes avec la précision la plus élevée possible tout en limitant le coût de calcul.

Simulation de la formation des suies avec chimie globale et modèle de suie empirique

4

On cherche dans ce chapitre à mettre en place une modélisation de la formation des suies peu coûteuse, en vue de son application future pour des calculs instationnaires. Pour cela, un modèle empirique basé uniquement sur la concentration de combustible est mis en œuvre. Cela permet de s'affranchir de la description détaillée et coûteuse de la chimie pour la simulation de la formation des précurseurs des suies, nécessaire aux modèles plus complexes.

En section 4.1, les critères de choix d'un modèle de la littérature sont exposés, puis le modèle choisi est détaillé. Une étude de robustesse est ensuite réalisée en 0D pour observer son comportement et s'assurer de sa stabilité. Dans la section 4.2, le modèle est testé sur une configuration de flamme 1D laminaire prémélangée. Le modèle est confronté aux résultats expérimentaux dans sa formulation originale, puis des améliorations sont apportées de manière à améliorer la qualité de ses résultats à la fois qualitativement et quantitativement. Pour finir, le modèle est soumis à des variations de richesse afin d'évaluer son comportement.

Table des matières

4.1	Modèle empirique de Tesner-Magnussen	95
4.1.1	Choix du modèle	95
4.1.2	Description du modèle de Tesner-Magnussen	96
4.1.2.1	Formation des noyaux radicalaires	96
4.1.2.2	Formation des particules de suie	97
4.1.2.3	Oxydation des noyaux radicalaires et des particules de suie	97
4.1.3	Adaptation aux schémas numériques de CEDRE	98
4.1.4	Robustesse du modèle en milieu homogène	99
4.2	Application du modèle à la prédiction des suies dans une flamme laminaire prémélangée riche	102
4.2.1	Prédictions du modèle original	102
4.2.2	Améliorations du modèle	104
4.2.2.1	Étape d'oxydation dépendante de l'oxydant	104
4.2.2.2	Température critique pour la réaction en chaîne	105
4.2.2.3	Test de la limitation du taux de formation des suies	106
4.2.2.4	Ajustement des paramètres empiriques	107
4.2.3	Confrontation du modèle aux variations de richesse	108
4.3	Conclusion du chapitre	109

4.1 MODÈLE EMPIRIQUE DE TESNER-MAGNUSSEN

4.1.1 Choix du modèle

Les modèles semi-empiriques (voir section 3.1.2.1) apparaissent bien adaptés à la CFD puisqu'ils n'ajoutent que deux équations de transport au système d'équations de l'aérothermochimie à résoudre. En revanche, ils sont basés sur la concentration des espèces précurseurs des suies comme C_2H_2 ou C_6H_6 . La prédiction de ces espèces oblige à tenir compte des nombreuses étapes chimiques de décomposition du combustible et des espèces associées, ce qui est très coûteux. Une alternative plus économique consiste à tabuler la chimie. Dans ce cadre, l'association du modèle de Leung [107–109] et de la méthode de tabulation FPI pour la prédiction des précurseurs de suie a permis de reproduire les concentrations des espèces gazeuses et des suies avec une bonne précision dans des flammes 1D laminaires prémélangées de richesses différentes (voir annexe B). Cependant, pour prédire correctement les niveaux de température dans la flamme, la méthode FPI exige le transport d'au moins 9 espèces, soit 3 de plus qu'une cinétique réduite à deux étapes. Chaque espèce induit un coût supplémentaire non négligeable pour les calculs instationnaires envisagés dans la suite de l'étude. D'autre part, la méthode FPI n'est pas applicable telle quelle aux calculs envisagés. Il faudrait en effet prendre en compte dans la table les pertes radiatives ainsi que le caractère non totalement prémélangé des flammes générées par les injecteurs récents.

On propose donc d'évaluer un modèle de formation des suies empirique, qui repose sur la concentration de combustible plutôt que sur celle d'un précurseur de suie. Il permettra de s'affranchir de la méthode de tabulation, pour utiliser un schéma réduit à seulement deux étapes qui sera moins coûteux. Des modèles empiriques ont été présentés précédemment, dans la section 3.1.2.1. La confrontation de ces modèles à des résultats expérimentaux obtenus sur une flamme académique, qui permettrait un choix dans les meilleures conditions, demeure introuvable dans la littérature. Néanmoins, le choix a été effectué selon les critères suivants :

- Le modèle doit être basé sur un intermédiaire réactionnel, car cela permet de modéliser le rôle d'un précurseur des suies sans nécessiter la résolution d'un mécanisme cinétique détaillé. Cette modélisation est déterminante dans le cas d'une flamme prémélangée riche.
- Le modèle ne doit pas être basé sur des relations trop spécifiques, établies pour une flamme élémentaire et un combustible donné. Ces relations, exprimant généralement la fraction de mélange en fonction des conditions dans la flamme, restreignent le domaine d'application du modèle.
- Le jeu de paramètres empiriques doit être assez réduit pour faciliter l'ajustement des valeurs de ces paramètres.
- Le modèle doit déjà avoir été validé sur différentes configurations, puisqu'il ne sera testé dans cette étude que sur une flamme 1D laminaire prémélangée, avant son application dans un foyer où la combustion est turbulente.
- Le modèle doit être le plus simple possible, pour pouvoir s'intégrer facilement dans l'architecture d'un code de CFD industriel.

En conséquence, le choix s'est porté sur le modèle de Tesner-Magnussen, qui remplit au mieux ces conditions. Les détails concernant son origine et son évolution ont déjà été donnés dans le paragraphe qui lui est consacré en section 3.1.2.1. Dans ce qui suit, le modèle est d'abord détaillé, adapté aux schémas numériques de CEDRE, et sa robustesse est testée en 0D.

4.1.2 Description du modèle de Tesner-Magnussen

On présente dans cette section la version du modèle qui a été implantée dans CEDRE, basée sur la formulation de Magnussen [100, 101], et complétée par les améliorations proposées dans cette étude. Le modèle décrit la formation des suies en deux étapes successives. Une espèce intermédiaire, désignée par la suite sous le vocable « noyaux radicalaires », est d'abord formée à partir du combustible. Puis les particules de suie croissent à partir des noyaux radicalaires. Les deux entités — noyaux radicalaires et suies — sont également oxydées par des espèces gazeuses comme O_2 et OH .

Les suies sont supposées sphériques et leur diamètre d_p , uniforme et constant, est un paramètre du modèle. On fait également l'hypothèse que les suies n'affectent pas les réactions chimiques en phase gazeuse. Le modèle de formation des suies n'est donc couplé que dans un sens à la phase gazeuse réactive.

Deux équations de transport de la forme de l'équation (1.1) sont résolues pour le nombre de noyaux radicalaires par unité de masse du mélange N_r et pour la fraction massique de suie Y_s :

$$\frac{\partial \rho N_r}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho N_r \mathbf{V}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_r + \dot{\omega}_r, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_s \mathbf{V}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_s + \dot{\omega}_s, \quad (4.2)$$

où $\mathbf{J}_r = -\mu \nabla N_r$ et $\mathbf{J}_s = -\mu \nabla Y_s$ sont les flux de diffusion, et $\dot{\omega}_r$ et $\dot{\omega}_s$ les termes sources pour les noyaux radicalaires et les suies, formulés selon l'équation (4.3) sous la forme d'une différence entre un terme de formation $R_{z,f}$ et un terme d'oxydation $R_{z,c}$. L'indice z vaut en fait r ou s selon qu'il représente les noyaux radicalaires (ou radicaux) ou les suies.

$$\dot{\omega}_z = R_{z,f} - R_{z,c}. \quad (4.3)$$

4.1.2.1 Formation des noyaux radicalaires

La formation des noyaux radicalaires adopte la forme d'une réaction en chaîne, de telle sorte que la croissance en nombre de ces noyaux radicalaires est très rapide. Cette espèce intermédiaire représente les précurseurs des particules de suie, ce qui permet de décorrélérer la disparition du combustible et la formation des suies. Le taux de formation s'exprime par la relation (4.4) en ($\text{part} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$) :

$$R_{r,f} = n_0 + \xi(T)(f - g)\rho N_r - g_0 \rho^2 N_r N_s, \quad (4.4)$$

où ρ est la masse volumique du mélange, et n_0 est le taux de formation spontanée de noyaux :

$$n_0 = c_1 a_0 f_c \rho Y_F \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right), \quad (4.5)$$

où c_1 est un paramètre empirique sans dimension, f_c est la fraction massique de carbone dans l'espèce combustible, Y_F est la fraction massique de combustible, T_a représente une température d'activation et a_0 est lié au diamètre des particules de suie d_p par la relation empirique (4.6) :

$$a_0 d_p^3 = 7,109 \cdot 10^{13} \text{ part} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}. \quad (4.6)$$

Dans l'équation (4.4), le second terme représente la réaction en chaîne, f et g (en s^{-1}) étant respectivement des coefficients de branchement et de terminaison linéaires. La fonction $\xi(T)$ a été ajoutée au modèle original pour les raisons détaillées en section

4.2.2. Elle inhibe la réaction en chaîne en-dessous d'une température critique T_c , avec la formulation suivante :

$$\zeta(T) = \begin{cases} 0 & \text{si } T \leq T_c \\ 1 & \text{si } T > T_c \end{cases} . \quad (4.7)$$

Enfin, le troisième terme de l'équation (4.4) est un terme de rappel qui fait intervenir N_r et N_s respectivement les nombres de noyaux et de particules de suie par unité de masse de mélange, ainsi que g_0 , qui est un coefficient de terminaison linéaire des noyaux sur les particules de suie. Ce terme représente la consommation de l'espèce précurseur par les particules de suies, à l'instar de la consommation d'acétylène dans le mécanisme cinétique de croissance en surface HACA détaillé en section 3.1.1.2. En outre, on établit la relation entre N_s et Y_s :

$$N_s = \frac{Y_s}{m_p} \quad (4.8)$$

où $m_p = (\pi/6)\rho_s d_p^3$ (en $\text{kg} \cdot \text{part}^{-1}$) est la masse d'une particule de suie, avec ρ_s la masse volumique du carbone solide constituant les suies, prise égale à $2 \cdot 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ dans cette étude. On peut également trouver des valeurs plus basses, de 1700 à 1800 $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ dans la littérature, mais on choisit de rester cohérent avec la valeur utilisée dans l'annexe B.

4.1.2.2 Formation des particules de suie

Le taux de formation des suies, exprimé en $(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1})$, dépend essentiellement du nombre de noyaux radicalaires. Il s'exprime par la relation (4.9) :

$$R_{s,f} = m_p(a - b\rho N_s)\rho N_r, \quad (4.9)$$

où a et b sont des coefficients empiriques. Le deuxième terme de l'expression de $R_{s,f}$, $-bm_p\rho^2 N_s N_r$, est un terme de rappel qui permet l'autorégulation de la formation des suies. Ce terme a un rôle important dans les zones de l'écoulement où l'oxydation n'intervient pas, comme par exemple dans les gaz brûlés issus d'une combustion prémélangée riche, comme on le verra en section 4.1.4.

4.1.2.3 Oxydation des noyaux radicalaires et des particules de suie

Pour modéliser l'oxydation des noyaux radicalaires et des suies, Magnussen [101] propose un modèle simple dépendant de la fraction massique de combustible Y_F et de son terme source $\dot{\omega}_F$ suivant les relations suivantes :

$$R_{r,c} = -\dot{\omega}_F \frac{N_r}{Y_F}, \quad (4.10)$$

$$R_{s,c} = -\dot{\omega}_F \frac{Y_s}{Y_F}. \quad (4.11)$$

Cependant, comme détaillé en section 3.1.1.3, les principales espèces oxydantes des suies sont O_2 , OH ou encore O , dont les concentrations ne sont pas nécessairement corrélées avec celle du combustible. Après avoir testé le modèle d'oxydation original décrit par les expressions (4.10) et (4.11), les résultats obtenus en section 4.2.1 ont rendu nécessaire leur reformulation en utilisant l'étape d'oxydation des suies par O_2 introduite par Leung *et al.* [107] dans leur modèle semi-empirique (voir section B.2.2 de l'annexe B). Le taux d'oxydation des suies, adapté de l'équation (B.17), s'écrit alors :

Paramètres	Valeurs	Unités	Références
c_1	1,08	sans	[101]
$f - g$	$1 \cdot 10^2$	s^{-1}	[101]
g_0	$1 \cdot 10^{-15}$	$m^3 \cdot \text{part}^{-1} \cdot s^{-1}$	[101]
T_c	1200	K	étude actuelle
T_a	$9 \cdot 10^4$	K	[101]
a	$1 \cdot 10^5$	s^{-1}	[101]
b	$8 \cdot 10^{-14}$	$m^3 \cdot \text{part}^{-1} \cdot s^{-1}$	[101]
A_{ox}	715	$m \cdot s^{-1} \cdot K^{-1/2}$	[157]
$T_{a,\text{ox}}$	19 800	K	[157]

TAB. 4.1 | Constantes du modèle de Tesner-Magnussen

$$R_{s,c} = A_{\text{ox}} \mathcal{M}_{C_s} \sqrt{T} \exp\left(-\frac{T_{a,\text{ox}}}{T}\right) S \frac{Y_{O_2} \rho}{\mathcal{M}_{O_2}}, \quad (4.12)$$

où S , l'aire de la surface totale de suies par unité de volume de mélange, s'écrit $S = \pi d_p^2 \rho N_s$. On déduit le taux d'oxydation des noyaux radicalaires de l'équation (4.12) et de la relation suivante [100] :

$$R_{r,c} = R_{s,c} \frac{N_r}{Y_s}. \quad (4.13)$$

Par ailleurs, l'oxydation des suies par OH est négligée. Dans la flamme 1D laminaire prémélangée calculée en section 4.2 pour la mise au point du modèle, l'oxydation par OH a déjà été observée comme négligeable avec le modèle de Leung, comme mentionné en section B.2.2. De plus, le modèle de Magnussen est destiné à être utilisé pour des calculs de foyers dont le coût limite le nombre d'espèces à 5 ou 6. Dans ces conditions, on utilise des schémas cinétiques très réduits qui ne modélisent pas la formation de OH.

Les valeurs originales de l'ensemble des paramètres du modèle ainsi que leurs unités sont données dans le tableau 4.1. Par rapport au modèle original, seules les valeurs des constantes a et b ont été modifiées dans la suite de l'étude. De plus, la valeur du diamètre des particules de suie d_p dépend intrinsèquement de la configuration simulée et des conditions de combustion, et sera en conséquence adaptée au cas par cas.

4.1.3 Adaptation aux schémas numériques de CEDRE

Pour pouvoir utiliser le modèle qui vient d'être décrit au sein du code CEDRE, avec une méthode d'intégration temporelle telle que décrite en section 1.6, deux adaptations ont été nécessaires.

Adaptation portant sur la méthode GMRES

Au cours des calculs, le nombre de noyaux radicalaires par unité de masse N_r prend rapidement des valeurs très élevées, dont l'ordre de grandeur dépasse largement celui des autres grandeurs transportées. Cela pose un problème lors de la résolution itérative du système linéaire du schéma implicite.

En effet, la méthode GMRES utilise des « valeurs de référence » pour normer chaque grandeur conservative transportée lors de la résolution du système linéaire. La valeur

de référence pour N_r étant par défaut unitaire, les valeurs élevées prises par N_r lui donnent un poids considérable. De plus, les équations de transport pour N_r et Y_s sont fortement couplées par leur terme source (4.3), ce qui rend leur convergence difficile. Cette difficulté à converger associée au poids élevé de N_r empêche la méthode GMRES de converger. Pour résoudre ce problème, on choisit de transporter la quantité N_r/N_A , où N_A est le nombre d'Avogadro, ce qui limite la grandeur transportée à des valeurs très faibles, et donc le poids associé pour la résolution GMRES.

Implicitation du modèle

D'autre part, la résolution du système linéaire fait intervenir le calcul de la matrice jacobienne J comme décrit en section 1.6.2. On a constaté qu'en laissant à zéro les valeurs de cette matrice correspondant aux grandeurs transportées N_r et Y_s , les résultats obtenus pour ces grandeurs en utilisant un schéma implicite étaient fortement erronés. Les deux équations de transport de N_r et Y_s étant fortement couplées, il n'est pas étonnant d'observer un tel comportement. Pour résoudre ce problème, le formalisme de CEDRE prévoit pour l'implicitation des termes sources des équations de transport des scalaires l'utilisation de la sous-matrice jacobienne J_s restreinte aux termes sources de ces équations par rapport à ces mêmes scalaires. Elle s'exprime dans notre cas de la façon suivante :

$$J_s = \begin{pmatrix} \frac{\partial \dot{\omega}_r}{\partial \rho N_r} & \frac{\partial \dot{\omega}_r}{\partial \rho Y_s} \\ \frac{\partial \dot{\omega}_s}{\partial \rho N_r} & \frac{\partial \dot{\omega}_s}{\partial \rho Y_s} \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Les termes de J_s s'expriment :

$$\frac{\partial \dot{\omega}_r}{\partial \rho N_r} = \zeta(T)(f - g) - g_0 \rho N_s - \frac{R_{r,c}}{\rho N_r}, \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial \dot{\omega}_r}{\partial \rho Y_s} = -\frac{g_0 \rho N_r}{m_p}, \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial \dot{\omega}_s}{\partial \rho N_r} = \frac{R_{s,f}}{\rho N_r}, \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial \dot{\omega}_s}{\partial \rho Y_s} = -b \rho N_r - \frac{R_{s,c}}{\rho Y_s}. \quad (4.18)$$

En ce qui concerne les termes diagonaux (4.15) et (4.18), seules les contributions négatives doivent être conservées si on veut favoriser la stabilité du système. On conserve donc telle quelle l'expression (4.18). Quant au terme calculé par l'équation (4.15), son signe n'est pas connu *a priori* lorsque $T > T_c$ mais il est négatif dans le cas contraire. On choisit donc de le reformuler de la façon suivante :

$$\frac{\partial \dot{\omega}_r}{\partial \rho N_r} = (\zeta(T) - 1) \left(g_0 \rho N_s + \frac{R_{r,c}}{\rho N_r} \right). \quad (4.19)$$

4.1.4 Robustesse du modèle en milieu homogène

Le modèle a d'abord été testé en 0D pour observer son comportement et sa robustesse. Pour analyser le comportement des taux de formation, on se place dans une situation pour laquelle l'oxydation des suies n'intervient pas (pour $Y_{O_2} \sim 0$). En combinant l'équation de transport pour Y_s et la relation (4.9), on obtient :

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} = m_p (a - b \rho N_s) \rho N_r. \quad (4.20)$$

Lorsque le système atteint l'état stationnaire, on en déduit la relation simple (4.21) qui donne la fraction volumique à saturation $f_{v,sat}$ à partir de (4.8) et de la définition de la fraction volumique $f_v = \rho Y_s / \rho_s$:

$$f_{v,sat} = \frac{\pi a}{6 b} d_p^3. \quad (4.21)$$

La fraction volumique de suies $f_{v,sat}$ atteinte à l'état stationnaire ne dépend donc que de la valeur des paramètres a , b et d_p dans le cas d'un système 0D (pas de transferts diffusifs et convectifs). Pour les calculs 0D réalisés dans cette section, on choisit des paramètres identiques à ceux qui seront utilisés dans la section 4.2 pour simuler la flamme XSF2.64 (présentée en annexe B, section B.3). Pour d_p , une valeur représentative de la taille des particules mesurées dans la flamme XSF2.64 est choisie, soit $d_p = 20$ nm. Par ailleurs, la valeur du rapport a/b a été choisie de telle sorte que $f_{v,sat}$ soit égale à la valeur maximale mesurée expérimentalement, ce qui donne $a/b = 5 \cdot 10^{16}$. Des valeurs arbitraires ont été choisies en conséquence pour a et b ($a = 5 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$ et $b = 1 \cdot 10^{-8} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$). Ces valeurs seront affinées en temps utile en section 4.2.2.

Pour étudier le comportement du modèle, on a observé l'évolution des paramètres des suies donnée par le calcul d'un réacteur à pression constante rempli de gaz brûlés issus de la combustion d'un prémélange riche. Le modèle a été alimenté par des conditions initiales variées pour observer sa robustesse. Le code CEDRE a été utilisé avec un maillage 2D composé d'une seule cellule entourée par des conditions aux limites de type sortie à pression imposée. Comme conditions initiales pour le mélange gazeux, on a choisi un état représentatif des conditions juste en aval du front de flamme d'une flamme prémélangée riche, donné dans le tableau 4.2. La composition du mélange

Grandeur	T	P	Y_F	Y_{O_2}	Y_{H_2O}	Y_{CO_2}	Y_{CO}	Y_{N_2}
Valeur	1892 K	1 atm	$2 \cdot 10^{-3}$	0	$7,9 \cdot 10^{-2}$	$4,35 \cdot 10^{-2}$	0,17	0,7055

TAB. 4.2 | État thermochimique utilisé pour les calculs 0D

est figée afin d'éviter l'apparition d'effets parasites comme la variation de la masse volumique sur l'évolution de la fraction volumique de suies. Le tableau 4.3 récapitule les conditions initiales testées pour le modèle de suies. Pour les cas 3 et 4, les valeurs initiales dépassent celles correspondant à la saturation donnée par le modèle. On ne peut évidemment pas obtenir de telles conditions en 0D, mais lorsque les transports diffusifs et convectifs sont pris en compte, il se peut que le niveau de saturation soit localement dépassé. On cherche à vérifier dans ce cas la bonne stabilité du modèle.

Cas de calcul	$Y_{s,ini}$	$N_{r,ini}$
cas 1	0	0
cas 2	$1,2 \cdot 10^{-3}$	0
cas 3	$5 \cdot 10^{-3}$	0
cas 4	$5 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{11}$

TAB. 4.3 | Conditions initiales pour le modèle de suies testé en 0D.

L'évolution temporelle des fractions volumiques de suie obtenues est présentée sur la figure 4.1. Sur la figure 4.1a concernant les cas 1 et 2, les valeurs initiales sont situées en dessous du niveau de saturation du modèle. On constate la croissance de

la fraction volumique jusqu'à saturation à la valeur $f_{v,sat} = 2,09 \cdot 10^{-7}$ donnée par la relation (4.21), et ceci quelle que soit la fraction massique initiale de suies. La figure 4.1b quant à elle montre que le modèle converge également vers le niveau de saturation pour les cas 3 et 4. Cela est dû au terme de rappel $-bm_p\rho^2N_sN_r$ du taux de formation $R_{s,f}$ (4.9), dont l'amplitude varie avec le nombre de noyaux radicalaires initial. La vitesse de convergence de f_v varie donc en fonction de cette amplitude, comme observé sur la figure 4.1b. On précise que l'état initial n'étant pas physique dans le cas 0D, le comportement du modèle ne l'est pas non plus, puisque les suies disparaissent non pas sous l'effet de l'oxydation mais par le terme de formation. On vérifie simplement que dans cette situation, le modèle ne diverge pas.

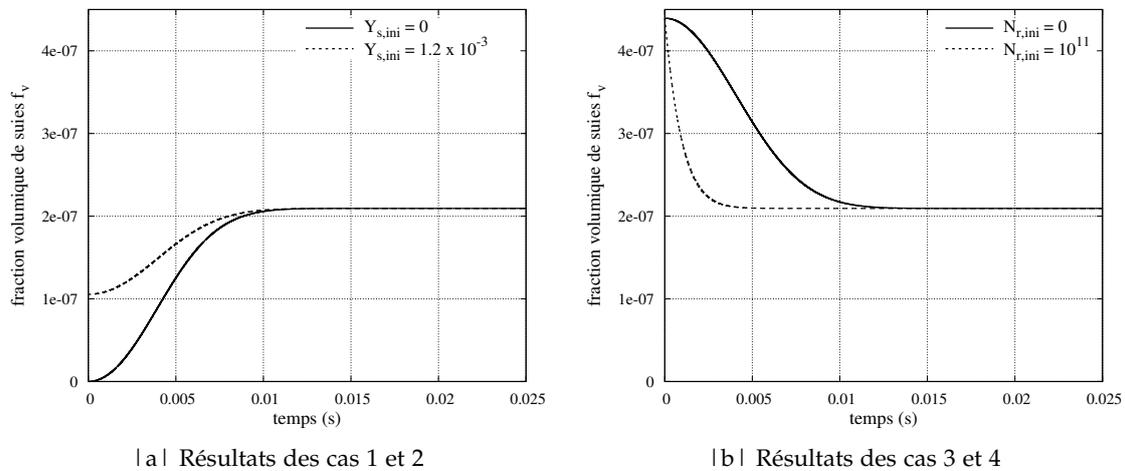


FIG. 4.1 | Évolution temporelle de la fraction volumique de suies en 0D, avec différentes conditions initiales.

La figure 4.2 présente l'évolution du nombre de noyaux radicalaires par unité de masse N_r dans les cas du tableau 4.3. N_r adopte une évolution d'allure exponentielle sans stabilisation constatée comme pour f_v , dans cette configuration où l'oxydation est nulle. Sur la figure 4.2a, le faible écart entre les évolutions de N_r révèle le rôle limité du terme de rappel $-g_0\rho^2N_rN_s$ sur N_r .

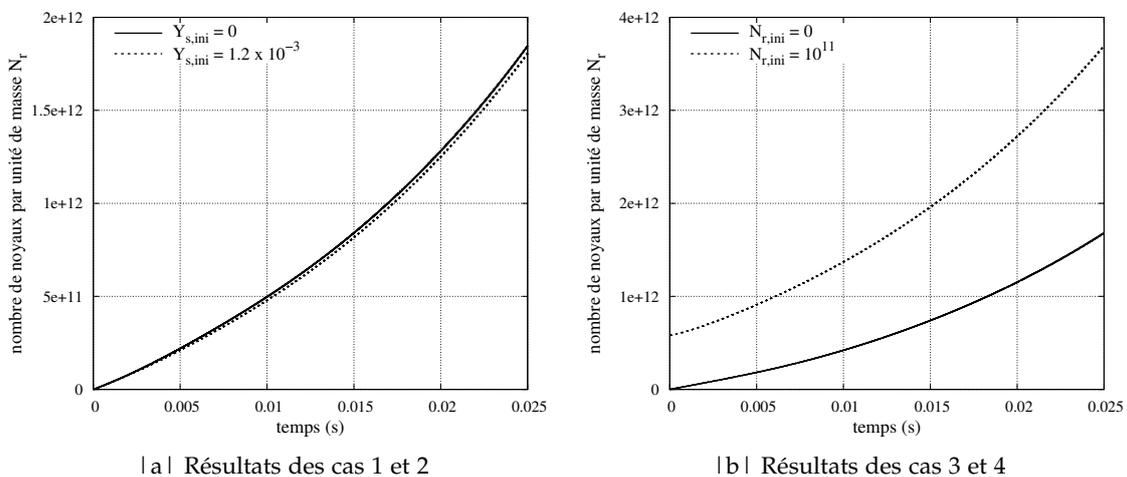


FIG. 4.2 | Évolution temporelle du nombre de noyaux radicalaires en 0D, avec différentes conditions initiales.

La figure 4.3 présente l'évolution temporelle, pour le cas 1, des différents termes composant les taux de formation $R_{r,f}$ (équation (4.4)) et $R_{s,f}$ (équation (4.9)). Concernant la formation des noyaux radicalaires (figure 4.3a), on constate qu'au début du calcul, lorsqu'il y a peu de noyaux radicalaires, le terme de formation spontanée est dominant. Le terme de réaction en chaîne prend ensuite de l'importance pour devenir dominant, en raison de sa croissance exponentielle. Enfin, une fois la fraction volumique de suie stabilisée (vers 10 ms sur la figure 4.1a), le rapport du terme de réaction en chaîne $(f - g)\rho N_r$ par le terme de rappel $g_0\rho^2 N_r N_s$ se conserve puisqu'il ne dépend alors que de constantes, le terme de rappel valant dans ce cas la moitié du terme de réaction en chaîne. À propos du terme source de la fraction massique de suies Y_s , la figure 4.3b montre l'action du terme de rappel qui conduit à l'annulation du taux de formation $R_{s,f}$ et à la stabilisation de Y_s (ou de f_v) observée sur la figure 4.1.

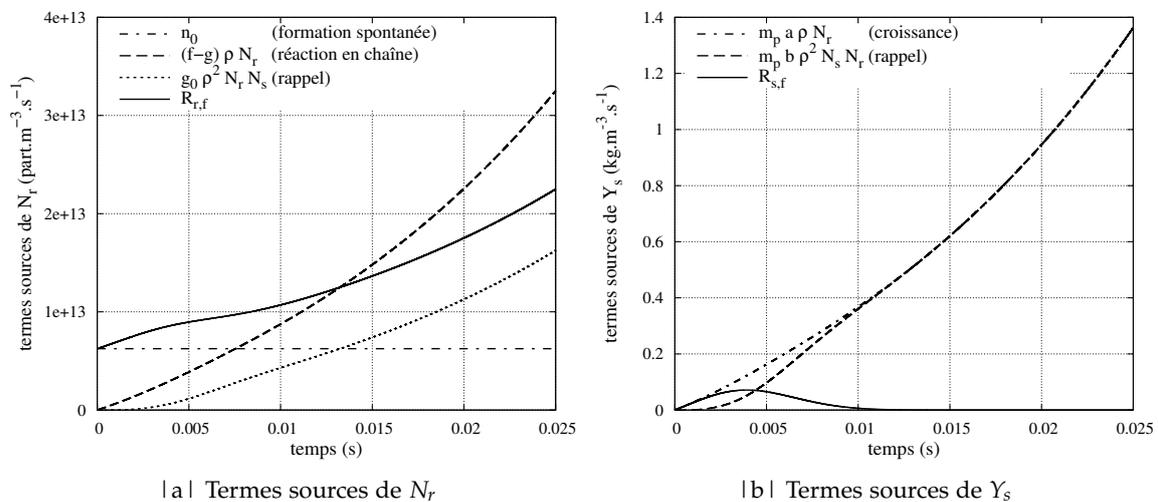


FIG. 4.3 | Évolution temporelle des contributions des termes sources pour N_r et Y_s , dans le cas 1 du tableau 4.3.

4.2 APPLICATION DU MODÈLE À LA PRÉDICTION DES SUIES DANS UNE FLAMME LAMINAIRE PRÉMÉLANGÉE RICHE

Dans cette section, on calcule les niveaux de suies avec le modèle de Tesner-Magnussen dans une flamme laminaire prémélangée riche. L'objectif est d'analyser le comportement du modèle dans une flamme élémentaire, avant son application à des flammes turbulentes. Le modèle est d'abord utilisé dans sa version originale en section 4.2.1. Il est ensuite amélioré (section 4.2.2) de manière à ce que les prédictions soient les plus proches possible des niveaux expérimentaux.

4.2.1 Prédications du modèle original

Le modèle de Tesner-Magnussen a été développé à partir de mesures dans des flammes laminares de diffusion acétylène-hydrogène/air [98] et benzène-hydrogène/air [99]. Il a également été testé sur des flammes turbulentes de diffusion acétylène/air [100]. L'objectif de cette étude est de prédire les niveaux de suies dans des foyers aéronautiques qui privilégient de plus en plus le régime de combustion partiellement prémélangé, cela afin de limiter les pics de température et donc la formation de NO_x . C'est pour cette

raison qu'on teste le modèle sur une flamme laminaire prémélangée plutôt que sur une flamme de diffusion.

La flamme prémélangée riche éthylène-air de Xu *et al.* [72] a été calculée à la richesse de 2,64 (flamme XSF2.64) en reprenant la méthodologie décrite dans l'annexe B. En particulier, le profil de température expérimental est imposé par la méthode décrite dans l'annexe C, afin de prendre en compte les pertes thermiques. La composition de la phase gazeuse est identique à celle obtenue en section B.4.1, excepté pour C_2H_2 qui n'est pas consommé par le modèle de Tesner-Magnussen. On surestime alors légèrement la fraction molaire de C_2H_2 de façon similaire aux précédentes observations sur la figure B.3b (trait pointillé correspondant au calcul CEDRE sans modèle de suies) concernant la flamme XSF2.93 à la richesse 2,93. Le modèle de Tesner-Magnussen a été appliqué dans sa forme originale, c'est-à-dire avec une oxydation qui dépend de la fraction massique et du terme source de combustible (relations (4.10) et (4.11)). Les valeurs des paramètres du modèle sont données dans le tableau 4.1 sauf pour a et b qui conservent les valeurs choisies pour l'étude de robustesse ($a = 5 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$ et $b = 1 \cdot 10^{-8} \text{ m}^3 \cdot \text{part}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$), et on choisit d_p comme la valeur maximale mesurée dans la flamme, soit $d_p = 26 \text{ nm}$.

Le profil de fraction volumique de suies obtenu est tracé sur la figure 4.4, 350 ms et 400 ms après l'activation du modèle de suies. On remarque un premier pic qui révèle la formation de suies au niveau du front de flamme et en amont (pour $x \in [5; 10 \text{ mm}]$). On constate que cette évolution n'est pas du tout stabilisée aux instants examinés. Ce phénomène est expliqué dans le paragraphe suivant. En aval de cette zone, f_v croît plus fortement sur l'intervalle $[10; 20 \text{ mm}]$, puis dépasse la valeur de saturation $f_{v,sat}$ en raison des transferts convectifs et diffusifs qui contribuent à l'augmentation de f_v alors que son terme source est nul. Comme l'oxydation est relativement faible dans cette flamme très riche, f_v revient en aval à la valeur de $f_{v,sat}$ qui a été formulée en l'absence d'oxydation.

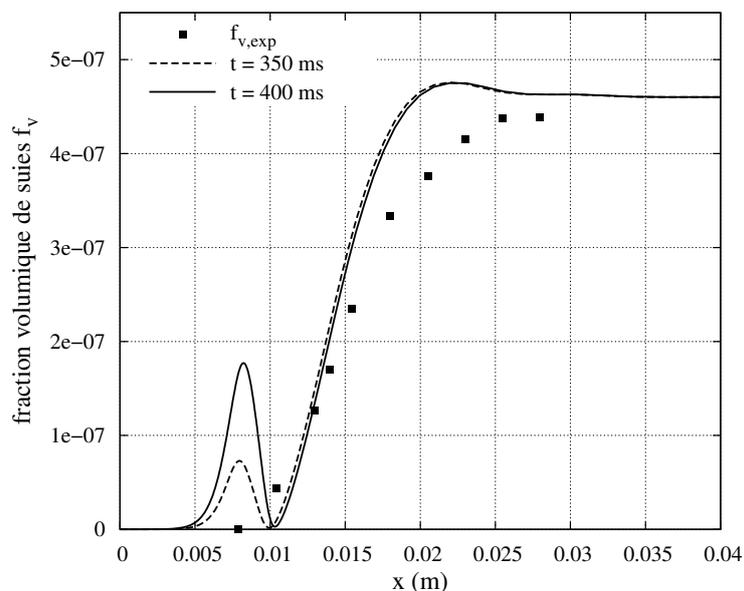


FIG. 4.4 | Profils de f_v obtenus avec le modèle original après 350 ms et 400 ms de calcul, comparés aux mesures expérimentales.

La présence de suies au niveau du front de flamme et en amont n'est pas réaliste puisque les suies sont censées croître en aval du front de flamme. Il se trouve que les noyaux radicalaires diffusent à l'instar des espèces gazeuses à travers le front de flamme. Leur formation de type réaction en chaîne conduit alors une augmentation du nombre

de noyaux de plus en plus forte dans cette zone, ce qui conduit également à la formation de suies. On verra en section 4.2.2 comment inhiber ce phénomène.

Observons les taux de formation et d'oxydation des suies dans la flamme, tracés sur la figure 4.5, 400 ms après l'activation du modèle de suies. Pour ce qui concerne le taux de formation $R_{s,f}$, on retrouve la zone de croissance — irréaliste — en amont du front de flamme, suivie d'une seconde zone où $R_{s,f}$ est positif. Il devient ensuite négatif lorsque $f_v > f_{v,sat}$ en raison du terme de rappel, puis finit par s'annuler. Le taux d'oxydation $R_{s,c}$ est très élevé au niveau du front de flamme, lorsque le terme source de combustible $\dot{\omega}_F$ est élevé (voir relation (4.11)). Cela est contraire aux observations faites avec le modèle de Leung dans la flamme similaire XSF2.93 sur la figure B.7 (annexe B), où le taux d'oxydation est logiquement négligeable puisque la flamme est riche et donc le dioxygène quasiment absent. Il est donc souhaitable de pallier à cette oxydation intempestive, ce qui sera étudié en section 4.2.2. En aval de ce premier pic, $R_{s,c}$ prend des valeurs négatives en raison de valeurs légèrement positives données par le modèle FPI pour $\dot{\omega}_F$ qui sont amplifiées par les valeurs très faibles de fraction massique de combustible Y_F . Comme ce phénomène n'est pas physique, on aurait pu limiter le terme source d'oxydation à des valeurs positives.

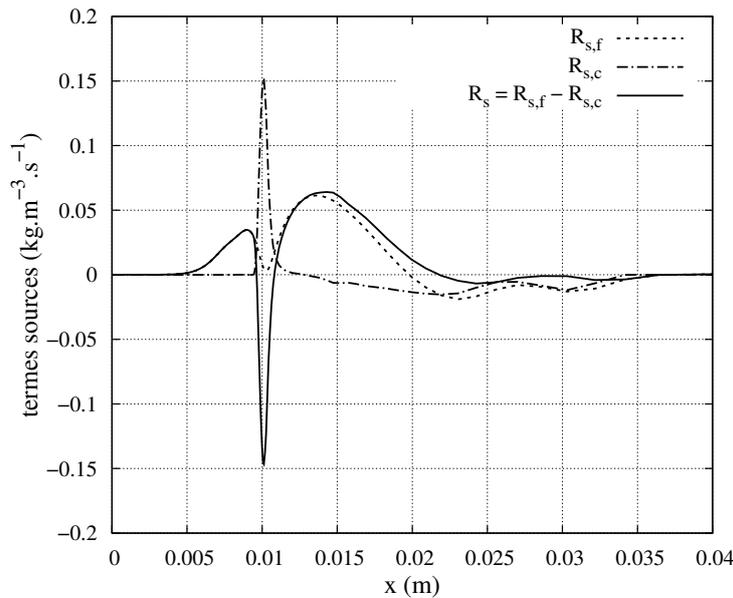


FIG. 4.5 | Terme source pour les suies décomposé à la manière de l'équation (4.3), avec le modèle original, après 400 ms de calcul.

Il s'agit maintenant d'adapter le modèle aux flammes laminaires prémélangées, en supprimant les deux anomalies observées, à savoir la formation de suies en amont du front de flamme et l'oxydation des suies près du front de flamme. C'est l'objet de la section suivante.

4.2.2 Améliorations du modèle

4.2.2.1 Étape d'oxydation dépendante de l'oxydant

On s'intéresse tout d'abord à l'oxydation des suies en remplaçant le sous-modèle original par celui issu du modèle de Leung, à l'aide des relations (4.12) et (4.13). On obtient alors un nouveau profil de fraction volumique, tracé et comparé à l'ancien sur la figure 4.6 après 400 ms de calcul. On trace à nouveau les taux de formation et

d'oxydation sur la figure 4.7, afin de les comparer à ceux de la figure 4.5. La formation des suies est beaucoup plus rapide puisque l'oxydation est beaucoup moins forte qu'auparavant. Le taux de formation est maintenant dominant près du front de flamme.

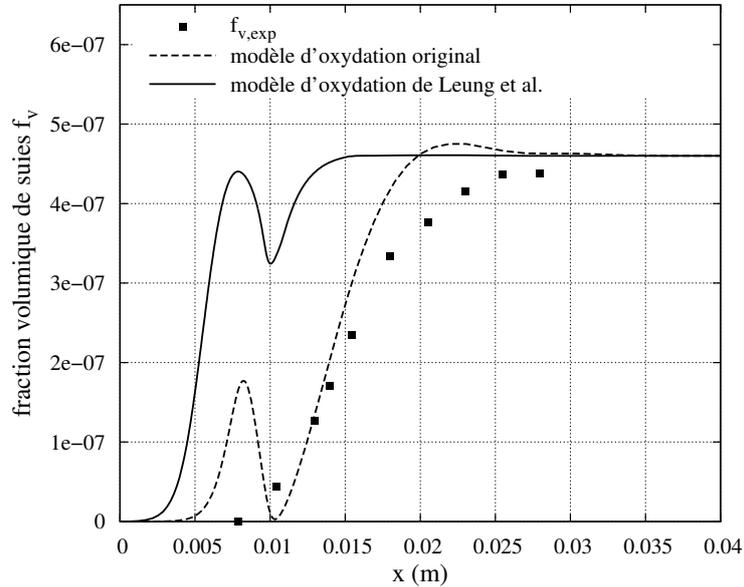


FIG. 4.6 | Effet de la modification de l'étape d'oxydation sur le profil de f_v .

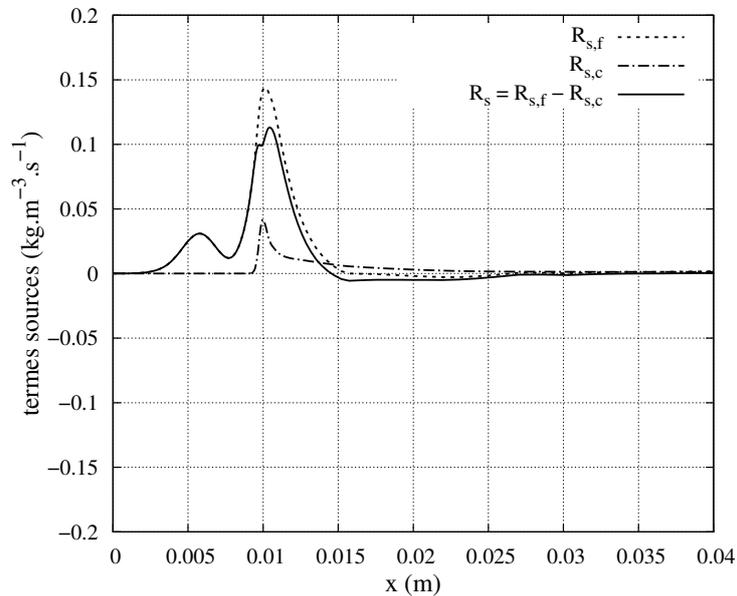


FIG. 4.7 | Terme source pour les suies décomposé à la manière de l'équation (4.3), avec le sous-modèle d'oxydation de Leung.

4.2.2.2 Température critique pour la réaction en chaîne

Il reste à inhiber la formation des suies en amont du front de flamme. On a vu qu'elle était due à la diffusion des noyaux radicalaires à travers le front de flamme suivie de la réaction en chaîne de formation des noyaux. On propose d'inhiber cette réaction en chaîne pour les basses températures, puisque physiquement les suies ne peuvent

croître que dans un milieu à haute température qui permet aux réactions en phase gazeuse et hétérogènes de se réaliser. On introduit la fonction créneau $\zeta(T)$ donnée par la relation (4.7) dans le terme de formation par réaction en chaîne de l'expression (4.4). En choisissant une température critique représentative $T_c = 1200$ K, on obtient un nouveau profil de f_v tracé sur la figure 4.8 et comparé à l'ancien ($T_c = 0$ K). Le profil est maintenant proche des mesures expérimentales. Notons que des valeurs de T_c de 1400 K et 1600 K ont également été testées et ont très peu d'influence sur le profil de f_v .

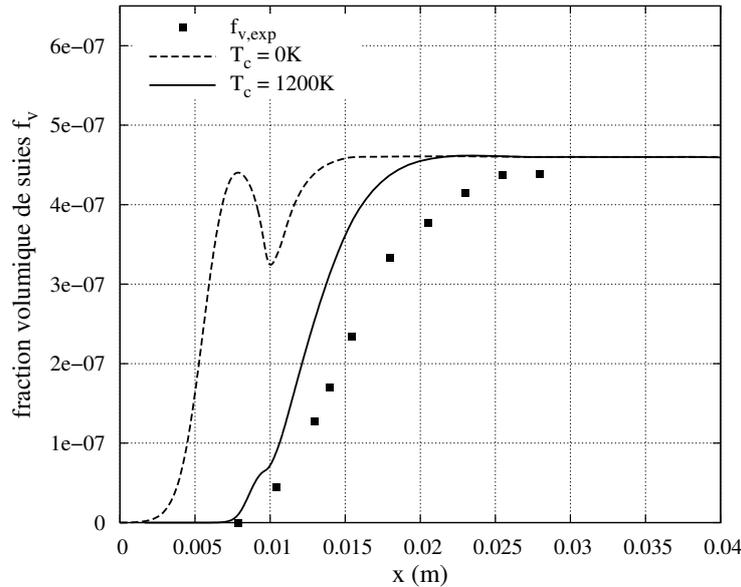


FIG. 4.8 | Effet de la fonction seuil $\zeta(T)$ sur le profil de f_v .

4.2.2.3 Test de la limitation du taux de formation des suies

On a observé qu'en 0D, le taux de formation des suies $R_{s,f}$ reste positif ou nul lorsque les conditions initiales sont physiques (cas 1 et 2 de la section 4.1.4), comme le prévoit l'équation (4.20); alors que dans une flamme 1D laminaire prémélangée, les transports convectifs et diffusifs des suies dans la flamme 1D conduisent à un dépassement du niveau de saturation : $f_v > f_{v,sat}$, et $R_{s,f}$ devient négatif.

On pourrait intuitivement vouloir limiter le taux de formation des suies $R_{s,f}$ à des valeurs positives, puisque par définition c'est un taux de formation. Cela reviendrait à inhiber le modèle d'autorégulation de la formation des suies. On observe sur la figure 4.9a qu'une telle limitation n'a que de faibles conséquences sur le profil de f_v dans le cas de cette flamme 1D. Lorsque $R_{s,f}$ est limité aux valeurs positives ou nulles (pointillés), seule l'oxydation a un effet consommateur sur les suies qui est assez faible dans cette flamme. Cependant, l'écart observé sur f_v est sensible à l'amplitude des flux de convection et de diffusion, qui contribuent à son augmentation, et à la force de l'oxydation qui contribue à sa diminution. Un effet plus significatif de la limitation de $R_{s,f}$ pourrait donc être observé dans d'autres conditions.

Le comportement du modèle tel qu'il a été conçu, soit sans limitation du terme source de formation des suies, est difficile à interpréter, puisque ce terme est parfois consommateur de suies. On atteint ici les limites de la signification physique du modèle, un modèle aussi simple ne pouvant décrire en détails tous les phénomènes physiques prenant part à la formation des suies. Dans cette étude, on conserve le terme de formation non limité comme prévu par le modèle original.

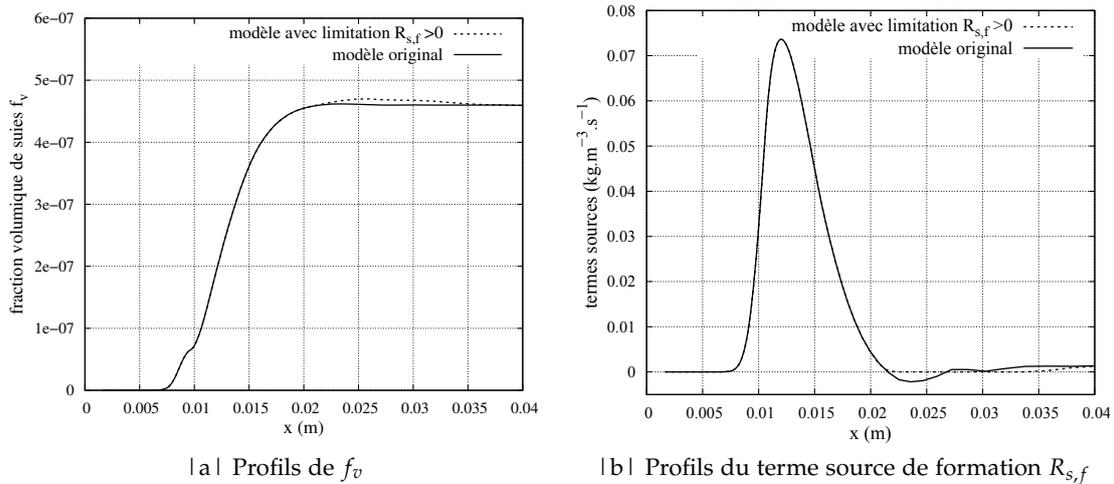


FIG. 4.9 | Effets de la limitation de $R_{s,f}$ dans une flamme laminaire prémélangée.

4.2.2.4 Ajustement des paramètres empiriques

Pour les calculs réalisés jusqu'à ce stade de l'étude, le rapport a/b a été choisi de manière à obtenir une valeur de $f_{v,sat}$ proche de la valeur maximale mesurée expérimentalement. Cependant, le choix individuel des valeurs pour a et b a été fait par défaut et n'a pas encore été étudié. On propose d'affiner ces valeurs pour améliorer les prédictions du modèle. Une étude paramétrique a d'abord été réalisée en conservant la valeur du rapport $a/b = 5 \cdot 10^{16} \text{ part} \cdot \text{m}^{-3}$, et en faisant varier les valeurs de a et b . La figure 4.10 compare les résultats obtenus au profil expérimental de f_v . Les paramètres a et b influencent directement la vitesse de formation des suies, qui augmente logiquement avec la valeur de a .

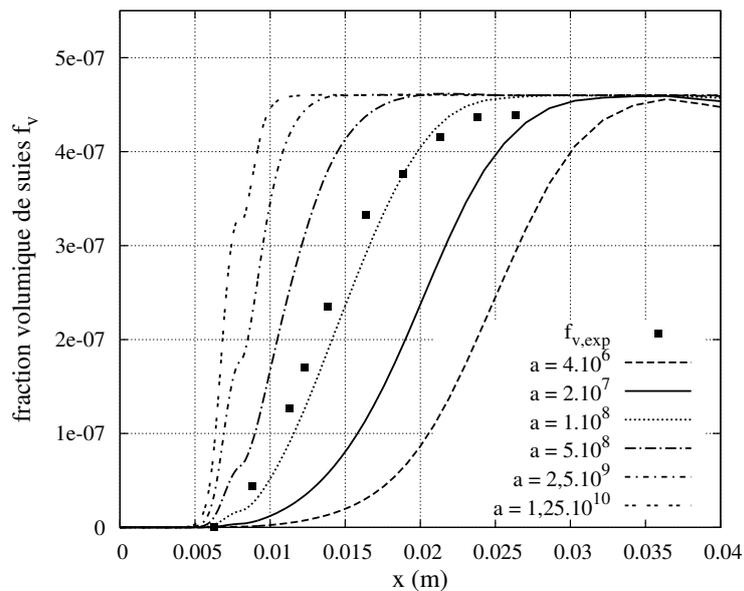


FIG. 4.10 | Profils de fraction volumique de suie obtenus avec différentes valeurs de a et b en conservant a/b .

A l'aide des résultats de cette étude paramétrique, il est possible d'affiner les valeurs de a et b pour obtenir un profil de f_v le plus proche possible du profil expérimental. Les

valeurs finalement retenues pour a et b sont :

$$a = 1,5 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1},$$

$$b = 3,15 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{part}^{-1},$$

et les profils de fraction volumique et des termes sources pour les suies sont tracés sur la figure 4.11.

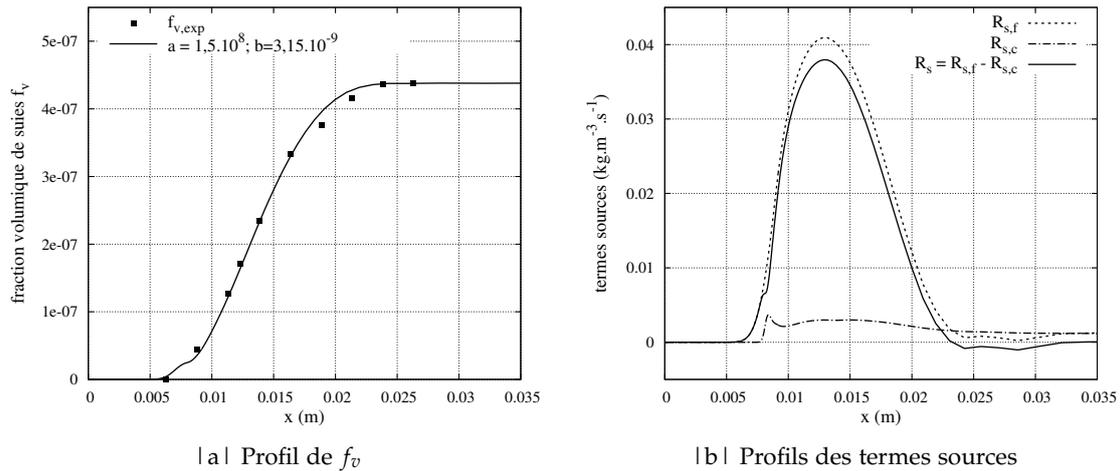


FIG. 4.11 | Profils obtenus avec l'ajustement fin de a et b .

4.2.3 Confrontation du modèle aux variations de richesse

En tenant compte des choix effectués dans la section précédente, le modèle a été soumis à des variations de la richesse de la flamme simulée : Il a été appliqué aux flammes XSF2.33 et XSF2.93, présentées en annexe B (section B.3). Les valeurs des paramètres a et b sont celles préconisées dans la section précédente et les valeurs des autres paramètres sont celles qui ont été données antérieurement, hormis le diamètre des particules d_p . Celui-ci a été ajusté en fonction des mesures expérimentales, ce qui donne 19 nm, 26 nm et 30 nm respectivement pour les flammes XSF2.33, XSF2.64 et XSF2.93. Pour les flammes XSF2.33 et XSF2.64, le diamètre choisi correspond à celui des plus grandes particules mesurées. Pour la flamme XSF2.93, le diamètre maximal mesuré est de 40 nm, mais cette valeur induit une surestimation de f_v de 140 %. Le diamètre choisi a donc été réduit en conséquence. Notons que d_p conditionne le niveau de saturation $f_{v,sat}$ de manière fortement non linéaire d'après la relation (4.21). Un tel comportement n'est pas souhaitable car les prédictions du modèle dépendent de la mesure de d_p dont l'incertitude est amplifiée par le modèle.

Les profils de fraction volumique de suies obtenus sont tracés et confrontés aux mesures expérimentales sur la figure 4.12, pour les trois flammes simulées. L'augmentation de f_v dans la flamme est assez bien reproduite pour les richesses égales à 2,64 et 2,93, tandis que le profil numérique s'écarte plus des points expérimentaux à la richesse 2,33. Les valeurs maximales de f_v en aval sont bien reproduites grâce à l'ajustement du diamètre des particules. Cela révèle la principale faiblesse du modèle : son caractère non prédictif sur les niveaux de fraction volumique. En l'occurrence, il est nécessaire de connaître *a priori* le diamètre moyen des particules de suie pour fixer le niveau maximal de fraction volumique de suies dans la flamme.

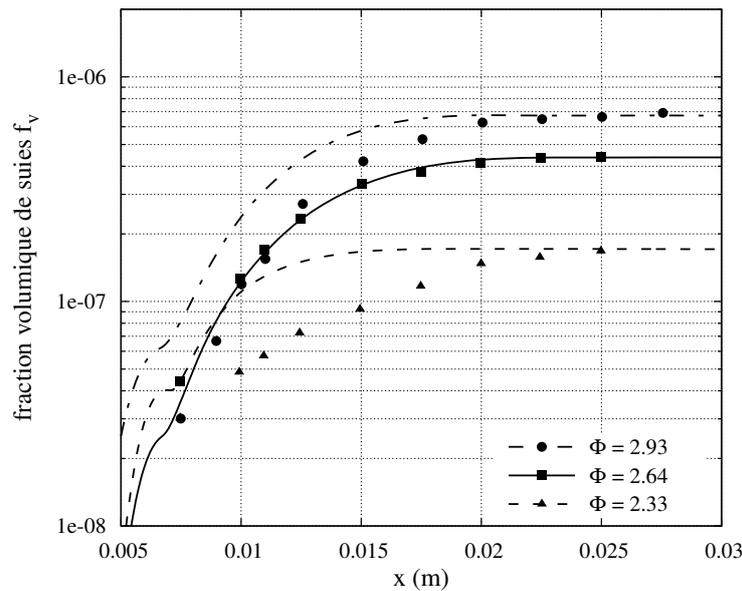


FIG. 4.12 | Profils de fraction volumique de suie obtenus à plusieurs richesses de flamme.

4.3 CONCLUSION DU CHAPITRE

Dans ce chapitre 4, le modèle empirique de formation des suies de Tesner-Magnussen a été choisi dans le but de prédire ultérieurement les niveaux de suies au cours de calculs instationnaires de chambre de combustion. La formulation originale de ce modèle a été détaillée. Après avoir évalué le comportement et la robustesse du modèle en 0D, il a été appliqué au calcul d'une flamme 1D laminaire prémélangée. La formulation originale du modèle, élaborée sur des flammes de diffusion [98–100], a révélé des faiblesses en régime prémélangé. La formulation du phénomène d'oxydation a été remplacée, et le mécanisme de réaction en chaîne à l'origine de la formation du précurseur des suies a été inhibé dans les zones froides de l'écoulement. Les paramètres du modèle ont ensuite été ajustés pour terminer l'adaptation du modèle aux flammes prémélangées. Enfin, la confrontation du modèle à d'autres valeurs de richesse a donné satisfaction mais a néanmoins révélé son caractère non prédictif sur le niveau maximal de fraction volumique de suies.

Avant d'appliquer ce modèle à des flammes turbulentes dans lesquelles les caractéristiques des particules de suie sont mal connues *a priori*, il serait intéressant de confronter le modèle à des conditions de combustion variées afin de démontrer ses capacités et le rendre plus prédictif. Une flamme de diffusion ou partiellement prémélangée comme celle de Arana *et al.* [140] permettrait de valider le sous-modèle d'oxydation dans des conditions proches de celles d'une chambre de combustion. Une flamme à pression élevée comme celle de Liu *et al.* [74] fournirait également un cas d'application utile pour adapter le comportement du modèle à la montée en pression. Enfin la confrontation du modèle à des mesures dans des flammes turbulentes comme celle de Brookes et Moss [142] ou de Yang et Koçlu [126] aurait pu permettre de valider les prédictions du modèle en milieu turbulent. Notons néanmoins que Magnussen et Hjertager [100] démontrèrent la capacité du modèle à prédire les fractions volumiques de suie dans des flammes turbulentes à pression atmosphérique.

Cependant, la prédiction des suies n'est pas le seul objectif de la thèse ; c'est seulement un pré-requis pour la modélisation des transferts radiatifs dans des flammes riches en suies. Un autre pré-requis est la modélisation de la combustion diphasique dans un

dispositif industriel, activité qui est présentée dans les chapitres 5 et 6. Compte tenu des objectifs de la thèse, nous nous contenterons d'appliquer directement le modèle de suie présenté dans ce chapitre à la flamme turbulente à pression élevée présentée dans la suite. On s'affranchira du caractère non prédictif du modèle sur les niveaux de suie en l'ajustant sur les mesures de fraction volumique de suies disponibles pour cette flamme (voir section 6.2.3). On vérifiera toutefois que le modèle conserve l'atout pour lequel il a été choisi, *i.e.* sa capacité à prédire la topologie du champ de suies dans un dispositif industriel avec un faible coût de calcul.

Troisième partie

**Simulation de la formation des suies
et du rayonnement dans le foyer
TLC**

Le foyer TLC : caractéristiques physiques et numériques

5

Le cas d'application de cette thèse est une chambre de combustion équipée d'un injecteur aéronautique prémélangé swirlé impliquant une injection de combustible de type multipoint. Ce chapitre donne les informations préliminaires sur ce cas d'application et sa modélisation afin de permettre l'interprétation des résultats présentés dans les chapitres 6 et 7.

On détaille dans un premier temps la géométrie de la chambre de combustion étudiée et celle de l'injecteur, les points de fonctionnement étudiés expérimentalement et les méthodes de mesure utilisées pour caractériser l'écoulement dans la chambre. On donne ensuite les caractéristiques propres à la simulation telles que la géométrie du domaine de calcul et son maillage, le point de fonctionnement choisi, les conditions aux limites utilisées, ainsi que les modèles utilisés pour la simulation de l'écoulement turbulent diphasique réactif.

Pour permettre la diffusion publique de ce mémoire, des données confidentielles concernant le foyer TLC ne peuvent y figurer. En conséquence, la température des gaz dans cette chambre a été rapportée à une valeur arbitraire. On note T^* la température adimensionnée résultante.

Table des matières

5.1	La chambre de combustion TLC	117
5.1.1	Géométrie	117
5.1.2	Points de fonctionnement	119
5.1.3	Mesures réalisées	120
5.1.3.1	Caractérisation de la phase gazeuse réactive et des suies	121
5.1.3.2	Caractérisation de la phase liquide dispersée	122
5.2	Définition du domaine de calcul	124
5.2.1	Simplification de la géométrie	124
5.2.2	Maillage	125
5.3	Conditions aux limites	126
5.3.1	Choix du point de fonctionnement	126
5.3.2	Injection de la phase liquide	128
5.3.2.1	Température d'entrée du kérosène	128
5.3.2.2	Caractéristiques de l'injection pilote	130
5.3.2.3	Caractéristiques de l'injection multipoint	133
5.3.2.4	Synthèse des conditions limites retenues pour les régimes d'ap-proche et de montée	134
5.3.3	Injection de la phase gazeuse	135
5.3.4	Conditions aux parois	136
5.4	Choix des modèles pour la simulation numérique	136
5.4.1	Modèles pour la combustion turbulente diphasique	136
5.4.2	Modèle cinétique PEA pour la combustion du kérosène	138
5.4.2.1	Modèles physiques	138
5.4.2.2	Description du mécanisme réactionnel PEA	139
5.4.2.3	Validation du mécanisme sur une flamme laminaire prémélangée	140
5.5	Conclusion	141

5.1 LA CHAMBRE DE COMBUSTION TLC

Le projet européen TLC^(a) (*Towards Lean Combustion*) est un projet dont l'activité s'est déroulée entre 2005 et 2009. Il a été coordonné par SNECMA et a rassemblé 19 partenaires de 6 nationalités différentes. Les objectifs de ce projet étaient de :

- faire évoluer la conception des turbines à gaz avec des technologies permettant de produire moins de NO_x ;
- calibrer les modèles numériques pour la simulation CFD et améliorer la connaissance de la physique des phénomènes ;
- développer et mettre en œuvre des techniques de diagnostic de haute qualité pour la caractérisation des polluants comme les NO_x , les suies et les oxydes de carbone.

Dans ce cadre, un prototype d'injecteur conçu par SNECMA a fait l'objet d'une caractérisation avancée à l'ONERA. On détaille dans les sections suivantes les caractéristiques géométriques de l'injecteur et de la chambre expérimentale, les conditions de fonctionnement qui ont été étudiées expérimentalement, ainsi que les mesures réalisées.

5.1.1 Géométrie

La géométrie de la chambre TLC présentée sur la figure 5.1 reprend l'enveloppe interne du dispositif conçu à l'ONERA pour réaliser les mesures prévues dans le cadre du projet européen TLC. Ce dispositif est constitué :

- d'un plénum qui permet la tranquillisation de l'air avant son injection dans la chambre ;
- d'une chambre de combustion qui confine la flamme ;
- de l'injecteur multipoint et du bras d'injection de combustible ;
- d'un convergent qui permet la montée en pression dans la chambre par l'intermédiaire du col amorcé ;
- d'un bras de mesure en sortie de chambre.

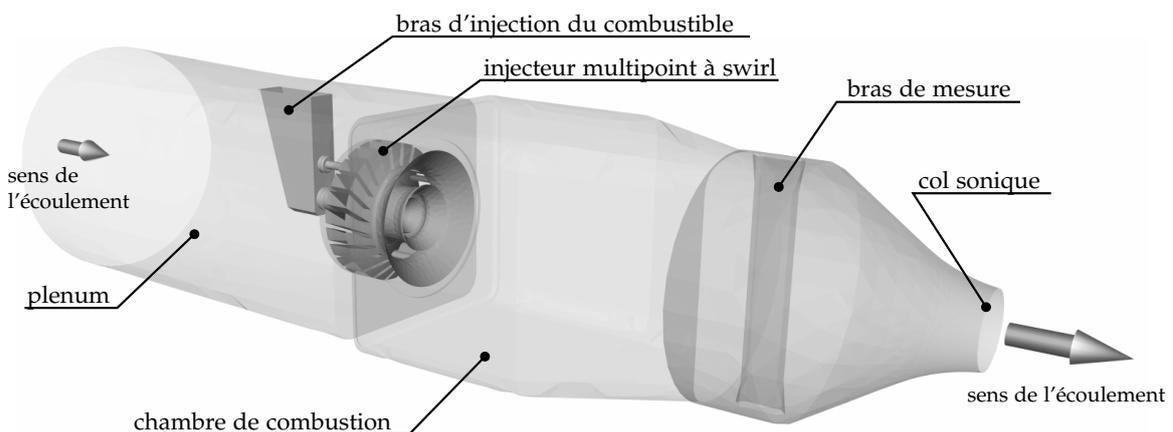


FIG. 5.1 | Structure du domaine de calcul de la chambre TLC.

Géométrie de l'injecteur

La chambre de combustion annulaire d'un foyer aéronautique est généralement composée d'une vingtaine d'injecteurs comme celui étudié dans la chambre TLC. Cet injecteur a été isolé pour faciliter sa caractérisation expérimentale. Dès lors, on perd tout effet d'interaction des injecteurs entre eux. L'injecteur TLC est représenté sur la figure 5.2. Il est composé de deux étages, identifiés par deux bols coniques : l'étage

(a). <http://www.tlc-project.eu/>

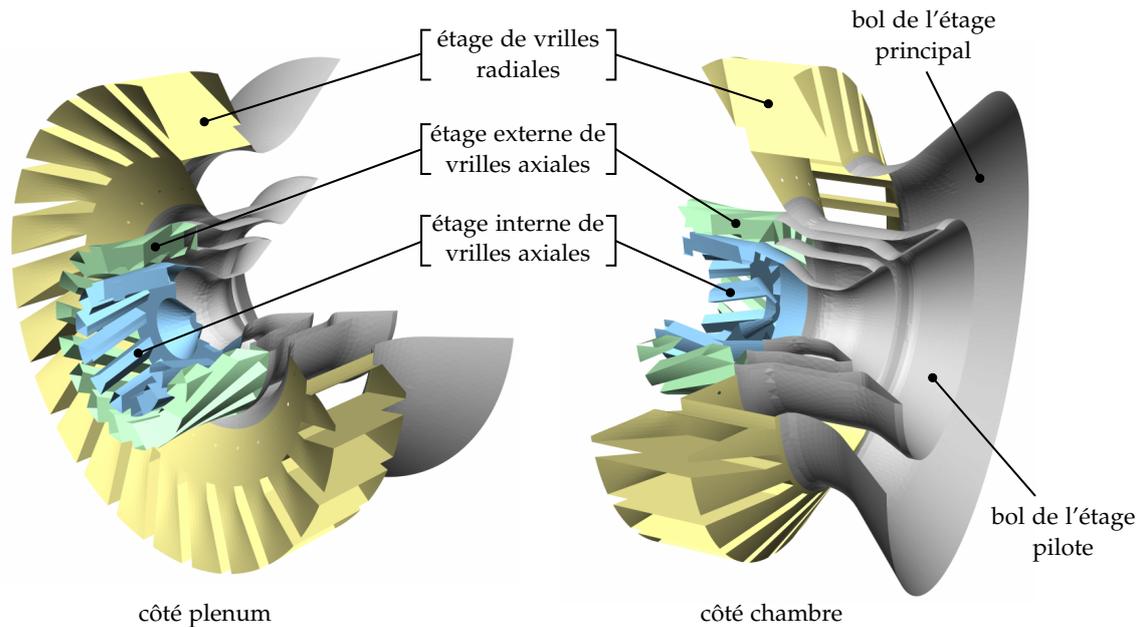


FIG. 5.2 | Vrilles d'injection d'air de l'injecteur TLC.

principal et l'étage pilote. Ils permettent de contrôler indépendamment deux zones très différentes de l'écoulement pour optimiser la combustion et réduire au mieux les émissions polluantes, ceci à différents régimes de fonctionnement. L'étage pilote est composé de deux étages de vrilles axiales contra-rotatives qui impriment à l'air un mouvement de swirl. Cet écoulement doit induire une recirculation de l'écoulement en aval afin de permettre la stabilisation de la flamme générée par la combustion du kérosène injecté dans cet étage pilote. Les deux swirls ainsi formés sont contra-rotatifs afin d'augmenter le cisaillement de l'écoulement gazeux et donc la fragmentation des gouttes de kérosène. Cela permet aussi de renforcer la zone centrale de recirculation et d'établir sa présence à l'intérieur du bol pilote, pour une meilleure stabilisation de la flamme. L'étage principal se compose d'un étage de vrilles radiales qui produit un écoulement swirlé dans le sens opposé à celui induit par l'étage externe des vrilles pilote. La majorité du débit d'air (environ 90 %) passe par l'étage principal, tandis que l'étage pilote interne conduit environ 3 % et l'étage pilote externe environ 7 % de ce débit. L'écoulement fortement swirlé de l'étage principal permet une bonne fragmentation du kérosène et un bon prémélange, tout en permettant à la recirculation centrale aval de se former. L'étage principal est destiné à favoriser une combustion prémélangée pauvre en combustible afin d'empêcher au maximum la formation de NO_x , tandis que l'étage pilote doit produire une zone de combustion riche qui permet d'assurer la présence de la flamme dans l'écoulement, quel que soit le régime de vol. Ces aspects seront confirmés par les calculs réalisés dans la suite de l'étude.

Géométrie des systèmes d'injection du kérosène

Chaque étage de l'injecteur possède son propre système d'injection de combustible. Pour l'étage principal, représenté sur la figure 5.3, un système d'injection multipoint composé de 24 orifices de 0,5 mm de diamètre permet d'injecter le kérosène à la sortie des vrilles radiales. Dans cette configuration, les jets de kérosène sont confrontés à un écoulement transverse d'air frais. L'injecteur pilote est un atomiseur situé sur l'axe, en sortie de l'étage interne de vrilles axiales. Il produit un spray en forme de cône creux schématisé sur la figure 5.4. Les gouttes produites sont injectées dans un écoulement à

co-courant. Les deux systèmes d'injection sont alimentés chacun par le bras d'injection qui renferme deux conduites indépendantes. La géométrie du système est visible sur la figure 5.5.

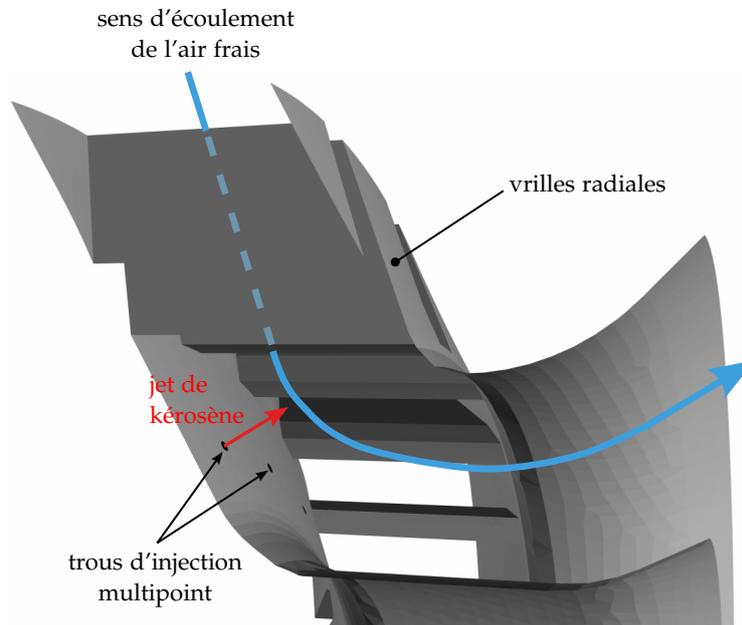


FIG. 5.3 | Configuration de l'injection multipoint de l'injecteur TLC.

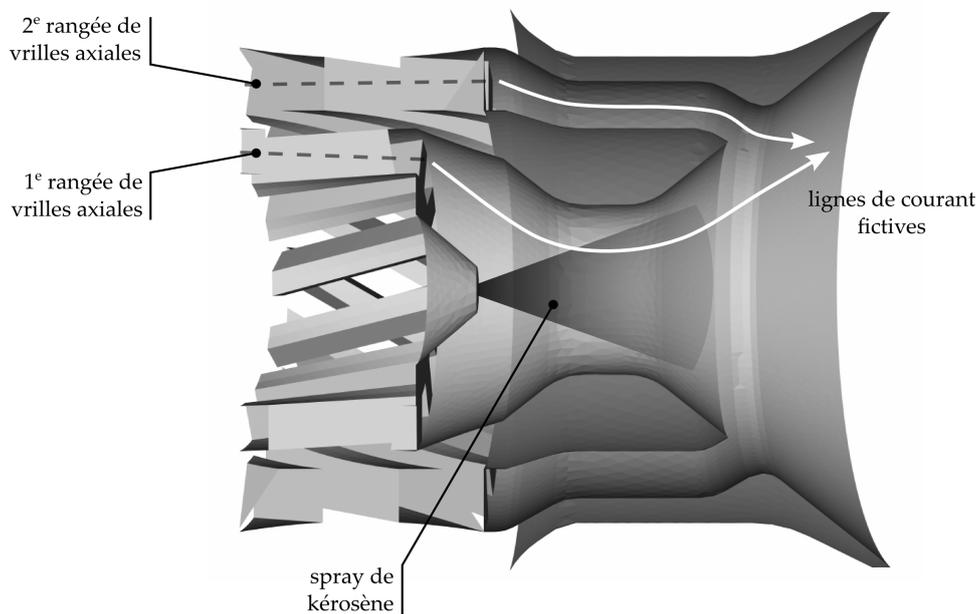


FIG. 5.4 | Configuration de l'injection pilote de l'injecteur TLC.

5.1.2 Points de fonctionnement

Les points de fonctionnement à considérer pour l'étude d'un injecteur correspondent aux différents régimes moteur rencontrés lors d'un vol. En particulier, l'ICAO (*International Civil Aviation Organization*) a défini des points de fonctionnement standards décrivant le cycle idéal LTO (*Landing and Take-Off*), défini dans les conditions ISA (*International Standard Atmosphere*) [161]. Ce cycle tente de représenter les conditions de vol d'un avion

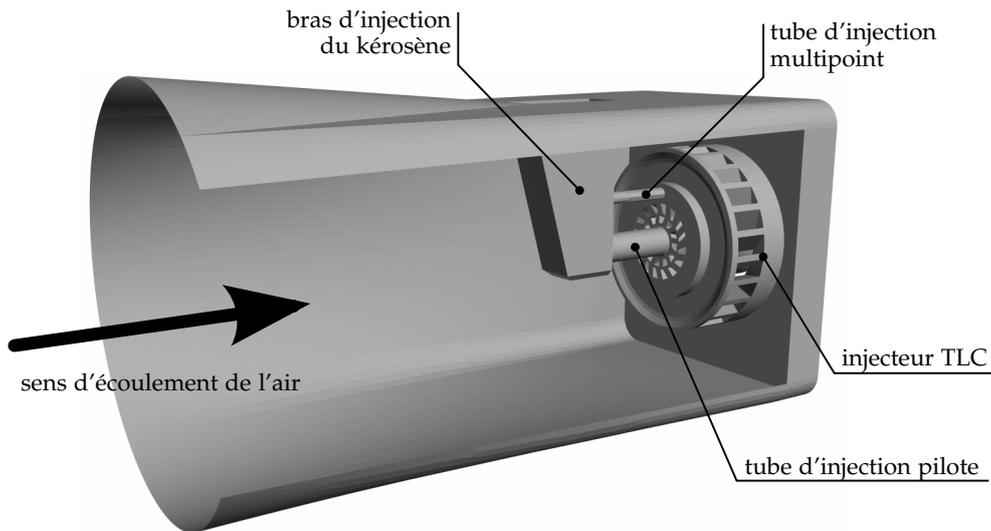


FIG. 5.5 | Visualisation du système d'alimentation de l'injecteur TLC en kérosène.

en-dessous de 915 m (3000 ft) d'altitude, afin d'évaluer le niveau d'émissions polluantes (suies, hydrocarbures imbrûlés, CO et NO_x) autour des aéroports. Les normes imposées par l'ICAO reposent sur les conditions du cycle LTO et font partie du processus de certification des moteurs. Le lecteur intéressé pourra consulter l'annexe 16 de la convention sur l'aviation civile internationale [161] qui définit rigoureusement les conditions de certification.

Ces points de fonctionnement sont présentés sur la figure 5.6, sur laquelle figurent les deux caractéristiques associées à chacun d'eux :

- la poussée exprimée en pourcentage de la poussée maximale délivrée par le moteur au décollage dans des conditions standards ;
- la durée de fonctionnement utilisée pour le calcul des émissions polluantes.



FIG. 5.6 | Étapes du cycle LTO (*Landing and Take-Off*) défini par l'ICAO.

Dans le cadre des mesures réalisées sur la chambre TLC à l'ONERA, les régimes d'approche, taxi et montée ont été étudiés. Le régime de décollage, qui délivre le plus de puissance, n'a pu être reproduit dans le dispositif expérimental pour des raisons de tenue thermique des matériaux. En outre, le régime de vol de croisière a également été étudié. Le tableau 5.1 récapitule les données caractéristiques de ces points de fonctionnement : la pression dans la chambre, la température T_{air}^* de l'air frais en entrée, la part du débit de combustible D_{mul} injectée par le système d'injection multipoint, la richesse globale ϕ_g de la chambre et la puissance théorique P délivrée.

5.1.3 Mesures réalisées

L'injecteur TLC a été caractérisé expérimentalement sur plusieurs bancs de l'ONERA. L'étude à *chaud* (après allumage et stabilisation de la flamme) a été réalisée au banc

	Pression (bar)	T_{air}^*	D_{mul} (%)	ϕ_g	P (kW)
taxi	4	0,168	0	0,202	203
approche	9,5	0,211	50	0,264	555
montée	19,5	0,260	85	0,408	1546
croisière	16,5	0,239	85	0,36	1155

TAB. 5.1 | Caractéristiques des points de fonctionnement étudiés dans la chambre TLC.

M1 au centre ONERA de Palaiseau. Ce banc est capable de fournir un écoulement d'air chaud à une température maximale de 850 K et un débit de $3 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ pour obtenir des conditions représentatives de l'air entrant dans la chambre de combustion d'un moteur aérobic. La figure 5.7 présente un cliché de la chambre utilisée pour cette étude à chaud, où l'on distingue l'injecteur TLC monté dans la chambre, l'un des hublots de visualisation et la sortie oblongue du premier convergent. La caractérisation à froid (sans allumage de l'écoulement) de l'injecteur a été effectuée sur trois bancs du centre ONERA du Fauga-Mauzac, selon l'instrumentation utilisée et le confinement ou non de l'injecteur.

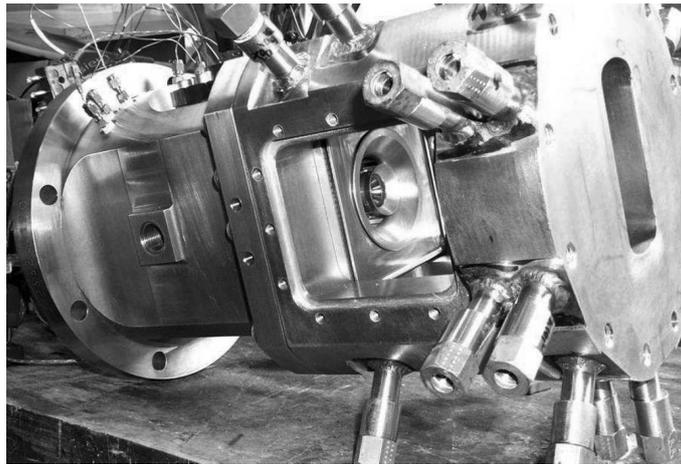


FIG. 5.7 | Photographie de la chambre TLC du banc M1 avec son injecteur.

5.1.3.1 Caractérisation de la phase gazeuse réactive et des suies

Pour caractériser la flamme produite par l'injecteur TLC, les niveaux de température ainsi que des distributions spatiales de vapeur de kérosène et de radical OH ont été mesurés. Pour cela, les techniques de mesures kerosene-LIF (*kerosene Laser-Induced Fluorescence*) et CARS (*Coherent Anti-Stokes Raman Scattering*) ont été adaptées aux conditions à haute pression.

La technique de mesure CARS a été utilisée pour quantifier les niveaux de température dans la chambre [162]. Cette technique non intrusive consiste à focaliser sur le volume de mesure trois ondes laser, dont deux à une fréquence ω_p et la troisième à la fréquence ω_s . En fonction de la différence $\omega_p - \omega_s$, des transitions rovibrationnelles des molécules présentes dans le volume de contrôle vont être excitées et produire un rayon résultant de fréquence $\omega_{AS} = 2\omega_p - \omega_s$, dont l'intensité est mesurée. En pratique, on utilise une source laser à large bande pour mesurer en une fois le spectre d'intensité dont la forme dépend de la température, de la pression et des concentrations d'espèces dans le volume de mesure. La température est déduite en comparant le spectre d'inten-

sité mesuré à des spectres d'excitation de N_2 calculés théoriquement pour différentes températures, toutes conditions égales par ailleurs. Les mesures réalisées sur le banc M1 ont permis d'obtenir 4 profils de température situés dans les 4 plans transversaux schématisés sur la figure 5.8.

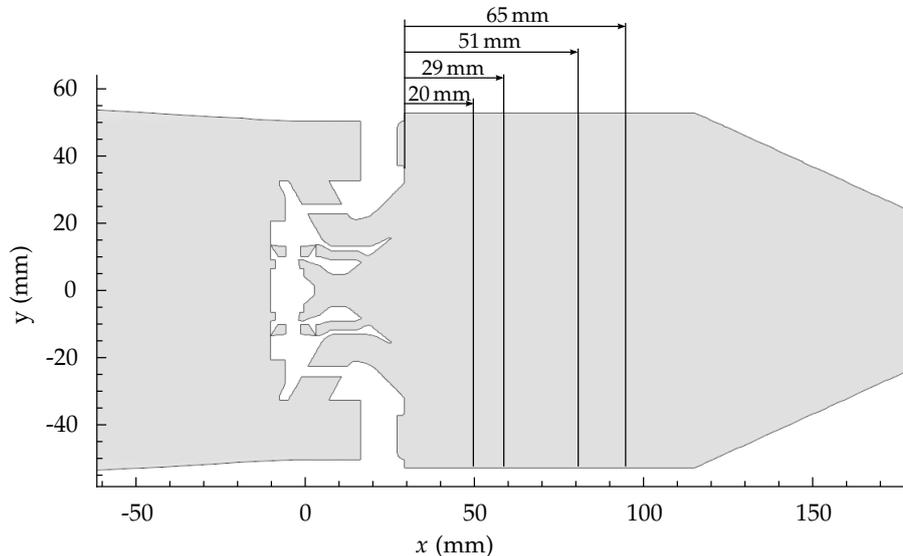


FIG. 5.8 | Position des profils transversaux des mesures CARS dans le plan médian.

La richesse locale dans la chambre ainsi que la structure de la flamme ont également été caractérisées. Pour cela, la fluorescence induite par laser (LIF pour *Laser Induced Fluorescence*) du radical OH et d'une espèce aromatique représentative de la vapeur de kérosène a été mesurée dans le plan médian et dans des plans transversaux. Tous les détails et les principaux résultats de ces mesures sont donnés dans le papier de Orain *et al.* [163].

Enfin, les suies ont été caractérisées à la fois à l'intérieur de la chambre et en sortie [164]. Des mesures LII ont été réalisées dans le plan médian de la chambre, et calibrées par des mesures d'extinction (LE) réalisées *ex situ* sur une flamme stationnaire laminaire prémélangée. En sortie de chambre, deux méthodes de mesure par classification des particules ont été mises en œuvre, basées soit sur le diamètre aérodynamique des particules, soit sur leur mobilité électrique.

5.1.3.2 Caractérisation de la phase liquide dispersée

Les jets de combustible produits par l'injecteur TLC ont été étudiés à l'aide de différents diagnostics expérimentaux afin de caractériser la phase dispersée et de déterminer les conditions d'injection pour la simulation numérique.

L'étude de l'injecteur sans confinement à pression atmosphérique a permis la mise en place aisée de diagnostics tels que la mesure de distribution de flux volumique liquide par un dispositif mécanique appelé *patternator* et la caractérisation de la distribution globale en taille des gouttes par un Malvern (voir Lavedrine [165] et le rapport technique [166] pour plus de détails). À pression élevée, le confinement de l'injecteur restreint les diagnostics utilisés à des mesures optiques locales réalisées à travers les hublots de la chambre (voir la photo du dispositif expérimental en figure 5.9).

Les grandeurs suivantes ont été caractérisées à pression élevée et à pression atmosphérique [166–168] :

- la vitesse du gaz par la méthode LDA (*Laser Doppler Anemometry*) ;
- la vitesse des gouttes par la méthode PDA (*Particle Doppler Anemometry*) ;

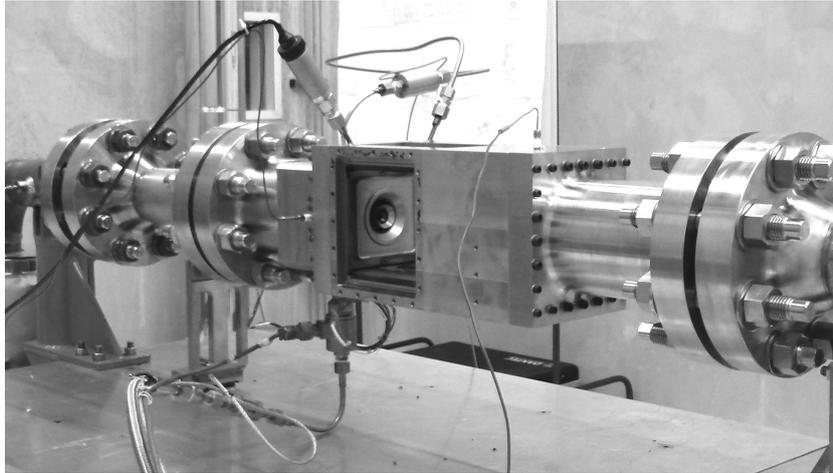


FIG. 5.9 | Photographie du banc TLC de caractérisation de la phase dispersée au centre ONERA du Fauga-Mauzac.

– le diamètre des gouttes par PDA.

Ces mesures ont été réalisées dans trois plans transversaux schématisés sur la figure 5.10. Pour mesurer la vitesse du gaz, la technique LDA permet de mesurer la vitesse de particules qui ensemencent l'écoulement gazeux. En focalisant en un point deux faisceaux laser de fréquences légèrement décalées, on obtient un réseau ellipsoïde d'interfranges. Lorsque les particules traversent ce réseau, elles réfléchissent la lumière à une fréquence modifiée par l'effet Doppler. On peut déduire de cette fréquence la vitesse des particules.

Pour caractériser les gouttes de kérosène, on utilise le même principe que la LDA en utilisant les gouttes comme particules d'ensemencement. La méthode PDA permet aussi de mesurer la taille des gouttes en utilisant un ou deux photorécepteurs supplémentaires. Ils permettent de capter le passage des gouttes à plusieurs endroits du réseau d'interfranges et d'en déduire leur taille, proportionnelle au décalage temporel des signaux captés par les différents photorécepteurs.

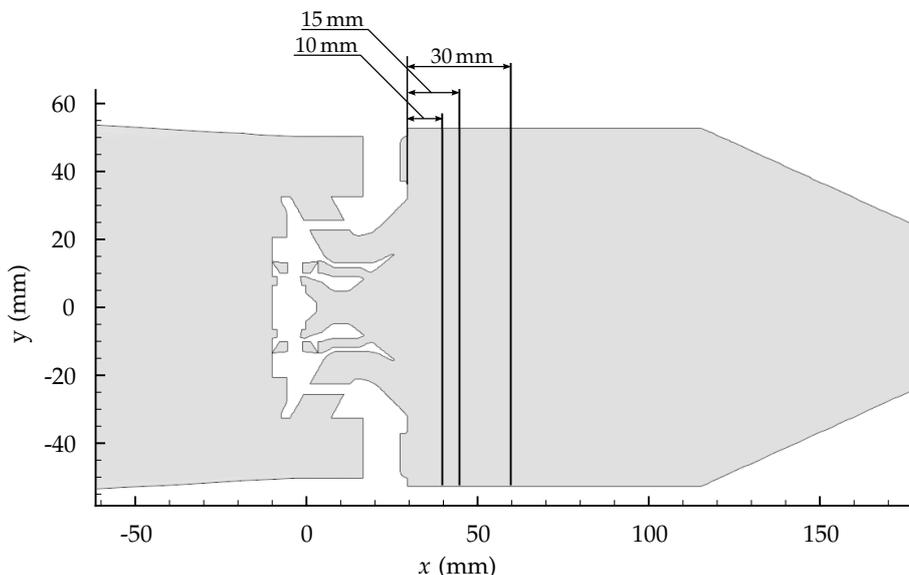


FIG. 5.10 | Position des profils transversaux des mesures granulométriques.

5.2 DÉFINITION DU DOMAINE DE CALCUL

Le domaine de calcul utilisé pour les simulations de cette étude est basé sur l'enveloppe interne réelle de la chambre, à laquelle on apporte des simplifications, détaillées dans la section suivante. On présente ensuite le maillage réalisé pour la discrétisation spatiale de ce domaine.

5.2.1 Simplification de la géométrie

Pour pouvoir mailler suffisamment la zone de flamme et les vrilles de l'injecteur tout en gardant un coût de calcul limité, puisqu'il faut tenir compte du fait que le temps de calcul sera fortement accru lors du couplage avec le rayonnement, on choisit de simplifier le domaine de calcul.

Circuits de refroidissement

La simplification la plus importante concerne le circuit de refroidissement. La chambre possède en effet un ensemble de circuits de géométrie complexe permettant de prélever une partie du débit d'air dans le plenum pour le réinjecter à deux endroits dans la chambre :

- En fond de chambre, sous la forme d'une colerette de rayon proche de celui du bol externe de l'injecteur, qui injecte de l'air radialement pour protéger le fond de chambre.
- Le long des parois de la chambre, sous la forme d'un film qui sert notamment à refroidir les hublots de mesure optique. L'air prélevé dans le plenum passe d'abord par une plaque multipercée qui constitue le fond du plenum, puis est collecté sur les bords de cette plaque pour être injecté dans la chambre.

Tous ces dispositifs comportent des canaux de très petite taille qui augmentent considérablement le nombre de mailles nécessaires pour reproduire la perte de charge qu'ils induisent et la répartition des débits d'air. C'est pourquoi on choisit de les remplacer par deux entrées débitantes dans la chambre (film et colerette), mises en évidence sur la figure 5.11, dont la répartition de débit a été quantifiée expérimentalement. Lavedrine [165] et Jaegle [169] ont opté pour la même simplification de la colerette, mais ils ont utilisé une géométrie de substitution pour modéliser la paroi multipercée. Ce type de modélisation n'est pas simple à mettre en œuvre et a été étudié en détails par Jaegle [169]. Il nécessite en particulier l'utilisation de modèle de paroi avec un ajustement du coefficient de décharge. Ce niveau de détail sort du cadre de cette étude.

Autres modifications géométriques

Les autres modifications ou simplifications considérées sont listées ci-dessous :

- Le bras d'injection du kérosène que l'on visualise sur la figure 5.5 n'a pas été modélisé puisque le kérosène est injecté sous la forme de sprays directement en sortie des injecteurs. On néglige l'effet qu'il peut avoir sur l'écoulement.
- Comme détaillé par Lavedrine [165], les chanfreins dans les passages de vrilles ainsi que des détails technologiques sur l'étage interne de vrilles axiales ont été supprimés afin d'éviter la formation de mailles trop petites. Leur effet sur l'écoulement peut être considéré comme négligeable.
- Le col situé en sortie de chambre a un diamètre estimé par les expérimentateurs à partir de corrélations. Sa section n'est pas connue avec exactitude car elle est variable au cours d'un essai de manière à imposer dans la chambre la pression

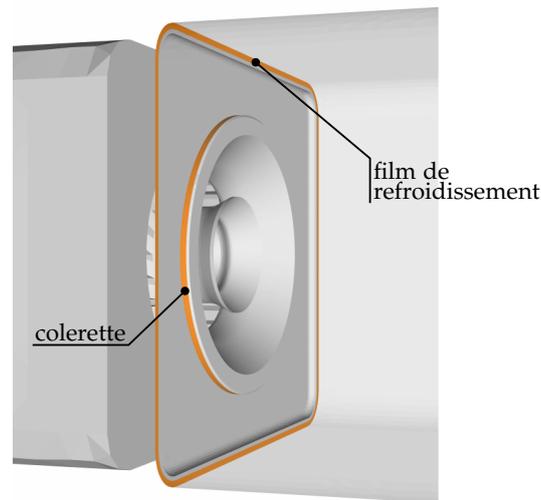


FIG. 5.11 | Visualisation des surfaces débitantes utilisées pour simplifier les circuits de refroidissement film et colerette.

théorique du point de fonctionnement. Il y a donc une incertitude sur la valeur du diamètre du col, ce qui peut avoir une influence non négligeable dans le calcul sur la pression dans la chambre.

La géométrie résultant de ces simplifications est présentée avec le maillage dans la section suivante.

5.2.2 Maillage

Le maillage du domaine de calcul a été réalisé uniquement avec des tétraèdres, à l'aide du logiciel CENTAUR™. Une vue globale du maillage est présentée sur la figure 5.12. Ses principales caractéristiques sont les suivantes :

- maillage non structuré ;
- $\simeq 4,1 \cdot 10^6$ tétraèdres ;
- $\simeq 8,2 \cdot 10^6$ faces ;
- $\simeq 2 \cdot 10^5$ faces frontières ;
- $\simeq 7,5 \cdot 10^5$ nœuds ;

Le maillage de la chambre et de l'injecteur est présenté sur la figure 5.13. Le maillage surfacique a été construit et affiné localement de manière à discrétiser correctement les surfaces courbes, notamment en sortie des deux étages de vrilles axiales (voir figure 5.13b). Le col de sortie de la chambre a également été discrétisé finement afin de bien représenter sa section. Dans la zone de flamme et dans la zone de recirculation située en aval, une taille caractéristique de maille de 0,7 mm est prescrite, ce qui constitue une taille maximale pour reproduire avec précision l'écoulement moyen. Les calculs réalisés dans cette étude n'ont pas pour but premier de prévoir précisément les grandeurs fluctuantes, puisqu'il n'y a pas de mesures correspondantes pour valider les prévisions numériques. Si c'était le cas, le maillage devrait être plus fin. Les figures 5.13b et 5.14 détaillent la discrétisation dans les étages de vrilles axiales et radiales. La discrétisation manque de finesse pour décrire correctement les couches limites dans ces canaux, ce qui est compensé par l'utilisation d'un modèle aux parois (voir section 5.3.4). On verra dans la suite (chapitre 7) que la finesse du maillage est limitée dans cette étude à la fois par le coût du calcul et par l'occupation mémoire des codes de calcul utilisés, pour une machine donnée. En l'occurrence, le calculateur STELVIO de l'ONERA qui a été utilisé ici est doté de cœurs Intel Westmere cadencés à 3,06 GHz disposant chacun de 3,5 Go de

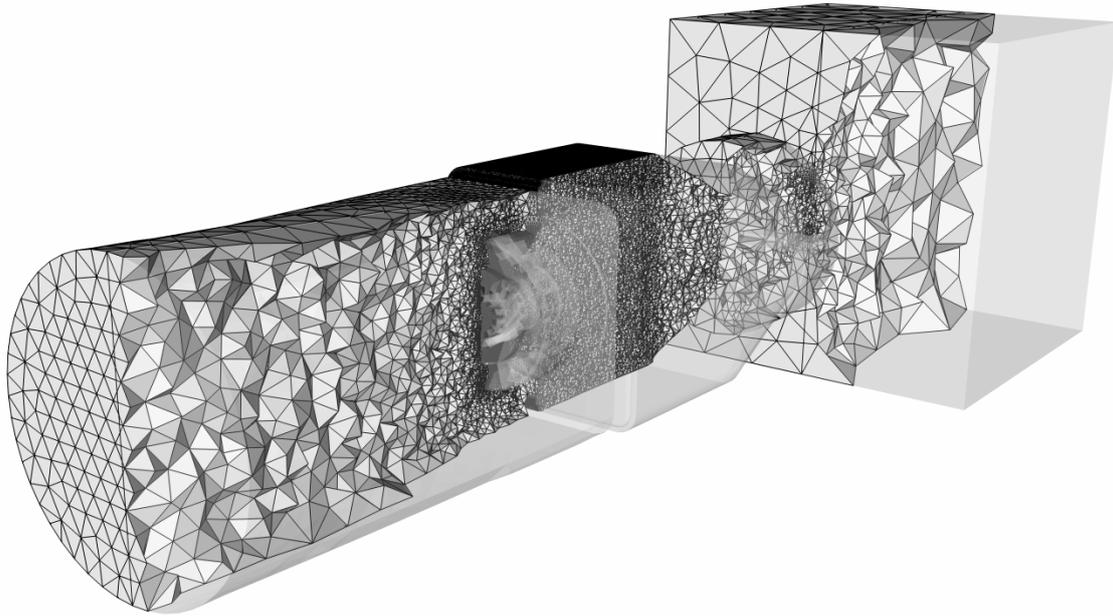


FIG. 5.12 | Visualisation du maillage entier du domaine de calcul. Maillage surfacique et coupe du maillage volumique.

mémoire disponible pour le calcul, ce qui n'est pas le cas d'autres machines ^(b).

5.3 CONDITIONS AUX LIMITES

Après avoir choisi un point de fonctionnement dans la section 5.3.1, on détermine les conditions aux limites du calcul en distinguant les conditions d'injection de la phase liquide, spécifique au formalisme lagrangien utilisé dans ces calculs, les conditions d'injection de la phase gazeuse (l'air frais), et les conditions appliquées sur les parois, pour chacune des phases.

5.3.1 Choix du point de fonctionnement

La simulation de l'écoulement dans la chambre TLC doit servir à tester les capacités de la modélisation à reproduire les conditions aérothermiques et les niveaux de suie dans la chambre. Le choix du point de fonctionnement repose donc sur le nombre et la qualité des mesures expérimentales disponibles.

Le tableau 5.2 donne la disponibilité des mesures pour les différents diagnostics expérimentaux mis en œuvre (voir aussi section 5.1.3) pour chaque point de fonctionnement. On constate que le régime le plus documenté expérimentalement est "l'approche". Pouvoir disposer en particulier d'un nombre maximal de profils de température dans la chambre permet de valider correctement les champs de température obtenus par la simulation. En outre, pour l'étude de l'effet des suies sur les transferts radiatifs, il est nécessaire d'avoir un niveau de suie suffisant. C'est en régime taxi que la quantité de suie est en théorie la plus forte, mais les mesures pour ce régime ont été rendues inexploitable en raison de l'accumulation d'une grande quantité de suie sur les hublots. Parmi les autres points de fonctionnement, le régime d'approche présente la plus forte concentration en suie mesurée, même si celle-ci reste très faible et l'effet des suies sur les transferts radiatifs risque d'être négligeable. D'autre part le régime d'approche est le

(b). L'IBM Blue Gene/P BABEL de l'IDRIS par exemple ne dispose que de 500 Mo par cœur.

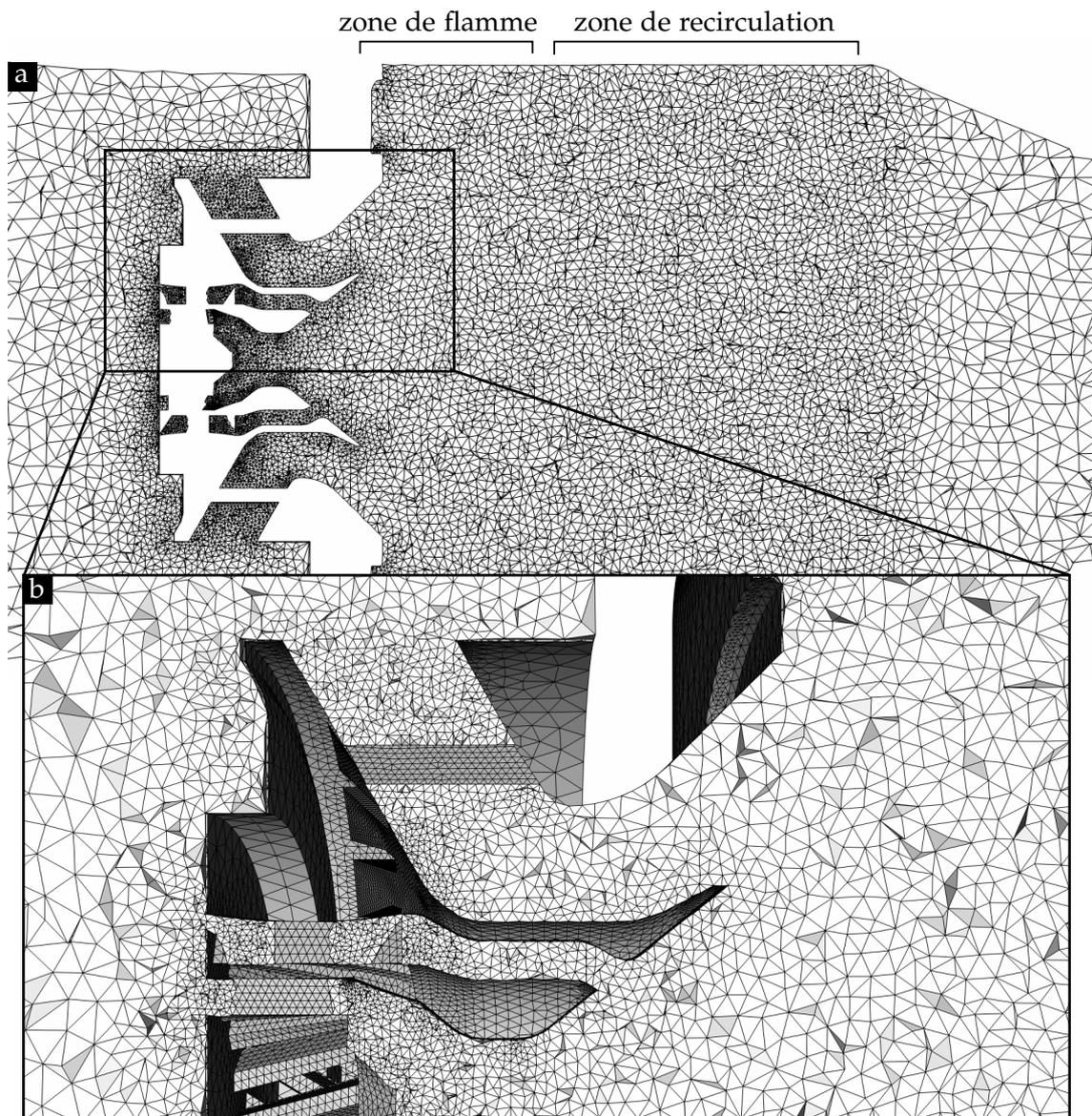


FIG. 5.13 | Coupes médianes du maillage de la chambre et de l'injecteur : (a) maillage de la chambre, (b) zoom sur les vrilles de l'injecteur.

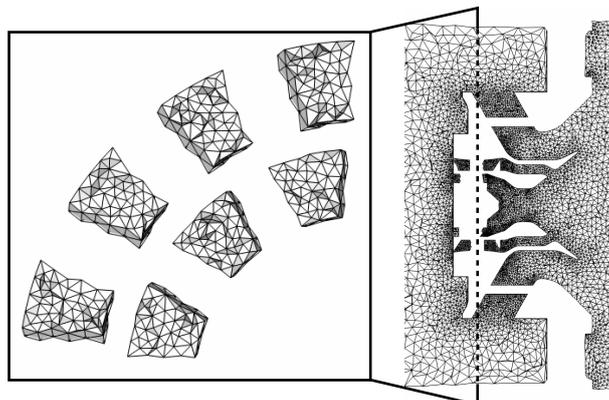


FIG. 5.14 | Coupe transverse du maillage dans les deux étages de vrilles axiales (quart de cercle).

Régime	Nombre de profils de T	Mesures de suies exploitables	PLIF-OH et kérosène	
			sur plan médian	sur plans transversaux
taxi	4	non	oui	non
approche	4	oui	oui	oui
montée	1	oui	oui	non
croisière	1	oui	oui	non

TAB. 5.2 | Différentes mesures expérimentales disponibles selon les régimes de fonctionnement de la chambre TLC.

seul à fournir des champs de concentration du radical OH et de kérosène sur des plans transversaux, qu'il peut être intéressant de comparer avec les résultats de calcul.

Pour la production des NO_x , le régime critique est le régime de montée, pour lequel les niveaux de température sont les plus élevés. De plus, la combustion dans ce régime est totale, alors qu'elle est seulement partielle en approche. Le régime de montée constitue par conséquent une bonne alternative au régime d'approche, même si un seul profil de température a été mesuré.

Dans cette étude, on choisit donc de simuler le régime d'approche, qui se prête le mieux à des comparaisons numérique-expérience. Dans une moindre mesure, on s'intéressera également au régime de montée, dans le but d'évaluer l'effet de la modélisation sur les résultats obtenus.

5.3.2 Injection de la phase liquide

Le kérosène est injecté sous forme liquide via les deux systèmes d'injection. On cherche dans cette section à déterminer les grandeurs permettant d'établir les conditions aux limites pour le solveur diphasique lagrangien SPARTE de la chaîne CEDRE, utilisé pour cette étude. Les raisonnements établis pour cela sont appliqués dans un premier temps au régime d'approche. Le tableau 5.5 récapitule en fin de section les valeurs numériques de ces conditions aux limites pour la phase dispersée pour les régimes d'approche et de montée.

5.3.2.1 Température d'entrée du kérosène

Avant son arrivée dans la chambre, le kérosène traverse le bras d'injection situé dans le plenum, rempli par l'écoulement d'air. Initialement injecté à 300 K, le kérosène va se réchauffer au contact du bras d'injection. Dans la simulation le kérosène est injecté directement dans la chambre en sortie des injecteurs ; on cherche par conséquent à évaluer approximativement sa température à l'arrivée dans la chambre. Pour cela, on fait les hypothèses suivantes :

- le bras est à la température de l'air frais $T_p = T_{GF}$;
- les parois des conduites sont lisses.

Pour chaque système d'injection, le kérosène traverse successivement deux conduites de sections circulaires, l'une située dans le bras d'injection et l'autre faisant la liaison entre le bras et l'injecteur (voir figure 5.5). Les caractéristiques de ces conduites sont données dans le tableau 5.3.

Pour déterminer la température du kérosène à la sortie des tubes 2 de chaque injecteur, on fait le raisonnement suivant, en menant le bilan d'énergie sur une tranche

	injecteur multipoint		injecteur pilote	
	tube 1	tube 2	tube 1	tube 2
Longueur (m)	$56,6 \cdot 10^{-3}$	$36 \cdot 10^{-3}$	$75 \cdot 10^{-3}$	$51 \cdot 10^{-3}$
Diamètre (m)	$3 \cdot 10^{-3}$	$1,75 \cdot 10^{-3}$	$3,5 \cdot 10^{-3}$	$3,51 \cdot 10^{-3}$

TAB. 5.3 | Caractéristiques des tubes d'injection de kérosène

de conduite de longueur dx :

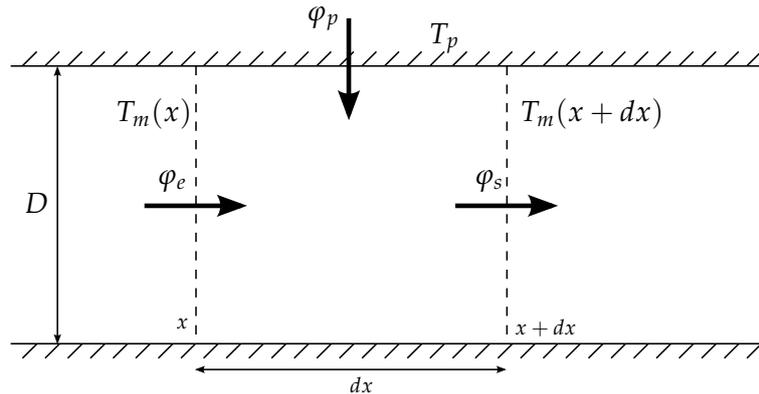


FIG. 5.15 | Schéma du bilan d'énergie dans une tranche de conduite.

Les flux mis en jeu s'expriment :

$$\varphi_e = \dot{m}c_p T_m(x), \quad (5.1)$$

$$\varphi_s = \dot{m}c_p T_m(x+dx), \quad (5.2)$$

$$\varphi_p = h(T_p - T_m)\pi D dx. \quad (5.3)$$

Le bilan donne l'équation suivante :

$$\dot{m}c_p dT_m = h(T_p - T_m)\pi D dx. \quad (5.4)$$

En posant $T_m^+ = T_m - T_p$ et en intégrant l'équation (5.4) sur l'intervalle $x \in [0; L]$ on obtient la solution :

$$T_m^+(L) = T_m^+(0) \exp\left(\frac{-h\pi DL}{\dot{m}c_p}\right) \quad (5.5)$$

Il reste à déterminer le coefficient d'échange moyen h sur la longueur L de chaque conduite. Pour cela, on évalue le nombre de Nusselt $Nu = hD/\lambda$ à l'aide d'une corrélation adéquate. On commence par évaluer le nombre de Reynolds $Re = 4\dot{m}/\pi D\mu$ dans la conduite. Celui-ci varie entre 3200 et 7400 pour les quatre conduites considérées et un débit de $6,434 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ dans chacune des conduites (en régime d'approche). Pour ce régime turbulent ou en cours de transition, on utilise la corrélation de Gnielinski [170] :

$$Nu = \frac{(f/8)(Re - 1000) Pr}{1 + 12,7(f/8)^{1/2}(Pr^{2/3} - 1)}, \quad (5.6)$$

où f est le facteur de friction. Cette corrélation est valable pour

$$\begin{aligned} 0,5 &\lesssim Pr \lesssim 2000 \\ 3000 &\lesssim Re \lesssim 5 \cdot 10^6 \\ 60 &\lesssim L/D \end{aligned}$$

Le Prandtl vaut 12,1 à 300 K avec une conductivité approchée $\lambda(T) \simeq 0,15 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. On peut donc utiliser cette corrélation valable en régime établi. Le facteur de friction f peut être évalué par la corrélation de Petukhov [170] valable pour la même gamme de Reynolds que la corrélation de Gnielinski :

$$f = (0,79 \ln \text{Re} - 1,64)^{-2}. \quad (5.7)$$

On applique ensuite une correction au Nusselt valable pour $2 \leq L/D \leq 20$ [56], c'est-à-dire lorsque les profils de vitesse et de température ne sont pas tout à fait établis. C'est le cas dans cette étude puisque pour les conduites considérées, $L/D \in [14,5; 21,4]$:

$$\text{Nu}_L = \text{Nu} \left[1 + \left(\frac{D}{L} \right)^{0,7} \right], \quad (5.8)$$

où Nu est le Nusselt déterminé en régime établi par l'équation (5.6), et Nu_L le Nusselt moyen sur la longueur L du tube. Les propriétés du kérosène doivent être déterminées à la température moyenne :

$$\bar{T} = \frac{T_{m,e} + T_{m,s}}{2}, \quad (5.9)$$

où $T_{m,e}$ et $T_{m,s}$ sont les températures de mélange respectivement à l'entrée et à la sortie du tube. Cela nécessite d'estimer *a priori* la température de sortie. Pour assurer la cohérence du calcul, il est nécessaire d'itérer le calcul de la température de sortie de chaque conduite jusqu'à ce que la valeur utilisée pour le calcul des propriétés du kérosène soit identique à celle obtenue par le bilan d'énergie.

Finalement, les températures obtenues respectivement pour le multipoint et le pilote sont synthétisées dans le tableau 5.5.

5.3.2.2 Caractéristiques de l'injection pilote

L'injecteur pilote est un injecteur pressurisé produisant un spray de la forme d'un cône creux de révolution. Il est dérivé des injecteurs de type *simplex*, un type d'injecteur très simple qui crée des sprays pleins ou creux en imprimant au carburant un mouvement fortement swirlé (Lefebvre [171]). La nappe de liquide créée en sortie d'injecteur est très vite déstabilisée pour se diviser en fines gouttelettes. Cette atomisation, qualifiée de *primaire*, est très rapide.

La simulation de l'atomisation primaire nécessite l'utilisation de techniques numériques développées récemment et coûteuses (voir par exemple Desjardins *et al.* [172]), ainsi que la connaissance précise des caractéristiques du dard liquide en sortie de l'injecteur. Or l'injecteur pilote du prototype TLC n'est pas standard et ses caractéristiques internes n'ont pas été fournies par le constructeur, ce qui empêche la détermination des caractéristiques du dard liquide. De plus on ne dispose pas encore des outils permettant cette modélisation, qui sont en cours de développement. Pour ces raisons, on préfère s'attacher à la modélisation de l'injection liquide sous la forme d'un spray de gouttes (phase dispersée).

Lavedrine [165] a construit dans sa thèse un modèle d'injection pour TLC en se basant sur l'hypothèse d'un injecteur de type *simplex*, même si l'observation du dispositif expérimental révèle la présence d'un divergent dans l'injecteur, ce qui n'est pas le cas d'un injecteur *simplex*, et dont l'effet sur le spray liquide est inconnu. Son modèle a ensuite été repris et développé pour les approches diphasiques Euler et Lagrange dans les thèses de Sanjosé [173] et Senoner [174]. Ce modèle appelé FIM-UR (*Fuel Injection Method by Upstream Reconstruction*) a été appliqué à un injecteur de type *simplex* plus

standard et mieux caractérisé que celui de TLC. On reprend dans cette étude les données injecteur estimées par Lavedrine [165], à savoir le demi-angle de spray de 30° (donnée confirmée par le constructeur) et un diamètre de sortie estimé à $0,5\text{ mm}$. On utilise cependant une approche différente du modèle FIM-UR, exposée dans le paragraphe suivant.

Vitesse d'injection des gouttes

Le traitement de la phase liquide comme une phase dispersée nécessite la spécification de la vitesse des gouttes en chaque point d'injection représentant une entrée de carburant dans la chambre. On cherche ici à caractériser le vecteur vitesse en ces points, pour l'injecteur pilote.

D'après les connaissances théoriques disponibles sur les injecteurs de type *simplex*, l'écoulement liquide a un mouvement de rotation solide dans le tube de l'injecteur [173] (la composante de vitesse radiale est donc nulle). En sortie d'injecteur, si l'on suppose que l'écoulement gazeux a un effet négligeable sur la dynamique de la goutte dans les directions transversales à l'injecteur, les gouttes adoptent une trajectoire balistique dans le plan transversal, le long de laquelle la composante tangentielle de la vitesse est convertie en composante radiale, ce qui mène à la formation d'un spray conique dont l'angle au sommet est une caractéristique importante de l'injecteur. Néanmoins, plusieurs facteurs peuvent influencer ce comportement :

- Le raisonnement précédent ne tient pas compte du fait qu'en sortie d'injecteur le liquide est sous la forme d'une nappe plutôt que d'un nuage de gouttes. Son comportement peut donc être différent.
- L'interaction des gouttes avec le gaz peut être importante dans le plan transversal, en raison du différentiel de vitesse important en sortie d'injecteur. La taille des gouttes peut dans ce cas influencer l'angle caractéristique du spray.
- Des incertitudes existent sur les caractéristiques géométriques internes de l'injecteur.

Pour ces raisons, on préfère dans cette étude imposer l'angle du spray à l'injection en imposant aux gouttes une composante radiale de vitesse non nulle et une composante tangentielle nulle. Cela revient à donner aux gouttes la vitesse qu'elles sont censées avoir en aval de l'injecteur, après conversion de leur vitesse tangentielle en vitesse radiale, lorsque leur interaction avec le gaz est supposée négligeable.

On calcule ainsi la composante axiale de la vitesse V_c du liquide en sortie d'injecteur en fonction du débit de carburant \dot{m}_c , de sa masse volumique ρ_c et du diamètre débouchant d_i :

$$V_c = \frac{4\dot{m}_c}{\rho_c \pi d_i^2} \quad (5.10)$$

Les composantes axiale $u_{c,x}$ et radiale $u_{c,r}$ de la vitesse des gouttes issues de l'atomisation du jet liquide sont ensuite calculées :

$$u_{c,x} = V_c \quad (5.11)$$

$$u_{c,r} = V_c \tan \theta \quad (5.12)$$

Les points d'injection se situent sur le nez de l'injecteur et forment un anneau de diamètre d_i . Le nombre de points d'injection a été fixé à 100, de manière à conserver un coût de calcul raisonnable. Avec un pas de temps de $5 \cdot 10^{-7}$ s pour la LES et l'injection d'une goutte par injecteur à chaque pas de temps, une goutte numérique représente alors une trentaine de gouttes physiques, ce qui paraît raisonnable. En outre, une injection pilote à 200 injecteurs numériques a fourni des résultats identiques. La figure 5.16 situe

les injecteurs numériques sur le nez du pilote, ainsi que les vecteurs vitesse d'injection des gouttes numériques.

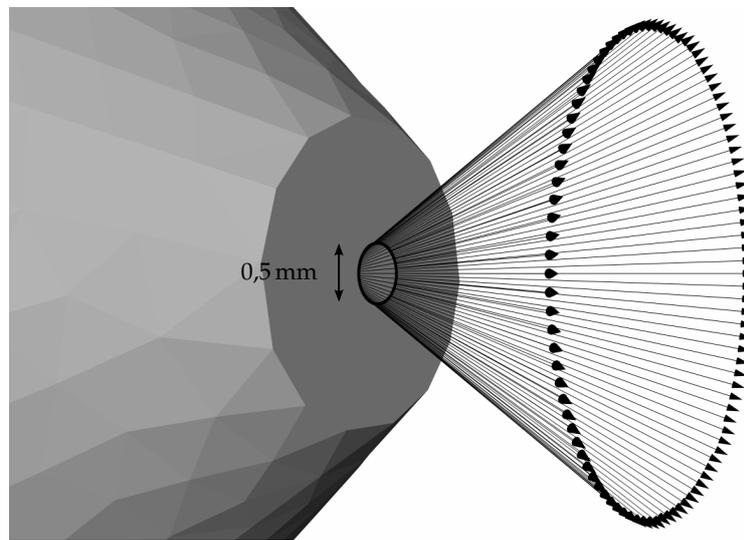


FIG. 5.16 | Visualisation des points d'injection numériques sur le nez du pilote et des vecteurs vitesse associés.

Diamètre d'injection des gouttes

La phase dispersée du dispositif TLC a été caractérisée expérimentalement à haute pression et à froid (pas d'allumage de la chambre) sur le banc expérimental LACOM du centre ONERA au Fauga-Mauzac. La méthode de mesure PDA (Particle Doppler Anemometry) a été mise en œuvre pour mesurer la vitesse et la taille des gouttes issues des injecteurs pilote et multipoint de TLC. Pour mesurer la vitesse des gouttes, on analyse le faisceau réfléchi par les gouttes lors de leur traversée du volume de mesure constitué par le croisement de deux faisceaux laser monochromatiques identiques qui créent un réseau d'interfranges. Le faisceau réfléchi contient une fréquence directement proportionnelle à la vitesse des gouttes. La mesure de la taille des gouttes est réalisée par l'analyse des faisceaux réfléchis produits par deux traversées successives de la même goutte à travers le réseau d'interfranges.

Le tableau 5.4 récapitule les mesures faites à deux niveaux de pression, sur des profils transversaux dans la chambre schématisés sur la figure 5.10. Il s'agit de déterminer à

	Pression (bar)	Débit ($\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$)	Diamètre de Sauter (μm) mesuré en x_m		
			$x_m = 10$	$x_m = 15$	$x_m = 30 \text{ mm}$
Injecteur pilote	4,3	$5 \cdot 10^{-3}$	26	25	22
	12,7	$2 \cdot 10^{-3}$		10	8
Injecteur multipoint	4,4	$10 \cdot 10^{-3}$	35	32	
	13,5	$33 \cdot 10^{-3}$		18 – 26	

TAB. 5.4 | Mesures de granulométrie sur l'injecteur TLC (air injecté à $T^* \simeq 0,17$)

partir de ces mesures la taille des gouttes au plus près de l'injecteur, dans les conditions du régime d'approche, soit à une pression de 9,5 bar et avec un débit de kérosène de $6,434 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$. On peut estimer un diamètre de goutte à l'injection d_g d'environ $15 \mu\text{m}$.

5.3.2.3 Caractéristiques de l'injection multipoint

L'injection multipoint est plus simple à modéliser puisque le système physique utilisé est moins complexe. Le carburant est injecté dans la chambre par 24 orifices circulaires de 0,5 mm de diamètre.

Caractéristiques physiques (vitesse et diamètre des gouttes)

On détermine la vitesse des gouttes avec la formule (5.10) adaptée à cette configuration, avec \dot{m}_c le débit de carburant à travers un orifice, et d_i son diamètre. Le vecteur vitesse est supposé normal à la surface débitante.

Pour estimer le diamètre des gouttes à injecter, on se base sur les mesures de granulométrie réalisées comme pour l'injection pilote par PDA. Les mesures obtenues sont récapitulées dans le tableau 5.4. Par ailleurs, Jaegle [169] a simulé l'écoulement non-réactif pressurisé à 4 bar pour comparer les caractéristiques de la phase dispersée obtenue aux mesures aux mêmes endroits dans la chambre. Il observe qu'un diamètre d'injection de 30 μm induit en aval une sous-estimation des diamètres de Sauter^(c) D_{32} expérimentaux, tandis que les diamètres moyens^(c) D_{10} sont surestimés. Il en conclut que la corrélation sur laquelle est basée la distribution en taille des gouttes injectées pourrait être inadaptée dans ce cas, les gouttes se fragmentant dans la couche limite de l'écoulement plutôt qu'en son centre. La situation est différente dans la modélisation adoptée dans cette étude, où les gouttes sont injectées avec une distribution monodisperse, mais un modèle de fragmentation secondaire est utilisé, contrairement à Jaegle [169]. En s'appuyant sur le diamètre de 30 μm utilisé par Jaegle [169] à 4 bar, et sur les quelques mesures de granulométrie réalisées à 4 et 13 bar, on peut estimer un diamètre des gouttes à l'injection d_g de 25 μm à 9,5 bar pour le régime d'approche.

Notons que Jaegle [169] a étudié dans sa thèse en détails la modélisation de l'injection du spray multipoint. Il propose une modélisation pour le jet de liquide débouchant dans un écoulement transverse permettant de reproduire la fragmentation primaire de ce jet. Deux phénomènes identifiés expérimentalement la caractérisent : la fragmentation de la colonne liquide et la fragmentation en surface de cette colonne. Le modèle développé permet de représenter ces deux phénomènes dans le contexte de la simulation d'une phase dispersée, c'est-à-dire en injectant le carburant sous la forme de gouttes dès la sortie de l'injecteur. Le modèle n'a pas été utilisé dans la présente étude, mais semble tout à fait abordable pour une utilisation future, en termes de faisabilité dans le code SPARTE et de coût de calcul.

Caractéristiques numériques de l'injection

L'approche lagrangienne mise en œuvre par l'intermédiaire du solveur SPARTE peut fonctionner avec deux types de conditions aux limites :

- les injecteurs numériques, caractérisés par un point quelconque du volume de calcul, et un vecteur vitesse associé ;
- les surfaces débitantes, qui correspondent à un ensemble de faces frontières. Sur chaque face concernée, un ou plusieurs points d'injection sont placés aléatoirement sur la face (ou au centre dans le cas d'un seul point d'injection). La vitesse peut être imposée normale à la paroi.

Le type *surface débitante* est choisi pour l'injection multipoint, car il présente l'avantage d'une utilisation beaucoup plus simple sur des surfaces complexes par rapport à

(c). Voir définition en section 1.5.7 du chapitre 1

l'autre type. En effet, pour une surface débitante, les injecteurs sont placés et répartis automatiquement lors de l'exécution de SPARTE et la direction des vecteurs vitesse normaux est calculée par le code. Un point délicat réside dans la construction du maillage des orifices, dont le diamètre est très faible (0,5 mm). Comme on utilise un schéma implicite pour l'intégration temporelle (voir section 1.6.2), la présence de mailles de très petite taille dans le maillage n'est pas excessivement pénalisante sur le pas de temps utilisé, comme c'est le cas en explicite. On choisit cependant d'imposer un faible nombre de faces pour chaque orifice, en l'occurrence 8, comme le montre la figure 5.17. Ce nombre conditionne le nombre minimum de gouttes injectées à chaque itération, soit $8 \times 24 = 192$ gouttes pour l'injecteur multipoint. L'occupation mémoire, proportionnelle dans SPARTE au nombre maximal de gouttes par domaine, sera en effet critique lors du couplage avec le rayonnement (voir chapitre 7). On préfère donc disposer d'un nombre minimal de gouttes injectées relativement faible, tout en gardant la possibilité d'en rajouter, en augmentant le nombre de gouttes injectées par face. Sur la figure 5.17, on peut donc remarquer que le contour réel de l'orifice (en blanc) est discrétisé grossièrement. Cela n'est pas gênant à condition d'imposer un débit massique (en $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$) et non surfacique.

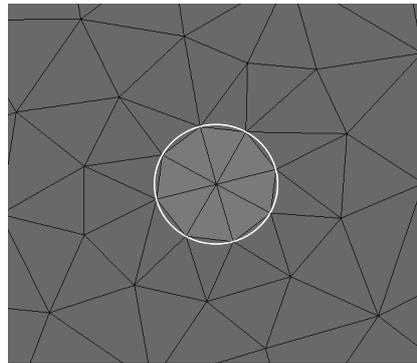


FIG. 5.17 | Visualisation du maillage retenu pour un orifice de l'injection multipoint.

Le poids numérique P_n induit par les 192 injecteurs, qui représente le nombre de gouttes physiques représentées par une goutte numérique, est d'environ 3 pour un pas de temps de $5 \cdot 10^{-7}$ s, dans le cas du régime d'approche. Cette valeur est tout à fait correcte pour la représentation numérique du spray de gouttes.

5.3.2.4 Synthèse des conditions limites retenues pour les régimes d'approche et de montée

Le tableau 5.5 récapitule les caractéristiques numériques des gouttes de carburant injectées dans la chambre, pour une température d'entrée du kérosène de 300 K et une température de paroi du circuit d'injection supposée égale à la température de l'air frais (voir le tableau 5.6 dans la section suivante). La démarche utilisée pour déterminer ces valeurs est celle exposée dans les sections précédentes, et appliquée aux conditions spécifiques des régimes d'approche et de montée. Pour le régime de montée, on a néanmoins conservé les diamètres déterminés pour le régime d'approche, même si la pression dans la chambre est d'environ 19,5 bar en montée, contre 9,5 bar pour le régime d'approche. On estime en effet que l'écoulement d'air à travers l'injecteur étant plus rapide, la fragmentation des gouttes devrait être plus forte et la décroissance de la taille des gouttes avec la pression devrait donc être implicitement prise en compte.

		approche		montée	
		pilote	multipoint	pilote	multipoint
d_i	(mm)	0,5	0,5	0,5	0,5
θ		30°		30°	
\dot{m}_c	(kg · s ⁻¹)	6,434 · 10 ⁻³	6,434 · 10 ⁻³	5,3795 · 10 ⁻³	3,0484 · 10 ⁻²
T_c	(K)	338	343	358	360
$\rho_c(T_c)$	(kg · m ⁻³)	753	749	738	737
V_c	(m · s ⁻¹)	43,5	1,82	37,1	8,8
d_g	(µm)	15	25	15	25
P_n		24,2	2,7	20,6	13,2

TAB. 5.5 | Caractéristiques d'injection liquide pour les régimes d'approche et de montée

5.3.3 Injection de la phase gazeuse

Pour les deux régimes retenus pour cette étude, le tableau 5.6 donne les principales caractéristiques qui servent à établir les conditions aux limites pour l'air frais, ainsi que les grandeurs globales de richesse et de puissance théorique qui servent à la distinction des deux régimes. La puissance théorique est calculée avec un PCI (Pouvoir Calorifique Inférieur) du kérosène de 43 100 kJ · kg⁻¹.

		régime moteur	
		approche	montée
Débit d'air total	(kg · s ⁻¹)	0,717	1,295
T^* air frais		0,211	0,260
Pression chambre	(Pa)	9,5 · 10 ⁵	19,5 · 10 ⁵
Richesse globale ϕ_g		0,264	0,408
Puissance théorique	(MW)	0,56	1,55

TAB. 5.6 | Conditions globales dans le foyer TLC pour les deux régimes retenus.

La répartition des débits d'air frais entre le film de refroidissement, la colerette et l'injecteur TLC a été mesurée à la pression atmosphérique et restituée dans le tableau 5.7. On reprend dans cette étude cette répartition, indifféremment pour les 2 régimes, en

	Répartition mesurée	Grandeur imposée
Injecteur	70 %	Vitesse
Film de refroidissement	25 %	Débit
Colerette	5 %	Débit

TAB. 5.7 | Répartition des débits d'air (approximative, pour des raisons de confidentialité) et types de conditions d'entrée dans la chambre TLC.

supposant que sa sensibilité à la pression est faible. Il y a également une incertitude sur la prise en compte de fuites de l'ordre de 3,5 % du débit d'air total, qui sont ici attribuées au film de refroidissement mais pourraient l'être en partie à la colerette. Le tableau 5.7 donne également le type de grandeur imposée dans le calcul. Le fait d'imposer la vitesse en entrée du plenum permet au besoin d'utiliser une condition de non-réflexion

pour évacuer les ondes de pression produites pendant le transitoire d'allumage de la chambre.

Pour l'approche RANS, on doit choisir des valeurs d'entrée pour les grandeurs turbulentes k et L du modèle de turbulence $k-L$ utilisé. k est déterminé en fixant un taux de turbulence u'/u à 5% avec la relation suivante :

$$k = \frac{3}{2}u'^2, \quad (5.13)$$

où u' représente les fluctuations de vitesse aux grandes échelles de l'écoulement, et u la vitesse moyenne à ces mêmes échelles, évaluée en fonction du débit d'air injecté en entrée. La longueur L est déterminée en prenant une longueur caractéristique de la section d'entrée.

Enfin, la sortie du domaine de calcul, située en frontière du cube représentant l'atmosphère (voir figure 5.12), est une condition de pression imposée $P = 1 \text{ atm}$.

5.3.4 Conditions aux parois

On impose une condition d'adhérence sur toutes les parois du domaine de calcul. Pour éviter de mailler la couche limite jusqu'à la sous-couche visqueuse, on utilise un modèle de paroi basé sur le nombre de Reynolds local de maille, qui modélise l'effet des phénomènes de la zone interne (visqueuse et logarithmique) d'une couche limite attachée sur le frottement pariétal et le flux de chaleur en paroi. Plus de détails sont donnés dans [45, 46].

Les parois du domaine sont choisies adiabatiques, sauf pour les parois latérales de la partie chambre de combustion sur lesquelles on impose une température $T^* = 0,25$ que l'on estime réaliste. L'hypothèse de parois adiabatiques induit en effet une température de paroi $T^* = 0,43$, qui est trop élevée pour être dans le domaine estimé de tenue thermique du matériau. En réalité, un système de refroidissement à eau permet de refroidir ces parois, hormis les hublots qui ne sont refroidis que par le film d'air. La distinction n'est pas faite dans la simulation.

Pour traiter l'impact des gouttes de kérosène sur les parois latérales de la chambre, on impose une condition d'interaction complexe à température imposée, utilisant le modèle ONERA décrit en section 1.5.6. Sur les parois constituant l'injecteur, on préfère utiliser un modèle de rebond associé à une direction de rebond quasi-parallèle à la paroi afin de représenter d'une manière simple et robuste la formation d'un film liquide sur la paroi. Le comportement des gouttes est ainsi mieux maîtrisé qu'avec une condition d'interaction complexe.

5.4 CHOIX DES MODÈLES POUR LA SIMULATION NUMÉRIQUE

Les calculs de cette étude ont été réalisés avec les solveurs de la chaîne CEDRE : CHARME pour la phase gazeuse turbulente réactive en approche eulérienne, et SPARTE pour la phase dispersée en approche lagrangienne. Le chapitre 1 introduit les équations résolues par ces deux solveurs. On détaille ci-dessous les modèles utilisés pour représenter numériquement les phénomènes physiques ayant lieu dans la chambre.

5.4.1 Modèles pour la combustion turbulente diphasique

Pour calculer les phénomènes convectifs, diffusifs et réactifs dans la chambre, le solveur CHARME résout les équations filtrées de l'aérothermochimie (1.32)-(1.34) aussi

bien en approche RANS qu'en LES (voir section 1.2.2). Les méthodes numériques permettant cette résolution sur des maillages non-structurés ont été brièvement décrites dans le chapitre 1 (section 1.6). Les calculs ont été réalisés en deux phases successives :

- (i) L'allumage et l'établissement de la flamme sont effectués avec l'approche RANS, qui permet de s'affranchir d'une procédure d'allumage réaliste : les fortes ondes de pression déstabilisatrices générées au cours de l'allumage peuvent être évacuées rapidement et sans divergence du calcul, avec un grand pas de temps.
- (ii) À partir de l'état final de la phase précédente, on poursuit le calcul avec l'approche LES. Après le passage d'une période transitoire, on effectue le nombre d'itérations nécessaire à la convergence des moyennes temporelles des grandeurs du calcul (température, vitesse...)

Pour l'approche RANS, on utilise le modèle de turbulence $k - L$ [24] décrit en section 1.2.2.4. L'interaction combustion-turbulence n'a pas été modélisée car cela n'est pas nécessaire pour obtenir l'allumage de la chambre. Dans cette étape, on cherche simplement à avoir un calcul robuste^(d) qui prédise des niveaux de températures acceptables.

En LES, le modèle de Smagorinsky est utilisé pour modéliser l'action des échelles de sous-maille sur les échelles résolues (voir section 1.2.2.4). Pour modéliser l'interaction combustion-turbulence en régime prémélangé de flammelettes, le modèle TFLES est souvent utilisé, permettant la résolution du front de flamme malgré un maillage LES insuffisamment fin (voir section 1.4.2). Néanmoins, plusieurs raisons font que l'utilisation de ce modèle n'est pas nécessaire, voire déconseillée dans le cadre de notre étude. Il existe en effet des zones de l'écoulement où la combustion a lieu en flamme de diffusion, et des zones de combustion prémélangée où le régime peut être plus proche de la combustion par poches que de type flammelette prémélangée, ce qui rend le modèle partiellement inapplicable. D'autre part, les schémas numériques de CEDRE étant décentrés, le modèle TFLES n'est pas nécessaire à la stabilisation des calculs. Enfin, il détériore la simulation des transferts radiatifs, puisqu'il a pour effet de modifier la topologie du champ de température à proximité de la flamme. Poitou [175] a en effet montré que, dans une flamme laminaire prémélangée, l'erreur faite sur la puissance radiative croît avec l'épaississement de la flamme, et atteint par exemple une valeur de 26 % pour $F = 30$. Or dans le cas de la chambre TLC, l'épaisseur de flamme peut être estimée à $54 \mu\text{m}$, ce qui conduit à un épaississement nécessaire $F = 40$ ou $F = 65$ pour avoir respectivement 3 ou 5 points dans le front de flamme. Ces valeurs sont bien sûr dépendantes du maillage utilisé, dont la finesse est par ailleurs limitée par l'occupation mémoire du code (voir chapitre 7). Pour de tels facteurs d'épaississement, on aurait une erreur assez importante sur la puissance radiative locale. C'est pourquoi il est préférable dans cette étude d'utiliser simplement un modèle cinétique, suffisant pour assurer une bonne stabilité numérique (voir la section suivante). Par ailleurs, le maillage en lui-même épaissit la flamme, mais différemment du modèle TFLES, puisque la dissipation supplémentaire touche aussi la quantité de mouvement, et cet épaississement n'est pas contrôlé par l'utilisateur.

Même s'il est clair que la flamme n'est pas rigoureusement résolue localement, deux raisons nous permettent de dire que les résultats d'un tel calcul restent exploitables :

- (i) La conception de l'injecteur TLC ne permet la stabilisation de la flamme qu'à un seul endroit dans l'écoulement, qui sera détaillé dans le chapitre 6. En conséquence, la mauvaise estimation de la vitesse de flamme due à l'absence d'épaississement

(d). Le code CEDRE étant décentré, le modèle d'interaction combustion-turbulence n'est pas nécessaire à la stabilité du calcul.

n'est pas déterminante pour la bonne reproduction de la topologie de la flamme dans l'écoulement.

- (ii) La production des espèces minoritaires dans la flamme, comme le CO, est mal modélisée et ne peut être analysée, mais on s'intéresse d'abord dans cette étude à la bonne reproduction des conditions thermiques globales dans la chambre. On verra par ailleurs dans le chapitre 7 que le CO joue un rôle minoritaire dans les transferts radiatifs.

Enfin, signalons que, pour simuler les phénomènes diphasiques, les modèles de traînée, chauffage, évaporation et fragmentation secondaire présentés dans le chapitre 1 (section 1.5) ont été utilisés au sein du code lagrangien SPARTE dédié à la modélisation de particules solides ou liquides.

5.4.2 Modèle cinétique PEA pour la combustion du kérosène

Pour la simulation de la combustion kérosène/air dans le foyer TLC, le mécanisme chimique proposé par Franzelli *et al.* [35] a été utilisé, après son adaptation dans CEDRE. C'est un mécanisme de type PEA (*Pre-Exponential Adjusted*), dont le principe est expliqué dans la section 1.3.2.2, qui permet d'améliorer l'évaluation de la vitesse de flamme laminaire pour des richesses $\phi > 1$. On détaille ici brièvement ses principales caractéristiques et les modifications apportées lors de son adaptation à CEDRE. Le lecteur pourra se reporter à l'article de Franzelli *et al.* [35] ainsi qu'au rapport technique [176] issu des travaux de cette thèse et décrivant en détails son adaptation dans CEDRE.

5.4.2.1 Modèles physiques

Modélisation du kérosène par une espèce fictive

Le kérosène est un mélange, liquide dans des conditions standards, d'hydrocarbures dont les chaînes carbonées vont de C_8 à C_{16} . Il est principalement composé de paraffines (entre 70 % et 85 %), de naphènes et d'aromatiques, avec une composition exacte dépendant de son fournisseur. Plus de précisions sur ce combustible sont données dans l'article de synthèse de Blakey *et al.* [177]. Pour la simulation numérique, le kérosène est représenté le plus souvent par une seule espèce, ce qui facilite le traitement de son évaporation et de sa combustion.

Pour se rapprocher de la composition du kérosène, Luche [178] propose de définir une espèce fictive dont les propriétés sont assimilées à celles d'un mélange de trois espèces, appartenant chacune à un type de composé différent (paraffine, naphène, aromatique). Le tableau 5.8 donne la composition de ce mélange et les propriétés de l'espèce fictive. Il faut cependant noter que le traitement de l'espèce fictive est

Composé	Formule	Masse molaire ($\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$)	Fraction massique
Paraffine	$C_{10}H_{22}$	$1,422\,84 \cdot 10^{-1}$	0,767
Aromatique	C_9H_{12}	$1,201\,916 \cdot 10^{-1}$	0,132
Naphène	C_9H_{18}	$1,262\,41 \cdot 10^{-1}$	0,101
Espèce fictive	$C_{9,7396}H_{20,0542}$	$1,371\,95 \cdot 10^{-1}$	1

TAB. 5.8 | Composition de l'espèce fictive retenue pour modéliser le kérosène.

délicat en raison de nombres d'atomes non entiers dans sa formule brute, ce qui peut

poser des problèmes pour la conservation des atomes dans les équations du schéma cinétique. On utilisera par conséquent, à la place, l'espèce $C_{10}H_{20}$ de masse molaire $M_{C_{10}H_{20}} = 1,4 \cdot 10^{-1} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$, tout en conservant les propriétés thermodynamiques (chaleur massique, enthalpie et entropie) de l'espèce fictive de Luche.

Propriétés du mélange

Les coefficients phénoménologiques de l'écoulement, comme la viscosité ou la conductivité, sont évalués comme décrit en section 1.1.2.3. La seule différence avec les lois utilisées par Franzelli *et al.* [35] réside dans le calcul de la viscosité dynamique. La loi de Sutherland (1.20) a été utilisée ici, tandis que Franzelli *et al.* [35] utilisent une formulation donnant directement la viscosité dynamique du mélange :

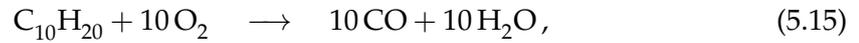
$$\mu(T) = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^\alpha, \quad (5.14)$$

où μ_0 , T_0 et α sont des paramètres. Néanmoins, il a été montré dans la validation détaillée [176] que les deux lois donnent des résultats très proches.

D'autre part, Franzelli *et al.* [35] préconisent d'opter pour des nombres de Prandtl d'espèce Pr_k tous égaux à $Pr = 0,739$. Enfin, les auteurs adoptent des nombres de Lewis unitaires, ce qui donne la valeur des nombres de Schmidt $Sc_k = Pr Le_k = 0,739$. Ces recommandations ont été appliquées dans cette étude.

5.4.2.2 Description du mécanisme réactionnel PEA

Le mécanisme proposé par Franzelli *et al.* [35] comporte les deux étapes suivantes :



Les valeurs des constantes de la loi d'Arrhenius-Kooij (relation (1.73)) pour le sens direct des réactions (5.15) et (5.16), ainsi que les exposants de concentration $\tilde{\nu}$ associées à ces deux réactions (voir la section 1.3.2.1) sont ceux donnés par Franzelli *et al.* [35]. Les vitesses des réactions (5.15) et (5.16) se distinguent de celles d'un schéma cinétique standard par leur fonction de correction f_r introduites par la méthode d'ajustement PEA (voir section 1.3.2.2), et s'écrivent sous la forme de la relation (1.75). Pour ce mécanisme, les fonctions de correction PEA des réactions (5.15) et (5.16) s'écrivent respectivement :

$$f_1(\phi_m) = 2 \left\{ \left[1 + \tanh \left(\frac{\Phi_{0,1} - \phi_m}{\sigma_{0,1}} \right) \right] + B_1 \left[1 + \tanh \left(\frac{\phi_m - \Phi_{1,1}}{\sigma_{1,1}} \right) \right] + C_1 \left[1 + \tanh \left(\frac{\phi_m - \Phi_{2,1}}{\sigma_{2,1}} \right) \right] \right\}^{-1}, \quad (5.17)$$

$$f_2(\phi_m) = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{\Phi_{0,2} - \phi_m}{\sigma_{0,2}} \right) \right] + \frac{B_2}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{\phi_m - \Phi_{1,2}}{\sigma_{1,2}} \right) \right] + \frac{C_2}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{\phi_m - \Phi_{2,2}}{\sigma_{2,2}} \right) \right] \left[1 + \tanh \left(\frac{\Phi_{3,2} - \phi_m}{\sigma_{3,2}} \right) \right]. \quad (5.18)$$

Ces fonctions sont unitaires pour $\phi_m \leq 1$. À partir de la stœchiométrie, la fonction f_1 permet de corriger la vitesse de flamme laminaire, alors que f_2 contribue à améliorer l'équilibre CO/CO_2 qui influe sur la température du mélange hors d'équilibre. Les constantes $\Phi_{i,j}$, $\sigma_{i,j}$, B_i et C_i sont déterminées pour une température des gaz frais T_{GF} et une pression P données. Franzelli *et al.* [35] fournissent leur valeur pour $T_{GF} = 473 \text{ K}$

et $P = 1 \text{ atm}$, et montrent qu'elles restent valables sur les intervalles $T_{\text{GF}} \in [300; 700 \text{ K}]$, $P \in [1; 12 \text{ atm}]$ et $\phi_m \in [0,6; 2]$, ce qui permet l'utilisation des mêmes fonctions de correction dans des conditions variées comme celles rencontrées dans le foyer TLC.

5.4.2.3 Validation du mécanisme sur une flamme laminaire prémélangée

L'implantation du mécanisme dans CEDRE, avec notamment une espèce fictive et une loi de viscosité dynamique différentes de celles de Franzelli *et al.* [35], a été validée sur une flamme 1D laminaire prémélangée, librement propagative, dont on a fait varier la richesse. Le calcul de flamme est similaire à ceux réalisés dans le chapitre 4 et l'annexe B et est détaillé dans [176].

La figure 5.18 présente l'évolution de la vitesse de flamme laminaire S_L en fonction de la richesse de mélange ϕ_m , obtenue avec le mécanisme de Franzelli *et al.* [35], en utilisant ou pas les fonctions de corrections $f_{1,2}(\phi_m)$. Ceci permet de quantifier l'effet de

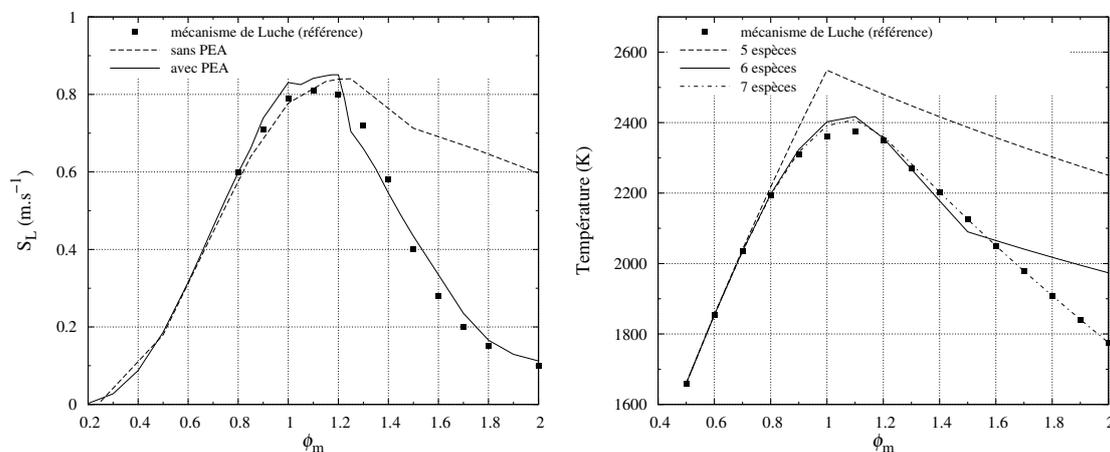


FIG. 5.18 | Évolution de la vitesse de flamme laminaire (à gauche) et de la température d'équilibre (à droite) en fonction de la richesse, à partir de gaz frais à 473 K sous 1 atm.

la correction PEA, en comparant les tracés à celui obtenu avec le mécanisme de Luche [178] composé de 91 espèces et 991 réactions, qui sert de référence. On constate qu'à partir de $\phi_m = 1,5$, S_L est largement surestimée avec le mécanisme non corrigé. Les fonctions $f_{1,2}(\phi_m)$ remplissent correctement leur rôle en réduisant S_L en mélange riche pour retrouver les valeurs obtenues par Luche avec son mécanisme détaillé.

Par ailleurs, l'évolution de la température adiabatique de fin de combustion en fonction de la richesse ϕ_m a été calculée afin de mettre en évidence le rôle du CO, et donc celui de la deuxième étape du mécanisme. Sur la figure 5.18, les évolutions pour différents jeux d'espèces sont tracées et comparées à celle obtenue avec les 91 espèces du mécanisme de Luche [178]. Le jeu de base composé de 5 espèces ($\text{C}_{10}\text{H}_{20}$, O_2 , CO_2 , H_2O , N_2) est celui d'un schéma cinétique global. Il conduit à une surestimation importante de la température à partir de $\phi_m \simeq 0,8$. En ajoutant le CO (6 espèces), on constate une forte amélioration des prédictions jusqu'à $\phi_m \simeq 1,5$. Au-delà, il est nécessaire de prendre en compte l'espèce H_2 (7 espèces) mais le schéma cinétique devrait alors comporter au moins une étape supplémentaire, ce qui sort du cadre de notre étude.

Finalement, on dispose dans CEDRE d'un mécanisme à 2 étapes permettant d'estimer correctement la température adiabatique de fin de combustion et la vitesse de flamme

laminaire pour une richesse $\phi_m \leq 2$, valeur qui constitue approximativement la limite haute du domaine d'inflammabilité du kérosène. Ce mécanisme est donc utilisé pour calculer le foyer TLC dans la suite de l'étude.

5.5 CONCLUSION

Dans ce chapitre, la géométrie de la chambre de combustion TLC et celle de son injecteur multipoint swirlé ont d'abord été décrites. Afin de mettre en évidence les données disponibles pour la modélisation, on a ensuite détaillé les différents points de fonctionnement étudiés expérimentalement et les méthodes de mesure mises en œuvre pour caractériser la phase gazeuse réactive, ainsi que les particules de suie et la phase liquide sous forme dispersée à l'intérieur de la chambre. Il apparaît que l'étude de cette chambre est particulièrement intéressante puisqu'elle est dotée d'un injecteur prototype dédié à la réduction des émissions polluantes qui a vocation à équiper la prochaine génération de moteurs. Elle est de plus bien documentée, avec quatre principaux points de fonctionnement étudiés expérimentalement par caractérisation des niveaux de température et de suie à l'intérieur de la chambre, ainsi que de la topologie des champs de concentration de kérosène en phase gazeuse et de radical OH.

Le domaine de calcul a ensuite été défini au moyen de simplifications nécessaires pour limiter le coût d'un tel calcul, et un maillage de ce domaine adapté à la simulation LES a été élaboré. Deux points de fonctionnement ont été sélectionnés pour la simulation numérique : le régime d'approche qui sera étudié en détail dans la suite de l'étude puisqu'il permet une comparaison numérique-expérience détaillée, et le régime de montée qui permettra d'évaluer la justesse de la modélisation dans des conditions différentes. Les conditions aux limites correspondant à ces points de fonctionnement ont été déterminées. Les conditions d'injection du kérosène liquide en phase dispersée sont particulièrement délicates à déterminer. Enfin, un schéma cinétique PEA à deux étapes a été mis en place dans CEDRE et validé sur une flamme laminaire prémélangée. Il permet de reproduire la décroissance de la vitesse de flamme laminaire au-delà de la stœchiométrie, contrairement aux schémas cinétiques à deux étapes non corrigés.

Simulation de la combustion et de la formation des suies dans le foyer TLC

6

Une simulation instationnaire de l'écoulement turbulent réactif diphasique dans le foyer TLC a été réalisée pour le régime d'approche en reprenant les choix et les paramètres du chapitre 5. L'objectif de cette première simulation est de préparer une simulation plus réaliste du foyer TLC prenant en compte les transferts radiatifs, et d'évaluer sur une configuration complexe le modèle de formation des suies amélioré et validé dans le chapitre 4.

Dans la première partie du chapitre, on analyse les résultats du calcul en s'intéressant à l'état aérothermochimique moyen dans la chambre ainsi qu'au comportement instationnaire de l'écoulement. Les résultats numériques sont également comparés aux mesures disponibles pour ce point de fonctionnement.

En tenant compte des écarts observés entre la simulation et l'expérience, les conditions aux limites du calcul sont ensuite modifiées par rapport à celles qui avaient été initialement estimées afin d'obtenir des résultats numériques plus proches des résultats expérimentaux. Cette démarche a pour objectif de définir les meilleures conditions de calcul pour la simulation couplée LES – formation des suies – transferts radiatifs qui sera présentée dans le chapitre 7. Les conséquences de la modification des conditions aux limites sont exposées, puis les résultats de la simulation de la formation des suies dans le foyer TLC sont analysés.

Enfin, les principaux résultats de la simulation du point de fonctionnement *montée* sont présentés et confrontés à l'expérience, afin d'évaluer le degré de précision de la simulation dans des conditions de fonctionnement différentes des précédentes.

Pour permettre la diffusion publique de ce mémoire, des données confidentielles concernant le foyer TLC ne peuvent y figurer. En conséquence, la température des gaz dans cette chambre a été rapportée à une valeur arbitraire. On note T^* la température adimensionnée résultante.

Table des matières

6.1	Simulation du régime d'approche	147
6.1.1	État aérothermochimique moyen dans la chambre	147
6.1.1.1	Convergence des moments statistiques	147
6.1.1.2	Champs de vitesse et de température	148
6.1.1.3	Lignes de courant de l'écoulement moyen	151
6.1.1.4	Topologie 3D de l'aérothermique dans la chambre	151
6.1.1.5	Caractéristiques des sprays de gouttes de kérosène	155
6.1.1.6	Régimes de combustion	157
6.1.2	Comportement instationnaire de l'écoulement	166
6.1.3	Comparaison mesures - simulation	168
6.1.3.1	Profils de température et de vitesse	168
6.1.3.2	Structure de flamme et champ de kérosène	171
6.1.4	Conclusion	175
6.2	Modification <i>ad hoc</i> de la simulation et modélisation de la formation des suies . . .	177
6.2.1	Intérêt, détails et limitations des modifications apportées	177
6.2.1.1	Estimation de l'effet du rayonnement	177
6.2.1.2	Mise en évidence du problème de mélange	177
6.2.2	Modification de la répartition des débits d'air injecté	179
6.2.2.1	Principe	179
6.2.2.2	Conséquences des modifications sur l'aérothermique	179
6.2.3	Simulation de la formation des suies dans le foyer TLC	180
6.2.3.1	Topologie du champ de suie et détails de sa formation	180
6.2.3.2	Comparaison avec les mesures expérimentales	184
6.2.4	Conclusion	184
6.3	Simulation du régime de montée	185
6.3.1	Conditions aux limites et modèles	185
6.3.2	État aérothermochimique moyen dans la chambre	185
6.3.3	Comparaison mesures - simulation	189
6.3.4	Conclusion	191
6.4	Conclusion du chapitre	191

6.1 SIMULATION DU RÉGIME D'APPROCHE

Dans cette section sont présentés les résultats obtenus par la simulation pour le régime d'approche. L'objectif est d'analyser le caractère prédictif d'un tel calcul réalisé avec un code à vocation industrielle tel que CEDRE, ainsi que de préparer l'étude de l'effet du rayonnement dans un foyer de type quasi-industriel. Il s'agit d'abord d'analyser les résultats obtenus afin de vérifier qu'ils sont en accord avec la physique des phénomènes modélisés, et de fournir les arguments permettant l'explication des principaux résultats de ces travaux de thèse. Dans un deuxième temps ces résultats sont confrontés aux mesures disponibles afin de valider la modélisation adoptée ou au contraire de mettre en évidence ses défauts.

6.1.1 État aérothermochimique moyen dans la chambre

Les phénomènes intervenant dans ce type de chambre sont connus [31, 179], et sont représentés sur la figure 6.1. On discerne le mouvement de swirl induit par le passage de l'air à travers les trois rangées de vrilles, l'évaporation et la fragmentation progressive des gouttes de kérosène, injectées au niveau des étages principal et pilote, la combustion du kérosène gazeux et la recirculation des gaz brûlés dans la chambre. On distingue en particulier une recirculation centrale dénommée ARZ pour *Axial Recirculation Zone* et des recirculations en coin appelées CRZ (*Corner Recirculation Zone*).

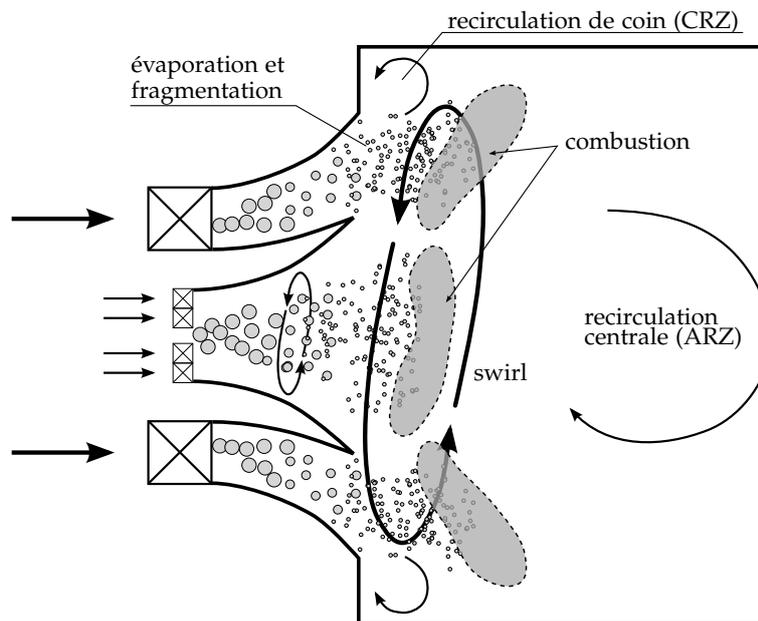


FIG. 6.1 | Schéma de principe des phénomènes physiques dans la chambre TLC.

Dans cette section, on s'attache d'abord à décrire la topologie et l'état aérothermique de l'écoulement moyen à l'intérieur de la chambre, afin d'en dégager les principales propriétés. On détaille également les caractéristiques des sprays de gouttes de kérosène qui composent la phase dispersée. On caractérise enfin la combustion en déterminant les régimes de combustion et leur localisation dans la chambre.

6.1.1.1 Convergence des moments statistiques

En premier lieu, il convient de contrôler la convergence des moments statistiques (moyenne et écart type). L'état moyen convergé a été obtenu en moyennant les états

instantanés sur 212 000 itérations après passage du transitoire, ce qui représente 0,106 s de temps physique pour un pas de temps de $5 \cdot 10^{-7}$ s. Réalisé sur 480 cœurs de processeurs Intel Westmere cadencés à 3,06 GHz, un tel résultat est obtenu en une centaine d'heures.

Pour comparer la durée simulée à celle de la convection des gaz dans la chambre, il faut choisir un temps représentatif de la traversée de chambre, ce qui n'est pas aisé puisque les particules fluides peuvent avoir des durées de traversée très différentes. On distingue le temps de traversée de chambre en-dehors de l'ARZ, évalué à 10 ms, et le temps de retournement dans la recirculation, évalué à 30 ms. Le calcul réalisé correspond alors à 10 traversées de chambre et 3,5 retournements dans l'ARZ.

Pour donner une idée de la convergence du calcul, on propose d'observer l'évolution locale de la température moyenne et de son écart type. On présente ici l'exemple de deux points situés dans des zones de l'écoulement très différentes : le premier situé en bordure de la zone chaude où la vitesse mais également les fluctuations de température sont élevées (point ① localisé sur les figures 6.4g et 6.4h), et le deuxième situé au centre de la recirculation principale où la vitesse et les fluctuations de température sont beaucoup plus faibles (point ② localisé sur les figures 6.4g et 6.4h). Les figures 6.2 et 6.3 présentent les évolutions des deux premiers moments statistiques (voir section 1.2.3) au cours du calcul en ces deux points, calculées à partir du moment où le transitoire est évacué. On constate que les moyennes présentent un niveau de convergence satisfaisant

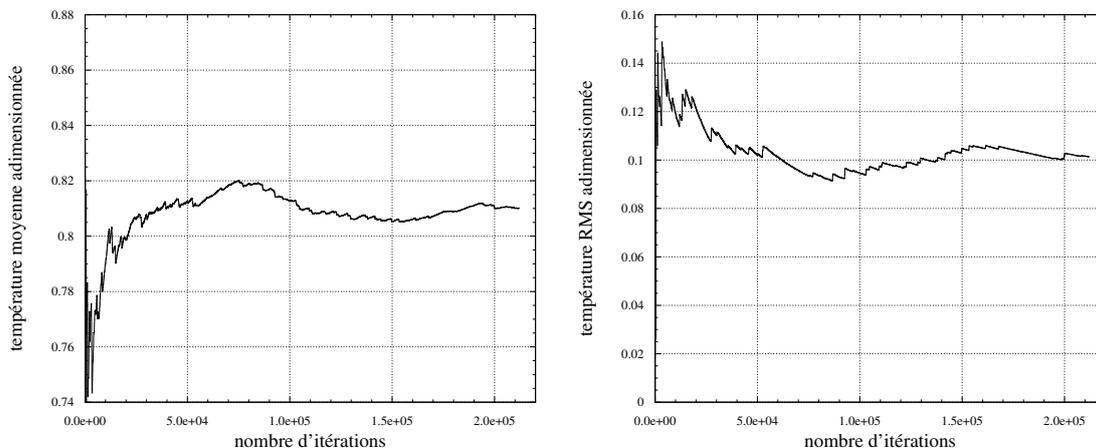


FIG. 6.2 | Évolutions temporelles de la moyenne obtenue par cumul à chaque itération et écart type associé, pour un point dans la flamme (point ① localisé sur la figure 6.4g).

au regard de l'analyse conduite ci-après, mis à part l'existence d'oscillations de basse fréquence dont le calcul de la moyenne serait trop coûteux. La convergence des écarts types apparaît proche de celle des moyennes. De plus, les moments statistiques ont un niveau de convergence proche à la fois dans la zone de flamme (point ①) et dans la recirculation (point ②), indiquant une convergence similaire dans l'ensemble de l'écoulement, ce qui est confirmé en répétant l'analyse en d'autres points.

6.1.1.2 Champs de vitesse et de température

Cette section présente les champs moyens dans le plan médian d'équation $z = 0$. On peut ainsi appréhender les principales caractéristiques aérodynamiques et thermiques de l'écoulement. Dans les sections suivantes, on détaillera les différents phénomènes menant à l'obtention de ces champs moyens.

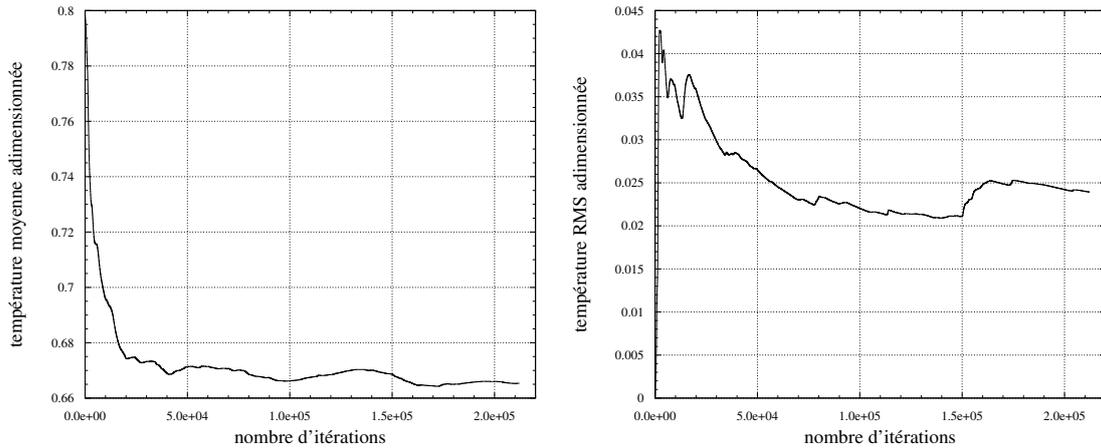


FIG. 6.3 | Évolutions temporelles de la moyenne obtenue par cumul à chaque itération et écart type associé, pour un point dans la recirculation centrale (point \textcircled{D}) localisé sur la figure 6.4g).

La figure 6.4 présente les champs moyens 2D des composantes axiale, azimutale et radiale de la vitesse, ainsi que le champ de température. À ces champs moyens sont associés en colonne de droite les champs de fluctuations correspondants, calculés avec l'équation (1.50) de la section 1.2.3.

Sur la figure 6.4a, l'échelle bicolore met en évidence les zones de vitesse axiale négative, qui correspondent à des recirculations, le sens principal de l'écoulement (vitesse positive) étant de la gauche vers la droite. On observe en particulier une zone de vitesse axiale négative largement étendue au centre de la chambre, correspondant à l'ARZ. Sous l'effet de la force centrifuge due au mouvement de swirl de l'écoulement et de l'élargissement brusque de la section de passage, une zone de basse pression se crée sur l'axe. Lorsque le débit de quantité de mouvement dans la direction orthoradiale est suffisamment fort par rapport à celui de la direction axiale, le jet se déstabilise et une zone de recirculation apparaît (mécanisme de *Vortex Breakdown* décrit par Lucca-Negro et O'Doherty [180]). Le nombre de swirl S exprime ce rapport de débits de quantité de mouvement, et doit être supérieur à la valeur critique $S_c = 0,6$ pour que ce phénomène apparaisse :

$$S = \frac{\int_0^R u_\theta u_x r^2 dr}{R \int_0^R u_x^2 r dr}, \quad (6.1)$$

où u_x est la vitesse axiale, u_θ la vitesse tangentielle et R le rayon de la section de passage considérée, qui doit être placée juste avant l'élargissement brusque pour obtenir la valeur minimale du nombre de swirl. Évalué sur les champs moyens, sur quatre rayons différents dans la section schématisée en trait pointillé sur la figure 6.4a, le nombre de swirl moyen obtenu $S = 0,696$ est donc favorable à la formation de l'ARZ. Celle-ci a un rôle crucial dans toute chambre dotée d'un injecteur swirlé, puisqu'elle constitue un obstacle aérodynamique permettant la stabilisation de la flamme. On observe également des zones de recirculation en périphérie de l'écoulement de type CRZ, créées par l'élargissement brusque de la section de passage.

Le champ de vitesse azimutale, tracé sur la figure 6.4c, met en évidence le sens de rotation des swirls dans chaque étage de vrilles. On constate que l'écoulement issu de chaque étage a un mouvement de rotation opposé à celui de l'écoulement issu de l'étage de vrilles voisin. Cela permet d'augmenter le cisaillement localement afin d'accroître la fragmentation des gouttes de kérosène et de favoriser la stabilité de la flamme par

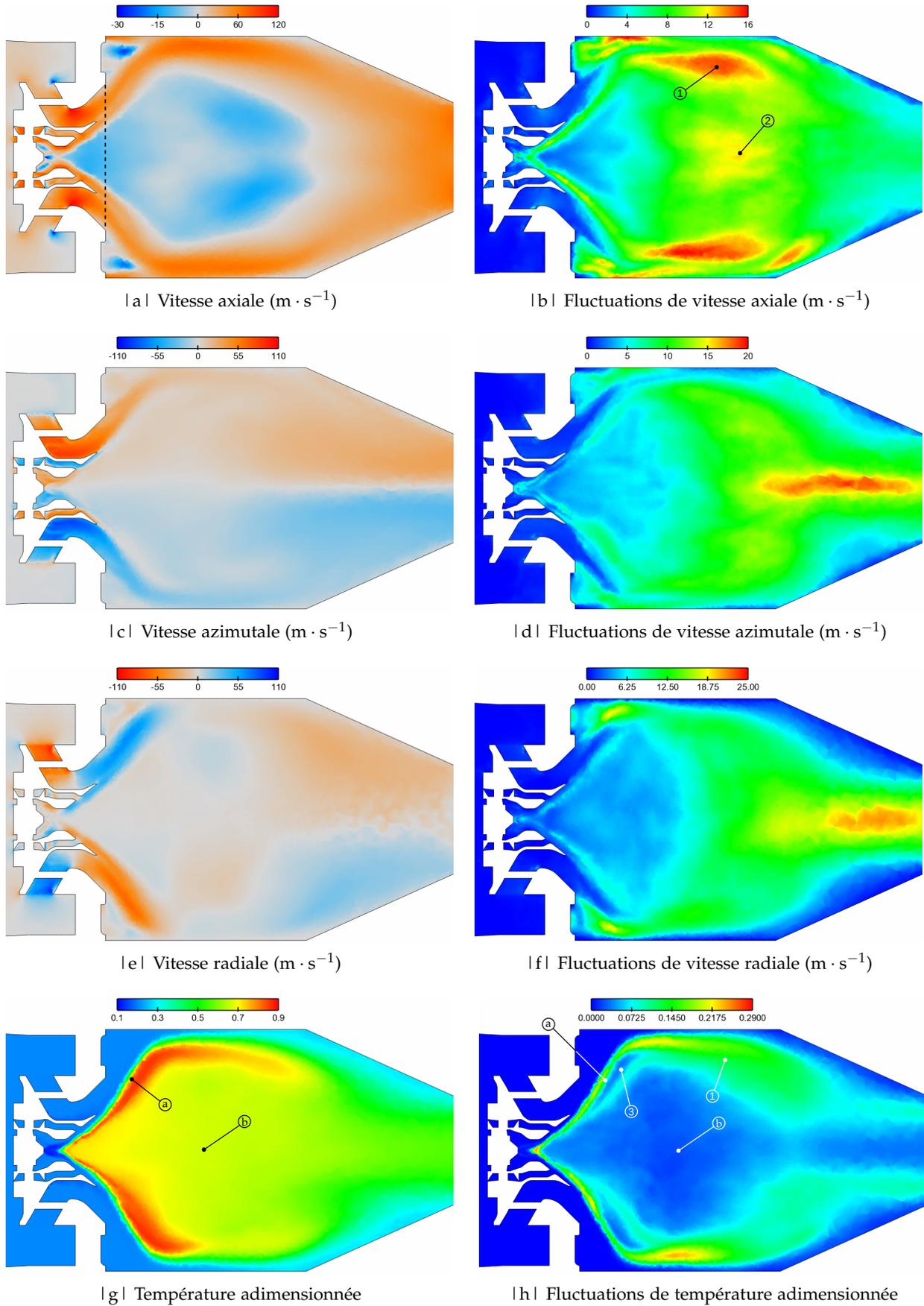


FIG. 6.4 | Champs moyens obtenus en LES (visualisation restreinte à la chambre de combustion).

une diminution locale de la vitesse. Le sens global du swirl est celui imprimé à la plus grande partie du débit, qui passe dans les vrilles radiales, et est conservé dans toute la longueur de la chambre.

La figure 6.4e présente le champ moyen de vitesse radiale qui montre la forte composante radiale fournie à l'écoulement par l'étage de vrilles radiales. En sortie des étages de vrilles axiales, l'écoulement qui circule autour de l'ARZ acquiert une vitesse radiale du même ordre. Plus loin dans la chambre, le sens de la vitesse s'inverse en raison de la présence du convergent.

Le champ moyen de température présenté sur la figure 6.4g est le résultat des phénomènes consécutifs que sont l'évaporation des gouttes de kérosène, la combustion de sa vapeur et la convection des gaz chauds dans la chambre. On observe la présence d'une zone très chaude ($T^* \sim 0,893$) qui s'étend en bordure de l'ARZ, à partir de la sortie du 1^{er} étage de vrilles axiales.

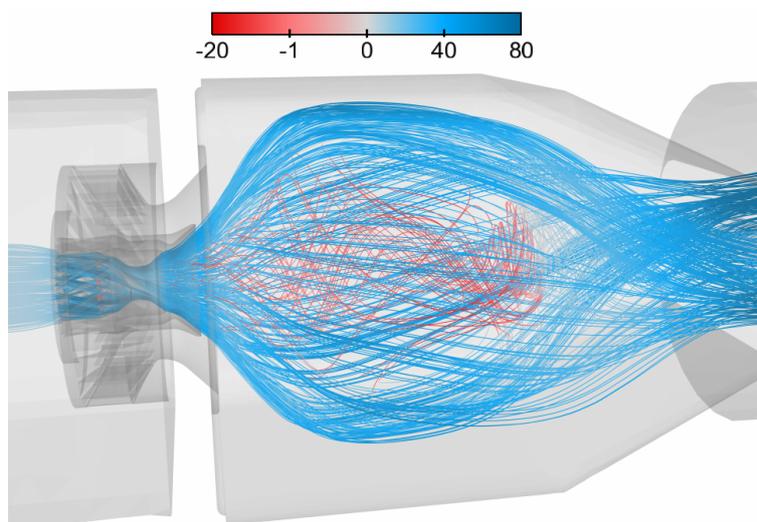
Pour finir, les champs situés en colonne de droite sur la figure 6.4 donnent les fluctuations associées aux grandeurs moyennes. On observe une corrélation entre les fluctuations de vitesse axiale et celles de la température. La zone ① et son symétrique sur les figures 6.4b et 6.4h sont des zones de fortes fluctuations de vitesse et de température, qui sont le lieu de détachements tourbillonnaires et de recirculation de poches de gaz brûlés (voir section 6.1.2). La zone ② est une zone de bifurcation dans laquelle les particules fluides se dirigent soit vers l'aval soit vers l'amont (dans l'ARZ), suivant l'influence de la turbulence. Les fluctuations de vitesses azimutale et radiale sont plus élevées dans la seconde moitié de la chambre car l'écoulement est moins contenu qu'en sortie d'injecteur. La décroissance de la quantité de mouvement induit une perte d'inertie, ce qui rend l'écoulement plus sujet à une déstabilisation. Enfin, on observe sur la figure 6.4h que la zone la plus chaude de l'écoulement est une région de faible fluctuation (zone ③) qui montre la bonne stabilisation de la flamme à cet endroit.

6.1.1.3 Lignes de courant de l'écoulement moyen

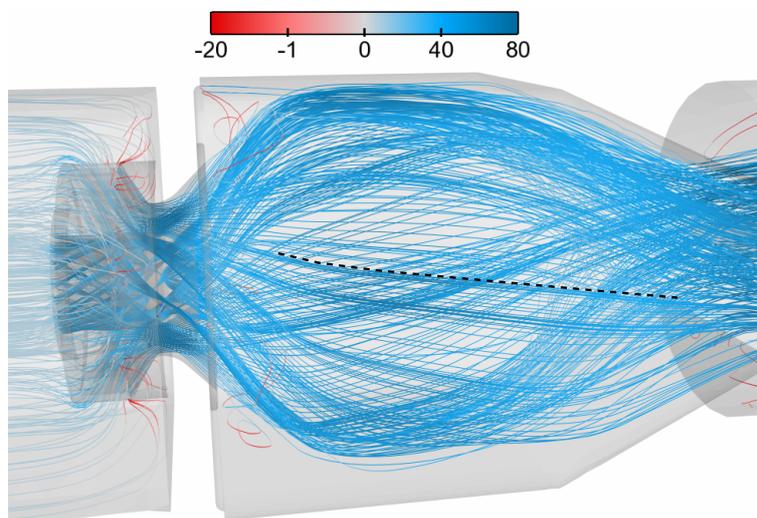
Pour établir le lien entre les différents étages de vrilles de l'injecteur et la recirculation centrale (ARZ), les lignes de courant de l'écoulement moyen ont été tracées sur la figure 6.5 et colorées par la vitesse axiale locale, en distinguant celles qui sont issues de points situés au niveau du 1^{er} étage de vrilles axiales (figure 6.5a) et celles qui sont issues de points situés en regard des autres rangées de vrilles (6.5b). Elles ne représentent pas des trajectoires réelles de particules fluides, mais elles permettent de restituer le mouvement moyen tridimensionnel. Seules quelques lignes de courant issues du 1^{er} étage de vrilles axiales entrent dans la recirculation (lignes de courant avec des vitesses négatives, en rouge), tandis que la majorité d'entre elles contournent l'ARZ et la zone de bifurcation pour s'évacuer en aval. En observant la faible courbure des lignes de courant par rapport à l'axe (ligne pointillée sur la figure 6.5b), on remarque que l'effet du swirl diminue lorsque l'écoulement débouche dans la chambre et contourne l'ARZ, avec un mouvement moyen dominé par sa composante axiale. Plus de détails sur les lignes de courant à l'intérieur de l'ARZ sont donnés en section D.1 de l'annexe D.

6.1.1.4 Topologie 3D de l'aérothermique dans la chambre

On propose dans ce paragraphe de caractériser la géométrie tridimensionnelle de l'écoulement, en complément de la section 6.1.1.3. La figure 6.6 présente l'isosurface de vitesse axiale moyenne nulle, qui englobe la zone de vitesse axiale négative contenue dans l'ARZ. Sa forme est axisymétrique dans la partie amont de la chambre, et adopte vers l'aval une section plus carrée, certainement influencée par la forme de la chambre.



| a | Lignes de courant issues de points situés en regard du 1^{er} étage de vrilles axiales



| b | Lignes de courant issues de points situés en regard du 2^e étage de vrilles axiales et des vrilles radiales

FIG. 6.5 | Lignes de courant, tracées à partir du champ moyens de vitesse obtenus en LES, colorées par la vitesse axiale.

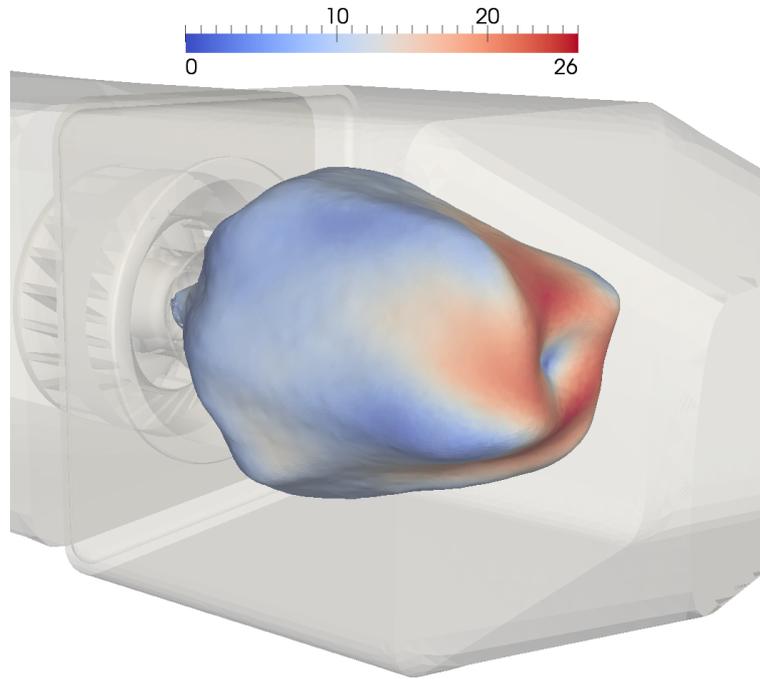


FIG. 6.6 | Isosurface de vitesse axiale moyenne nulle colorée par la norme du vecteur vitesse.

L'isosurface est colorée par la norme de la vitesse moyenne, ce qui permet d'observer une augmentation de la composante transversale de la vitesse vers l'aval (la vitesse axiale est nulle sur l'isosurface). On relève en effet des valeurs d'environ $30 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ pour les composantes azimutale et radiale de la vitesse sur les figures 6.4c et 6.4e. À l'approche de la zone de bifurcation, située dans la partie la plus aval de l'isosurface, la quantité de mouvement est à dominante radiale et tangentielle lorsque l'écoulement contourne l'ARZ. Le champ moyen de pression lié à ce mouvement est tracé sur la figure 6.7 avec un intervalle de valeur restreint mettant en évidence le différentiel de pression. L'écoulement qui contourne l'ARZ s'enroule autour de l'axe, ce qui se traduit

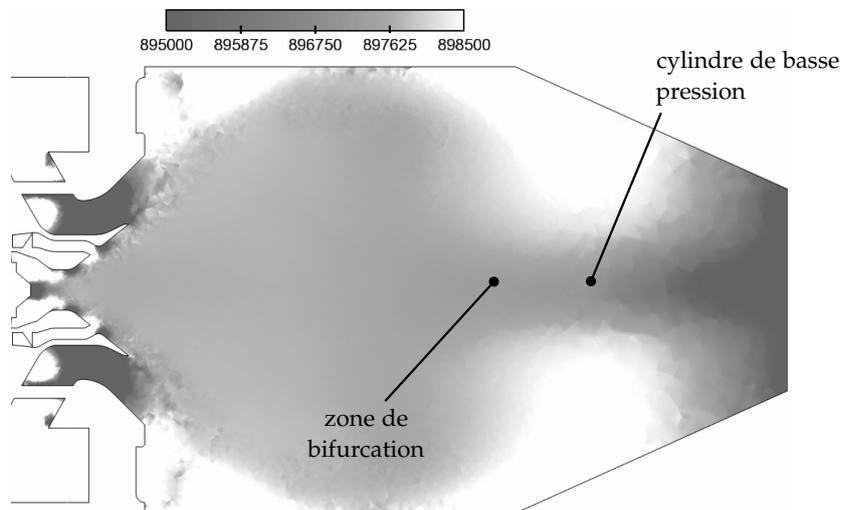


FIG. 6.7 | Champ de pression moyenne, sur un intervalle restreint de valeurs.

par l'apparition d'un cylindre de basse pression qui s'étend entre la zone de bifurcation

et la sortie du convergent.

La figure 6.8 présente l'isosurface $T^* = 0,714$, qui englobe la zone la plus chaude de l'écoulement et se situe autour de l'ARZ. On observe sa forte dissymétrie (visible également sur la figure 6.4g) malgré le niveau de convergence élevé des moyennes. On a vu sur l'isosurface de vitesse axiale nulle (figure 6.6) que le champ aérodynamique ne comportait pas une telle dissymétrie. Elle serait donc plus liée aux phénomènes d'évaporation et de combustion qu'à l'aérodynamique de l'écoulement. Par ailleurs, les fluctuations turbulentes peuvent avoir un effet non négligeable dans les zones de forts gradients concernées par cette dissymétrie. Une analyse détaillée a confirmé que la zone chaude est proche de la zone de combustion, présente elle-même à proximité de la zone où se trouve du kérosène gazeux. On retrouve donc logiquement une forte dissymétrie sur le champ de fraction massique de kérosène (se référer à la figure D.4 en annexe D), dont les causes sont moins évidentes. Le maillage et le transport des gouttes de kérosène liquide pourraient être liés à cette répartition dissymétrique du kérosène gazeux dans la chambre. Il peut en particulier y avoir une interaction entre les gouttes, la phase porteuse, plutôt axisymétrique, et la section carrée de la chambre. Cependant les résultats de la simulation numérique ne permettent pas de confirmer clairement cette hypothèse, la complexité de l'écoulement rendant difficile l'isolement de ce phénomène parmi tous les phénomènes mis en jeu.

L'isosurface de la figure 6.8 est colorée par la vitesse axiale, ce qui met en évidence la localisation de cette zone chaude entre la zone de forte vitesse axiale (entre l'isosurface et la paroi) créée par le contournement de l'ARZ par l'écoulement, et la zone de vitesse axiale négative, à l'intérieur de l'ARZ.

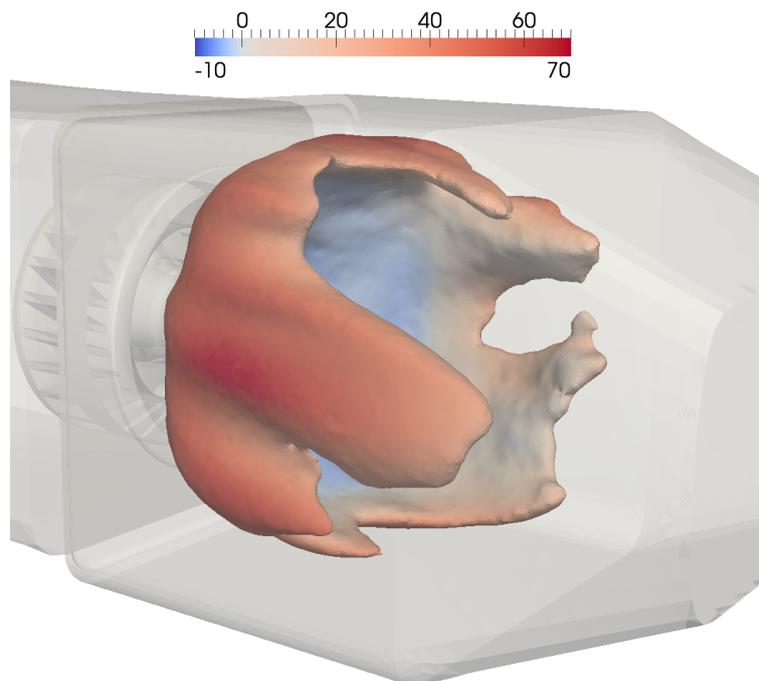


FIG. 6.8 | Isosurface de température moyenne $T^* = 0,714$, colorée par la vitesse axiale.

6.1.1.5 Caractéristiques des sprays de gouttes de kérosène

Les sprays de gouttes de kérosène liquide sont modélisés par plus d'un million de gouttes numériques. Ce sont les entités réellement transportées par le code, et représentent chacune un sous-ensemble de gouttes physiques possédant les mêmes caractéristiques.

La figure 6.9 présente le champ instantané de gouttes numériques de kérosène. On

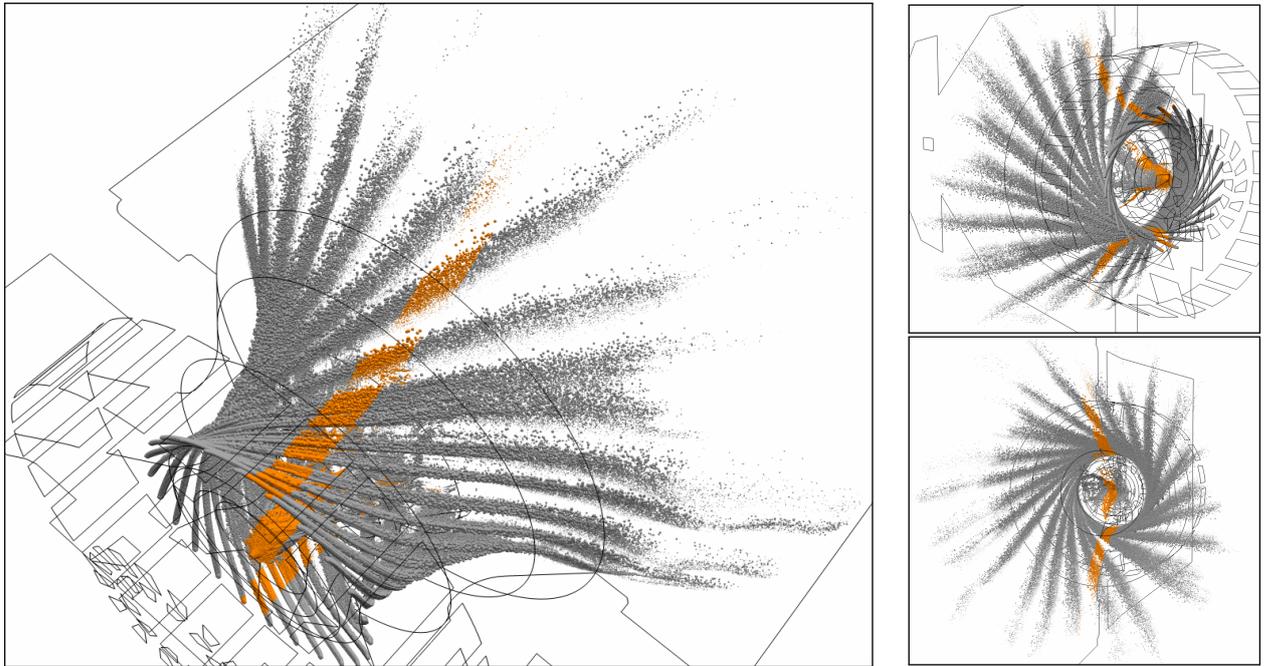


FIG. 6.9 | Topologie du champ instantané de gouttes numériques de kérosène, représentées par des sphères de diamètre proportionnel à celui des gouttes physiques. Mise en évidence par coloration de la tranche utilisée pour la visualisation 2D.

constate que les sprays issus de l'injecteur multipoint suivent le mouvement fortement swirlé de la phase porteuse. Ils restent globalement cohérents puisqu'ils sont convectés dans une zone de faibles fluctuations de vitesse (voir figure 6.4) et ne s'étalent que loin en aval de leur point d'injection.

Pour détailler les caractéristiques des gouttes physiques, on isole une partie de ce champ localisée dans une tranche de 4 mm d'épaisseur au centre de la chambre, colorée en orange sur la figure 6.9, ce qui permet une représentation simplifiée, en 2D, du champ 3D. Cette tranche n'offre pas une description de l'ensemble du champ, mais elle est considérée comme suffisamment représentative de sa topologie. La figure 6.10 offre une visualisation des gouttes numériques de cette tranche, chacune représentée par une sphère de diamètre proportionnel au diamètre de la goutte physique. Les discontinuités des sprays s'expliquent à l'aide de la figure 6.9 où l'on voit que la tranche est constituée de différents sprays la traversant. Le champ observé en 2D est donc composé de sprays issus de plusieurs trous d'injection multipoint. Sur la figure 6.10a, les gouttes numériques sont colorées par le diamètre des gouttes physiques. Les sprays injectés par le multipoint commencent par se développer le long de la paroi des vrilles radiales, là où le gradient de vitesse est élevé, ce qui a pour effet de fragmenter les gouttes. C'est pourquoi on observe des gouttes de faible diamètre près de la paroi. La proximité des gouttes avec la paroi nécessite en théorie de connaître précisément les phénomènes d'interaction des gouttes avec la paroi pour pouvoir ensuite les modéliser. Cette étude est ici hors de portée et les modèles existants dans SPARTE ne peuvent

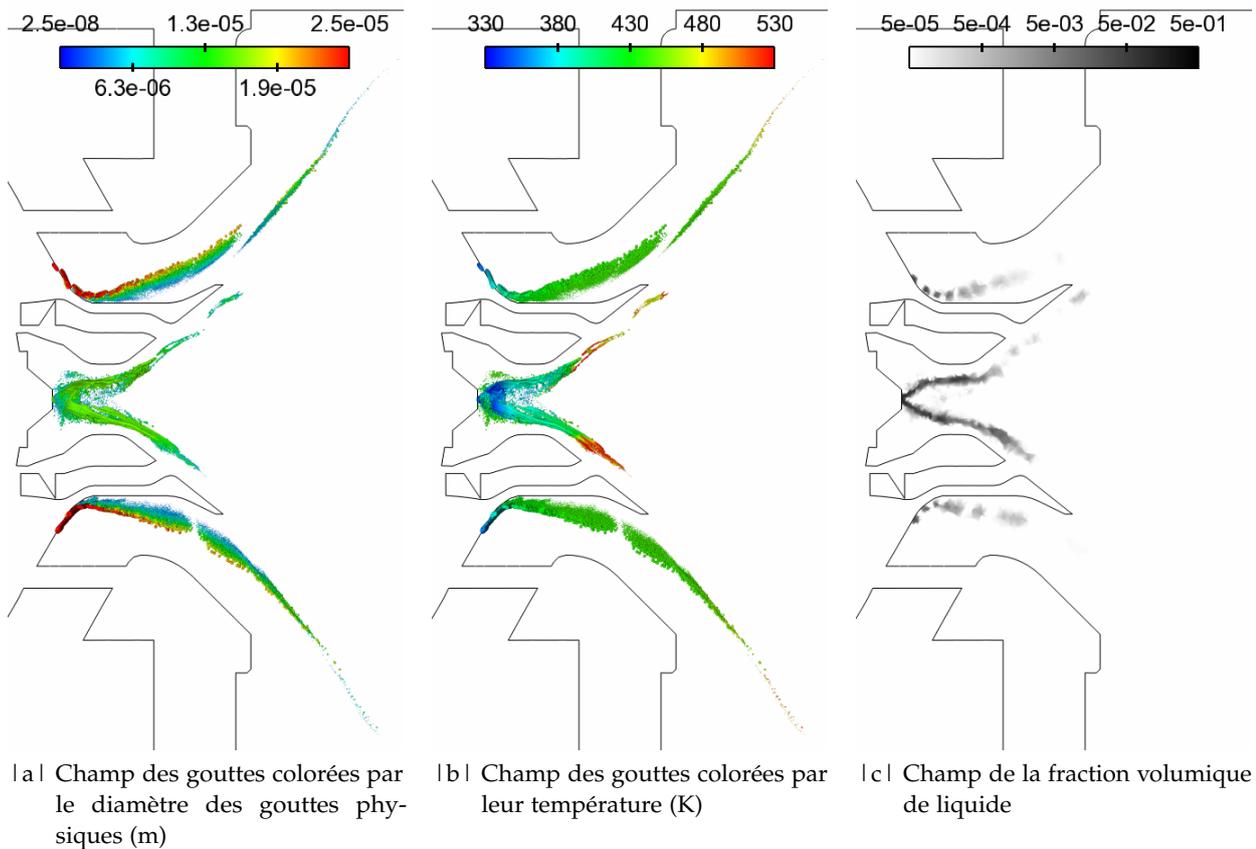


FIG. 6.10 | Visualisation du champ de gouttes numériques.

représenter ces phénomènes. Pour ces calculs, un simple modèle de rebond a donc été utilisé pour sa robustesse et permet traiter la présence d'un film liquide en paroi en imposant aux gouttes une direction de rebond quasi-parallèle à la paroi. Dans l'idéal, il serait nécessaire de modéliser la formation d'un tel film, ce qui pourrait avoir des effets significatifs sur l'évaporation et la combustion du kérosène. Un solveur de ce type est en cours de développement à l'ONERA et sera bientôt disponible.

Au cours de leur trajet dans les vrilles, les gouttes s'éloignent de la paroi sous l'effet de la force centrifuge, alors que la phase porteuse a un mouvement parallèle aux parois. Cet effet induit aussi par définition un tri des gouttes suivant leur taille (stratification). On observe en effet que le gradient en diamètre est conservé tout au long du développement du spray, alors que la fragmentation doit cesser dès lors que le spray se détache de la paroi.

Le diamètre des gouttes physiques de l'injecteur pilote est quasiment uniforme jusqu'en sortie de la rangée externe de vrilles axiales, ce qui indique que la fragmentation n'intervient pas dans cette zone. En observant le champ de vitesse axiale (figure 6.4a), on constate que la vitesse à proximité du nez de l'injecteur est quasi-nulle. Les gouttes sont donc progressivement entraînées par la phase porteuse, sans fort cisaillement. En revanche, en sortie de la rangée externe de vrilles axiales, on a un fort cisaillement dû aux sens opposés des swirls créés par les deux rangées de vrilles axiales (voir l'inversion de vitesse azimutale sur la figure 6.4c), qui a pour effet de fragmenter les gouttes. Elles disparaissent rapidement dans cette zone sous les effets conjugués de la fragmentation et de l'évaporation.

Enfin, à proximité de l'injection sur le nez du pilote on observe un amas de gouttes

dispersées à l'extérieur du cône formé par le spray sortant de l'injecteur. Il s'agit de gouttes capturées par les recirculations situées derrière le culot en sortie du 1^{er} étage de vrilles axiales^(a). Ces gouttes s'évaporent progressivement durant leur séjour dans ces recirculations, c'est pourquoi on observera la présence de kérosène gazeux dans cette zone, sur la figure 6.11b.

La figure 6.10b reprend la même représentation que précédemment, en colorant les gouttes par leur température. On observe des différences importantes entre les gouttes issues du multipoint et celles issues du pilote : la variation de la température est beaucoup plus rapide pour l'injecteur pilote, avec tout de même une zone de température uniforme autour de 400 K, tandis qu'au niveau du multipoint, la température des gouttes évolue dans l'intervalle [440;445 K] jusqu'à leur arrivée à proximité de la flamme, indépendamment de leur taille puisque le gradient de température n'est pas corrélé au gradient de diamètre. C'est dans cette zone qu'a lieu l'évaporation des gouttes, dont la température caractéristique d'évaporation est de l'ordre de 550 K si on la calcule suivant le modèle utilisé par le solveur SPARTE :

$$T_{\text{eb}}(P) = \frac{b}{a - \ln(P)} - c, \quad (6.2)$$

où a , b et c sont des coefficients issus des propriétés du kérosène liquide, et P désigne la pression.

La fraction volumique instantanée de liquide α dans le plan médian du maillage eulérien est représentée sur la figure 6.10c, avec une échelle de valeurs logarithmique. On constate qu'elle est très élevée près des injections de kérosène, où l'on sort de l'hypothèse de phase dispersée, la phase liquide pouvant être considérée comme dense pour $\alpha \gtrsim 10^{-3}$, et dispersée pour $\alpha \lesssim 10^{-3}$. Le spray provenant de l'injection multipoint respecte plutôt bien l'hypothèse de phase dispersée, tandis que le spray de l'injection pilote impose une forte fraction volumique liquide, en raison du confinement du spray entre le bol pilote et l'ARZ qui remonte presque jusqu'au nez de l'injecteur pilote (voir figure D.1b en annexe D), et du débit d'air passant par les vrilles axiales bien inférieur à celui passant par les vrilles radiales.

6.1.1.6 Régimes de combustion

On caractérise dans cette section la combustion dans la chambre TLC dans les conditions correspondant au régime d'approche. L'analyse locale des résultats de calcul dans le plan médian de la chambre permet une représentation simple des résultats et une analyse fine des phénomènes. Cependant elle n'est pas représentative de l'ensemble du volume de la chambre. On mènera donc une analyse globale des résultats dans une deuxième sous-section pour confirmer les conclusions issues de l'analyse locale.

Analyse locale de la combustion

Indice de Takeno

L'indice de Takeno permet de donner des indications sur le régime local de combustion. Il consiste à mettre en évidence le sens de rencontre des gaz frais au moment de la combustion, par le calcul de l'expression suivante :

$$\mathcal{T} = \nabla Y_F \cdot \nabla Y_{\text{ox}}. \quad (6.3)$$

La quantité \mathcal{T} est donc positive lorsque la combustion se fait en régime prémélangé et négative lorsqu'elle a lieu en diffusion. Puisque sa signification n'est valable que dans la

(a). Recirculations mises en évidence par les zones de vitesse axiale négative sur la figure 6.4a.

zone de flamme, on définit de la façon suivante une quantité similaire $\dot{\omega}_F^*$ qui conserve le signe de \mathcal{T} :

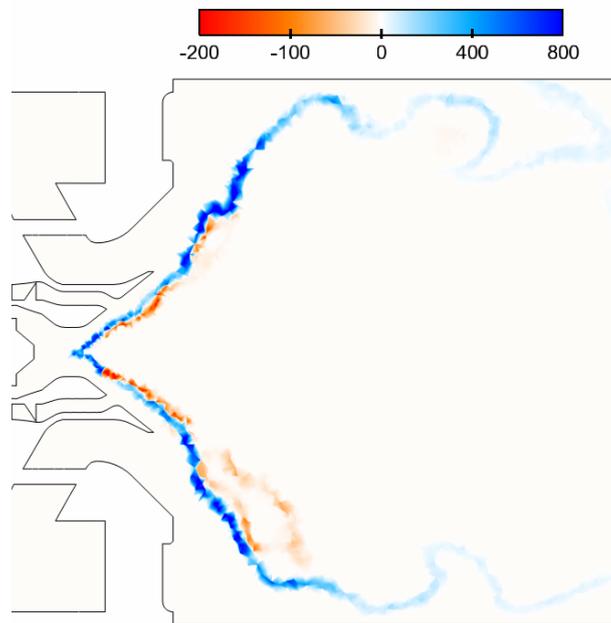
$$\dot{\omega}_F^* = \dot{\omega}_F \frac{\mathcal{T}}{\|\nabla Y_F\| \|\nabla Y_{\text{ox}}\|}, \quad (6.4)$$

où $\|\cdot\|$ désigne l'opérateur norme euclidienne. Sur la figure 6.11a est tracé $\dot{\omega}_F^*$, calculé à partir d'un champ instantané. Ce tracé localise tout d'abord la zone de réaction, et l'échelle bicolore met en évidence le signe de $\dot{\omega}_F^*$. On constate que la flamme se développe sans discontinuité depuis l'injecteur pilote et presque jusqu'aux parois latérales de la chambre. Le mouvement de swirl de l'écoulement en sortie de vrilles permet la stabilisation de la flamme, qui remonte bien en amont au centre de l'injecteur. Cette zone de flamme centrale très peu fluctuante assure à l'injecteur la présence d'une flamme dans des conditions de fonctionnement variées. La dynamique de la flamme sera analysée en détails en section 6.1.2. Le signe de $\dot{\omega}_F^*$ montre que la flamme adopte un régime dominant de combustion prémélangée, avec la présence de zones de diffusion principalement au niveau du pilote et, avec une intensité moindre, plus en aval (partie inférieure de la figure 6.11a). Ces observations sont confirmées sur l'état moyen, en section D.2 de l'annexe D.

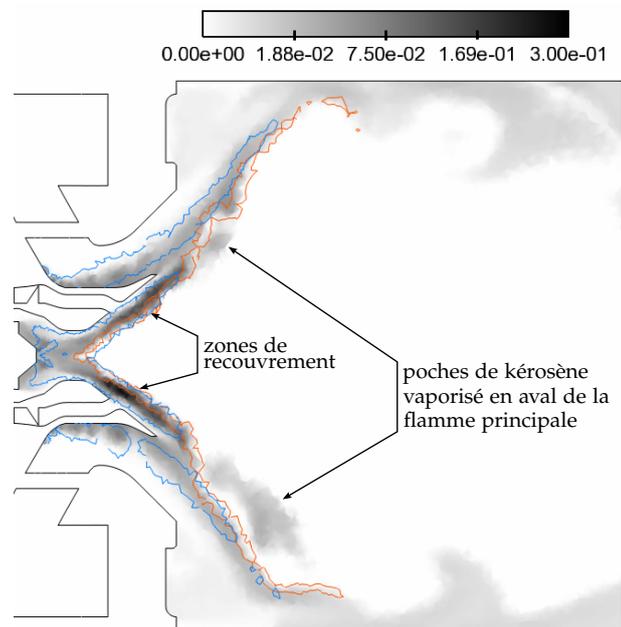
Pour interpréter ces résultats, on compare ce tracé avec le champ instantané de kérosène gazeux tracé sur la figure 6.11b, accompagné d'une isoligne bleue de terme source d'évaporation des gouttes $\dot{\omega}_{\text{evap}} = 0,6 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$, et d'une isoligne orange de terme source de kérosène gazeux $\dot{\omega}_F = -200 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$. Le choix de ces iso-valeurs est arbitraire, mais elles permettent de formuler une interprétation qualitative des résultats en localisant les zones d'évaporation du kérosène liquide et de réaction. Par ailleurs, l'échelle quadratique utilisée pour représenter Y_F permet de révéler les valeurs faibles, invisibles avec une échelle linéaire. On distingue deux situations différentes selon l'injecteur considéré :

- **Au niveau de l'étage pilote**, l'évaporation rapide, déjà observée sur la figure 6.10, génère des fractions massiques de kérosène gazeux élevées. Cette évaporation est due à la présence de la flamme et à la recirculation de gaz brûlés en amont jusqu'au niveau du spray de gouttes (la zone chaude est visible sur la figure 6.4g). La zone de réaction se situe dans la zone de vitesse axiale nulle, et recouvre une partie de la zone d'évaporation. Dans cette situation, le kérosène qui s'est évaporé hors de cette zone de recouvrement a le temps de se mélanger à l'air et brûle donc en prémélange, dans la zone bleue de la figure 6.11a qui s'étend depuis l'axe et jusqu'en sortie des vrilles radiales. En revanche, le kérosène qui s'évapore dans la zone réactive n'a pas le temps de se mélanger à l'air, ce qui localement forme une flamme de diffusion (filet orange sur la figure 6.11a).
- **Au niveau de l'étage multipoint**, le kérosène injecté a une meilleure dispersion dans le volume, en comparaison avec l'étage pilote, à débit de kérosène liquide identiques. L'évaporation du kérosène est donc plus rapide et a lieu en amont de la zone de combustion, toujours située dans la zone de vitesse axiale nulle. Le mélange kérosène-air est alors favorisé, ce qui permet une combustion bien prémélangée comme l'indique la figure 6.11a.

Enfin, on observe sur la figure 6.11b des poches de kérosène vaporisé de l'autre côté du front de flamme, provenant très certainement de l'étage pilote où une partie du kérosène liquide s'évapore tardivement, dans une zone déjà très riche. Il brûle alors en flamme de diffusion, ce qui explique la présence de zones oranges hors de l'étage pilote sur la figure 6.11a, mais avec un taux de réaction faible qui apparaît sur le champ de $\dot{\omega}_F^*$ de la figure 6.11a mais pas dans l'aire délimitée par l'isoligne $\dot{\omega}_F = -200 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$



a | Champ instantané de $\dot{\omega}_F^*$ ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$).



b | Champ instantané de fraction massique de kérosène gazeux Y_F , avec une isoligne bleue de terme source d'évaporation des gouttes $\dot{\omega}_{\text{evap}} = 0,6 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$, et une isoligne orange de terme source de kérosène gazeux $\dot{\omega}_F = -200 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.

FIG. 6.11 | Analyse des phénomènes d'évaporation et de combustion sur un état instantané LES.

de la figure 6.11b.

Richesse locale

Après avoir identifié phénoménologiquement les régimes de combustion et les corrélations entre les phénomènes d'évaporation, de convection et de combustion sur un état instantané, on rend compte des conditions locales de la combustion en traçant le champ instantané de richesse ϕ_m du mélange sur la figure 6.12. La zone stœchiométrique

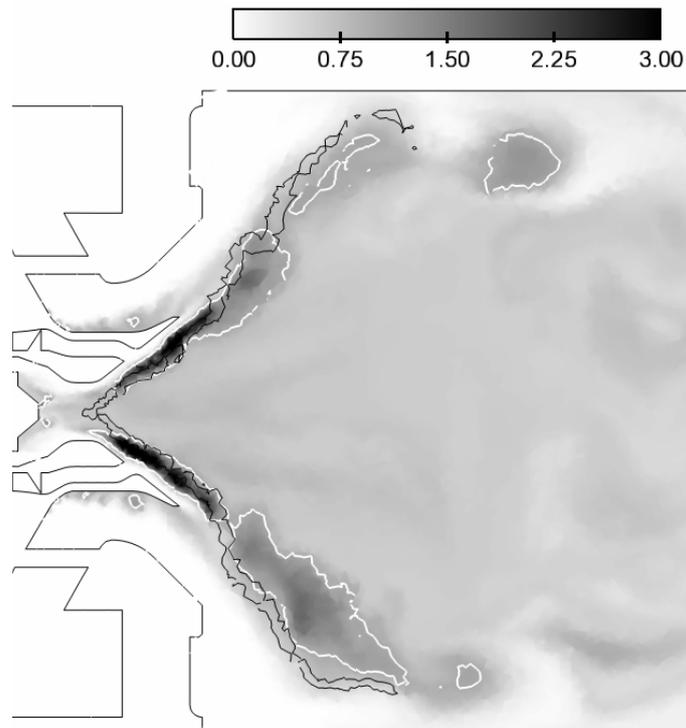


FIG. 6.12 | Champ instantané de richesse ϕ_m , avec une isoligne pour $\phi_m = 1$ (en blanc) et une isoligne de terme source de combustible $\dot{\omega}_F = -200 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ (en noir).

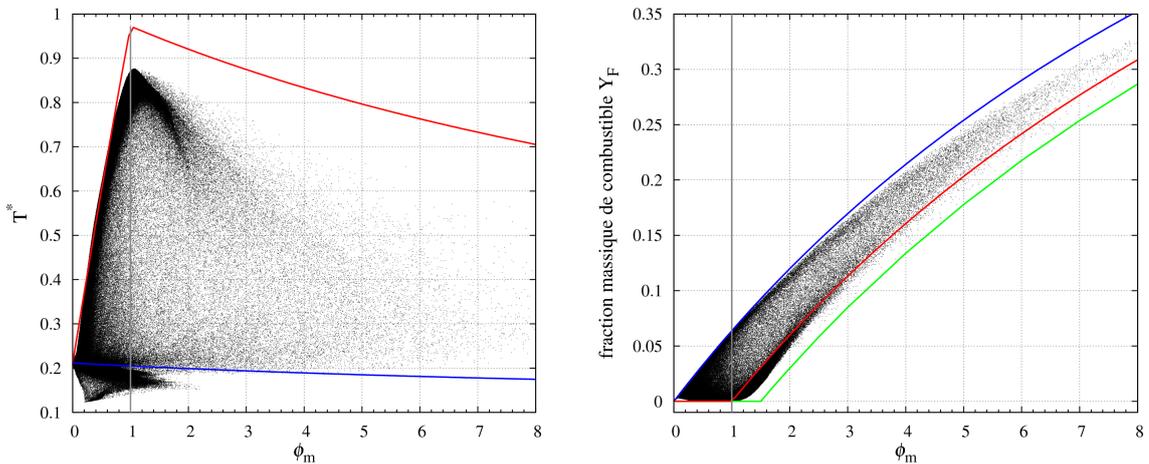
est mise en évidence par l'isoligne $\phi_m = 1$, qui délimite la zone de richesse $\phi_m \geq 1$. L'isoligne $\dot{\omega}_F = -200 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ délimite la zone de réaction. Au niveau de l'étage pilote, les zones prémélangées identifiées sur le champ d'indice de Takeno (figure 6.11a) sont très riches, comme le montre également le champ de Y_F (figure 6.11b), tandis que la combustion en régime de flamme de diffusion a lieu logiquement sur l'isoligne $\phi_m = 1$. À l'étage multipoint, la combustion a lieu complètement en-dehors de la zone riche. Le régime prémélangé pauvre est une volonté de conception qui permet de limiter les émissions de suies produites en mélange riche, et de NO thermique majoritairement produit au voisinage de la stœchiométrie [181, 182]. Cet étage est caractéristique des chambres de combustion étagées, dont la flexibilité leur permet de s'adapter à tous les régimes de vol tout en contrôlant le niveau de leurs émissions polluantes [181].

Si la température est suffisante pour que la combustion ait lieu, le régime pauvre tend à réduire les émissions d'hydrocarbures en sortie en garantissant la mise à disposition d'oxygène. La richesse optimale pour limiter les émissions d'hydrocarbures imbrûlés et de CO est proche de 0,8 d'après Lefebvre et Ballal [181]. Ils expliquent en effet que, pour des richesses plus faibles, le CO apparaît à cause du faible taux d'oxydation associé à des températures de combustion basses, tandis que, pour des richesses plus élevées, l'élévation de la température de flamme augmente le taux d'oxydation du CO mais contribue également à la production de CO par dissociation du CO_2 à partir de

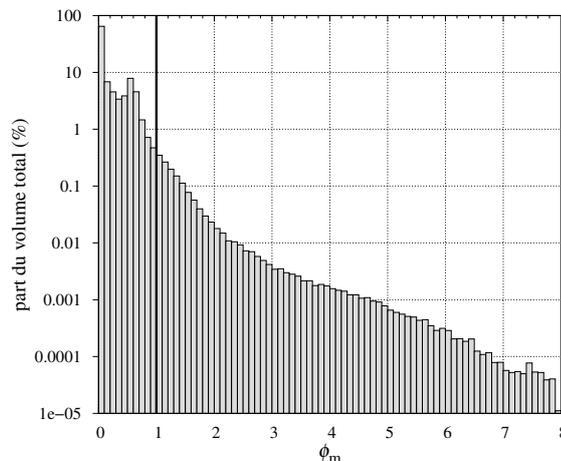
1800 K. Dans cette étude, la combustion à l'étage multipoint a lieu sur l'intervalle de richesse $[0,5;0,95]$, ce qui est plutôt favorable à la limitation des émissions de CO et d'imbrûlés. Il est néanmoins difficile de réduire à la fois les émissions de NO_x , de suies, d'hydrocarbures et de CO de manière optimale, puisque leurs conditions de formation respectives sont assez différentes. La réduction des émissions d'un polluant se fait souvent aux dépens des autres.

Analyse globale de la combustion

Afin de confirmer l'analyse faite sur les champs instantanés dans le plan médian, on post-traite les champs moyens dans l'ensemble du volume de la chambre, en excluant le deuxième convergent et l'atmosphère en aval, pour lesquels l'étude des conditions locales n'est pas pertinente. Il reste alors 4 millions de mailles à partir desquelles on trace en premier lieu les nuages de points de température et de fraction massique de kérosène en fonction de la richesse sur la figure 6.13. On encadre ces tracés dans une



l a | Scatter plot de température en fonction de la richesse locale du mélange | b | Scatter plot de fraction massique de combustible en fonction de la richesse locale du mélange



l c | histogramme de la distribution volumique de richesse

FIG. 6.13 | Analyse des grandeurs moyennes en fonction de la richesse locale du mélange, dans l'ensemble du volume de la chambre.

zone de valeurs accessibles à la phase gazeuse, délimitée par les courbes issues des

hypothèses de mélange pur (courbe bleue) et de chimie infiniment rapide (courbe rouge) dont les équations ont été détaillées en section 1.3.1 du chapitre 1 pour la combustion non prémélangée. La stœchiométrie a par ailleurs été mise en valeur par une ligne verticale à $\phi_m = 1$. On observe que, globalement, les valeurs tracées se trouvent dans la zone de valeurs accessibles, avec néanmoins deux exceptions :

- Des valeurs se trouvent sous la courbe de mélange pur sur la figure 6.13a. Ces mailles contiennent un mélange gazeux à une température inférieure à celle de l'air frais (injecté à $T^* = 0,211$), et à une richesse modérée et majoritairement inférieure à 1. Ces valeurs théoriquement inaccessibles à un mélange pur de réactifs gazeux sont en réalité dues à la présence de kérosène liquide injecté à une température inférieure à celle de l'air frais. En conséquence, le kérosène est chauffé par l'air et s'évapore en prélevant de l'énergie à la phase porteuse.
- Des points sont situés sous la courbe de chimie infiniment rapide sur la figure 6.13b. Comme cette courbe est construite à partir d'une réaction globale, elle ne prend pas en compte les espèces intermédiaires. Pour illustrer ce propos, on trace Y_F à l'équilibre (courbe verte), calculée avec le jeu d'espèces de la cinétique de Franzelli *et al.* [35] utilisée pour la simulation (équations (5.15) et (5.16)), qui inclut le CO comme espèce intermédiaire. On constate un déplacement de la courbe $Y_F > 0$ vers des valeurs de ϕ_m plus élevées. Les points auparavant exclus sont donc bien inclus dans la zone théorique délimitée par cette courbe d'équilibre (courbe verte), plus représentative de la simulation réalisée. Près de la stœchiométrie, la courbe d'équilibre forme un angle saillant tandis que le nuage de points prend une forme arrondie. C'est un effet cinétique (délai temporel), illustré notamment par Veynante et Vervisch [43], qui n'est pas pris en compte par le calcul d'équilibre.

On observe également que des valeurs de richesse élevées (jusqu'à $\phi_m = 8$) sont atteintes dans un petit nombre de cellules. Pour compléter cette analyse, l'histogramme de la figure 6.13c représente la distribution volumique de richesse^(b) dont on ne peut pas rendre compte sur les nuages de points. On constate que le volume concerné par les valeurs de richesse fortes est très faible, tandis que celui à richesse faible est important, et notamment constitué de la partie plenum à richesse nulle. Concernant les mailles où $\phi_m > 0,1$, la majeure partie du volume concerné se situe dans l'intervalle de richesse $\phi_m \in [0,1;0,7]$.

Pour affiner l'analyse et caractériser le régime de combustion, la zone de flamme doit être isolée. Pour établir un critère de sélection des mailles suivant le dégagement de chaleur local $\dot{\omega}_T$, on trace la distribution volumique de richesse pour les mailles remplissant le critère $\dot{\omega}_T \geq \dot{\omega}_{Tc}$, où $\dot{\omega}_{Tc}$ est une valeur seuil choisie à l'aide de la figure 6.14 qui présente les répartitions obtenues pour 4 valeurs de $\dot{\omega}_{Tc}$. Parmi ces valeurs, celle qui convient le mieux est celle pour laquelle on obtient une distribution de richesse s'étendant sur un intervalle proche de l'intervalle $[0,4;2]$ correspondant au domaine d'inflammabilité du mélange. Comme attendu, on constate que plus la valeur du critère $\dot{\omega}_{Tc}$ est élevée, plus l'intervalle de richesse se resserre autour de la stœchiométrie, où le dégagement de chaleur est le plus fort. Parmi les valeurs de $\dot{\omega}_{Tc}$ testées, $\dot{\omega}_{Tc} = 8 \cdot 10^9 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$ semble être le meilleur choix, puisque le volume à richesse $\phi_m < 0,4$ ne représente que 1,5 % environ du volume pris en compte, et celui à richesse $\phi_m > 2$ environ 3 %. On peut de la même manière estimer un critère sur le terme de source de combustible, qui vaut $\dot{\omega}_{Fc} = -200 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$. Cette zone de flamme a précédemment été visualisée sur les figures 6.11b et 6.12.

(b). La distribution volumique de richesse est obtenue par sommation du volume des mailles réparties par intervalles de richesse de largeur 0,1, rapportée au volume total du domaine considéré.

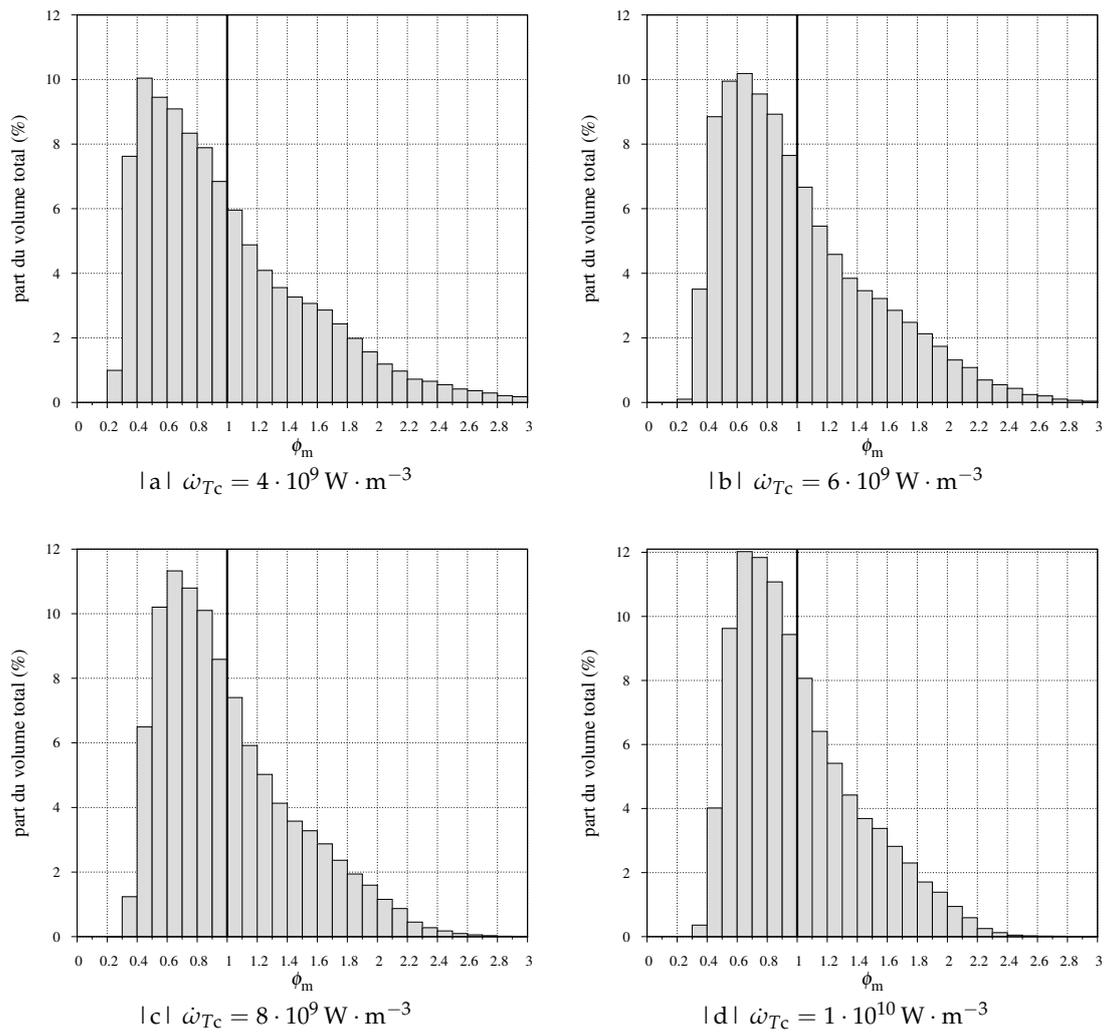


FIG. 6.14 | Distribution volumique de richesse pour une zone de l'écoulement soumise à un critère $\dot{\omega}_{Tc}$ sur $\dot{\omega}_T$.

En restreignant le nuage de points à la zone de flamme, on obtient la figure 6.15a et la répartition en volume associée sur la figure 6.15b. Les points sont colorés suivant le

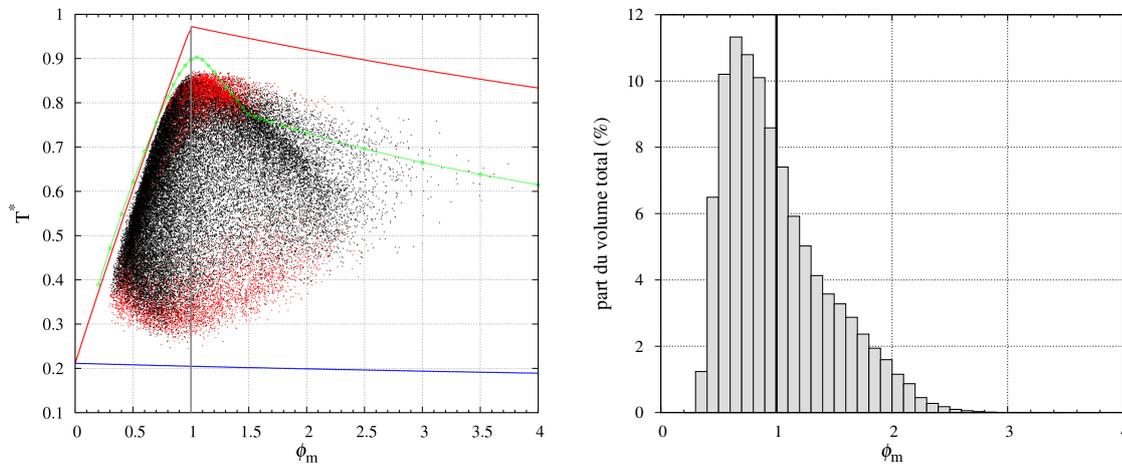


FIG. 6.15 | Analyse restreinte à la zone de flamme : scatter plot de température (à gauche) et histogramme de la distribution du volume (à droite).

signe de l'indice de Takeno, en noir pour le régime de prémélange et en rouge pour le régime de flamme de diffusion. On observe que le régime de prémélange couvre une large gamme de richesse, tandis que le régime de diffusion se situe par définition autour de la stœchiométrie, à haute température. On trouve également de nombreux points à basse température, à la fois en prémélange et en diffusion, qui représentent des zones de combustion avec de forts transferts thermiques contribuant à évacuer le dégagement de chaleur. Cela semblerait dû à la forte convection, d'après les observations reportées dans la section D.2 de l'annexe D. Par ailleurs, la présence du régime de flamme de diffusion sur un large intervalle de richesse est due au caractère binaire de l'indice de Takeno, pour les raisons évoquées plus loin lors de l'analyse de la figure 6.17.

En plus des courbes de mélange pur (courbe bleue) et de chimie infiniment rapide (courbe rouge), l'évolution de la température d'équilibre en fonction de ϕ_m a été tracée (courbe verte sur la figure 6.15a) en estimant une température des gaz frais prenant en compte le mélange kérosène-air^(c), soit $T_{GF}^* = 0,204$, comme pour la courbe d'équilibre de Y_F (figure 6.13b). Dans notre simulation numérique qui prend en compte le CO, on obtient pour $\phi_m > 1$ une température d'équilibre très éloignée de celle correspondant à la chimie rapide, qui la surestime d'environ 29 % pour $\phi_m = 2$. On trouve néanmoins des points au-dessus de la courbe d'équilibre, qui n'est pas totalement représentative des conditions dans la chambre puisque la température des gaz frais varie, notamment en fonction de la proximité de la zone d'évaporation. Par ailleurs, l'histogramme de la figure 6.15b montre que 60 % du volume de la flamme brûle en mélange pauvre ($\phi_m < 1$), tandis que les 40 % restants sont répartis sur l'intervalle $[1; 2,5]$.

Sur la figure 6.16 sont tracés le nuage de points de l'ensemble du domaine considéré, ainsi que la courbe d'équilibre (verte) déjà présentée sur la figure 6.15a. Un contour se dessine sur le nuage de points, différent de celui représenté par la courbe d'équilibre, ce qui montre que les conditions locales sont majoritairement bornées par un état d'équilibre déterminé à partir de conditions de gaz frais variant localement. La courbe

(c). Température des gaz frais estimée à partir de calculs d'équilibre à la richesse du mélange relevée à proximité du bras de mesure, et réalisés de manière itérative afin d'obtenir comme température d'équilibre la température de l'écoulement relevée au même endroit.

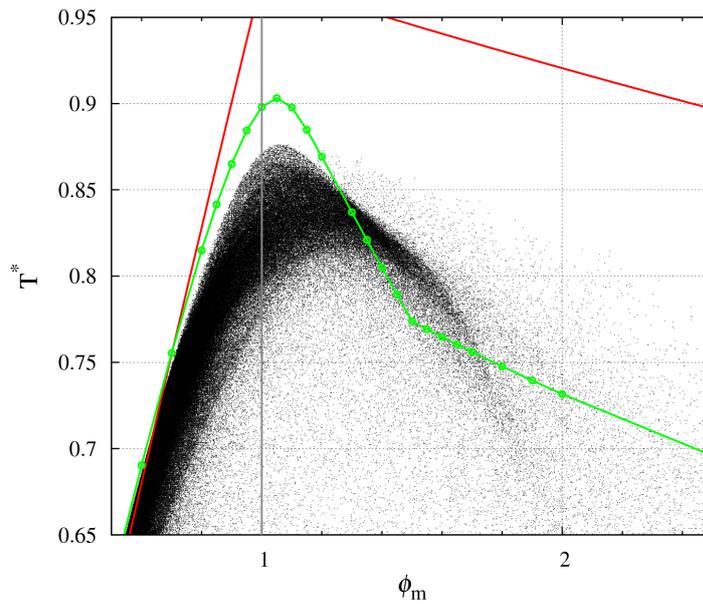


FIG. 6.16 | Détail du scatter plot de température sur l'ensemble du domaine en fonction de la richesse locale du mélange.

d'équilibre construite à partir d'un seul état des gaz frais ne peut donc pas décrire avec précision la limite supérieure de température dans la chambre.

Enfin, pour quantifier la répartition des régimes de combustion dans la flamme, on trace sur la figure 6.17 l'histogramme du dégagement de chaleur cumulé par intervalle de richesse, rapporté au dégagement de chaleur total de la flamme, en distinguant les deux régimes, grâce à l'indice de Takeno. Comme on pouvait le supposer à la vue de la

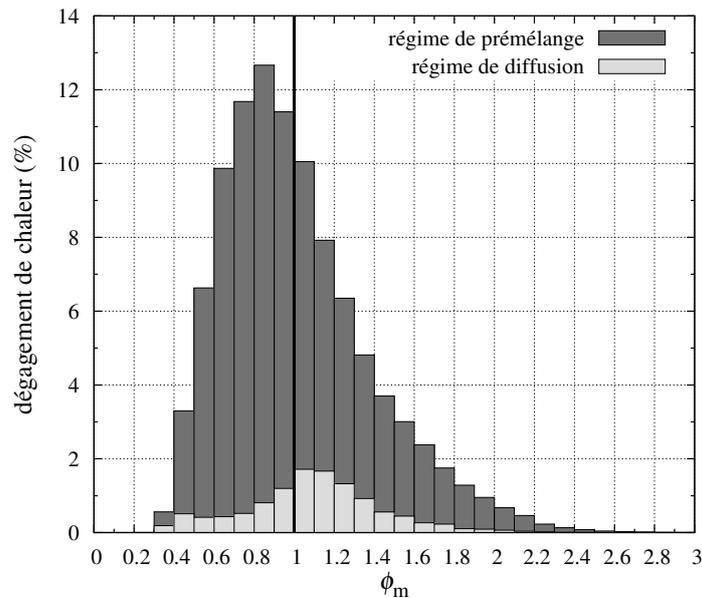


FIG. 6.17 | Histogramme de la distribution de dégagement de chaleur net en fonction de la richesse locale du mélange, avec distinction du régime de combustion.

figure 6.15a, le régime de prémélange est largement dominant avec 88% du dégagement de chaleur total, centré sur l'intervalle de richesse $[0,8;0,9]$, tandis que le régime de diffusion n'en représente que 12%, étalés sur un intervalle de richesse assez large

$\phi_m \in [0,3;1,8]$. Comme les réactifs brûlent théoriquement à richesse 1 en régime de flamme de diffusion, on peut mettre en cause l'utilisation binaire de l'indice de Takeno, basée sur le signe du produit scalaire des gradients des réactifs. Sa faiblesse réside dans le fait que les gradients des réactifs sont rarement complètement colinéaires. Il est possible que le régime soit considéré à tort comme celui de flamme de diffusion dans des mailles où les gradients des réactifs sont approximativement orthogonaux.

Conclusion

On a caractérisé dans cette section 6.1.1.6 les régimes de combustion observés numériquement dans la chambre TLC. L'analyse dans le plan médian du l'indice de Takeno, de la richesse et des taux de combustion et d'évaporation du kérosène, ainsi que l'analyse globale menée sur les répartitions de température et de fraction massique de combustible en fonction de la richesse ont permis d'identifier deux zones distinctes dans lesquelles les phénomènes physiques sont très différents. Au niveau de l'étage pilote, la combustion est mixte, à la fois prémélangée riche et en flamme de diffusion, avec un spray de gouttes de kérosène confiné et très dense. En revanche, dans l'étage multipoint, l'écoulement fortement swirlé et l'injection distribuée permettent la formation d'un champ de gouttes de kérosène de faible densité qui s'évaporent rapidement avant de brûler, ce qui induit une combustion prémélangée pauvre. Dans ces circonstances, la combustion est globalement partiellement prémélangée, avec une domination du régime de prémélange qui dégage près de 90 % de l'énergie.

6.1.2 Comportement instationnaire de l'écoulement

On s'attache à décrire dans cette section l'évolution instationnaire de l'écoulement, pour rendre compte des phénomènes instationnaires en sortie de l'injecteur, que l'on peut observer grâce à l'approche LES. Pour cela, la figure 6.18 présente le champ de température instantané et l'isoligne de taux de réaction de kérosène $\dot{\omega}_F = -200 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ (en blanc) dans le plan médian, pour 6 instants différents espacés d'une durée de 48 ms, basée sur le temps caractéristique de détachement des tourbillons. Pour l'observation d'un écoulement swirlé, il manque évidemment la troisième dimension sur cette figure. Pour éviter de compliquer l'analyse, on passera outre en restant prudent sur l'interprétation de ces résultats, notamment dans la partie aval de l'écoulement où l'on peut observer sur le plan médian « l'apparition » ou la « disparition » de zones chaudes dues à des mouvements convectifs dans la troisième dimension de l'espace. Les flèches blanches permettent de localiser les zones de l'écoulement évoquées dans le paragraphe suivant.

En parcourant les figures 6.18a à 6.18f, on observe que la zone de flamme reste stable au cours du temps dans sa partie amont conique, de l'étage pilote jusqu'en sortie de l'étage multipoint. En aval, elle fluctue beaucoup plus à l'endroit où l'on observe des détachements tourbillonnaires de poches de gaz chauds. On peut par exemple suivre la poche chaude qui apparaît détachée sur la partie supérieure de la figure 6.18a, en bout de flamme, et qui est convectée en aval sur les figures 6.18b et 6.18c. Les détachements s'enchaînent périodiquement : on en observe l'amorce en partie supérieure de la figure 6.18b, qui se poursuit sur la figure 6.18c, et l'on retrouve ce même enchaînement en partie inférieure des figures 6.18c et 6.18d, ou en partie supérieure des figures 6.18e et 6.18f. Les poches chaudes se mélangent progressivement en aval en captant de l'air frais provenant des films de refroidissement et des vrilles radiales, comme observé en partie inférieure de la figure 6.18d.

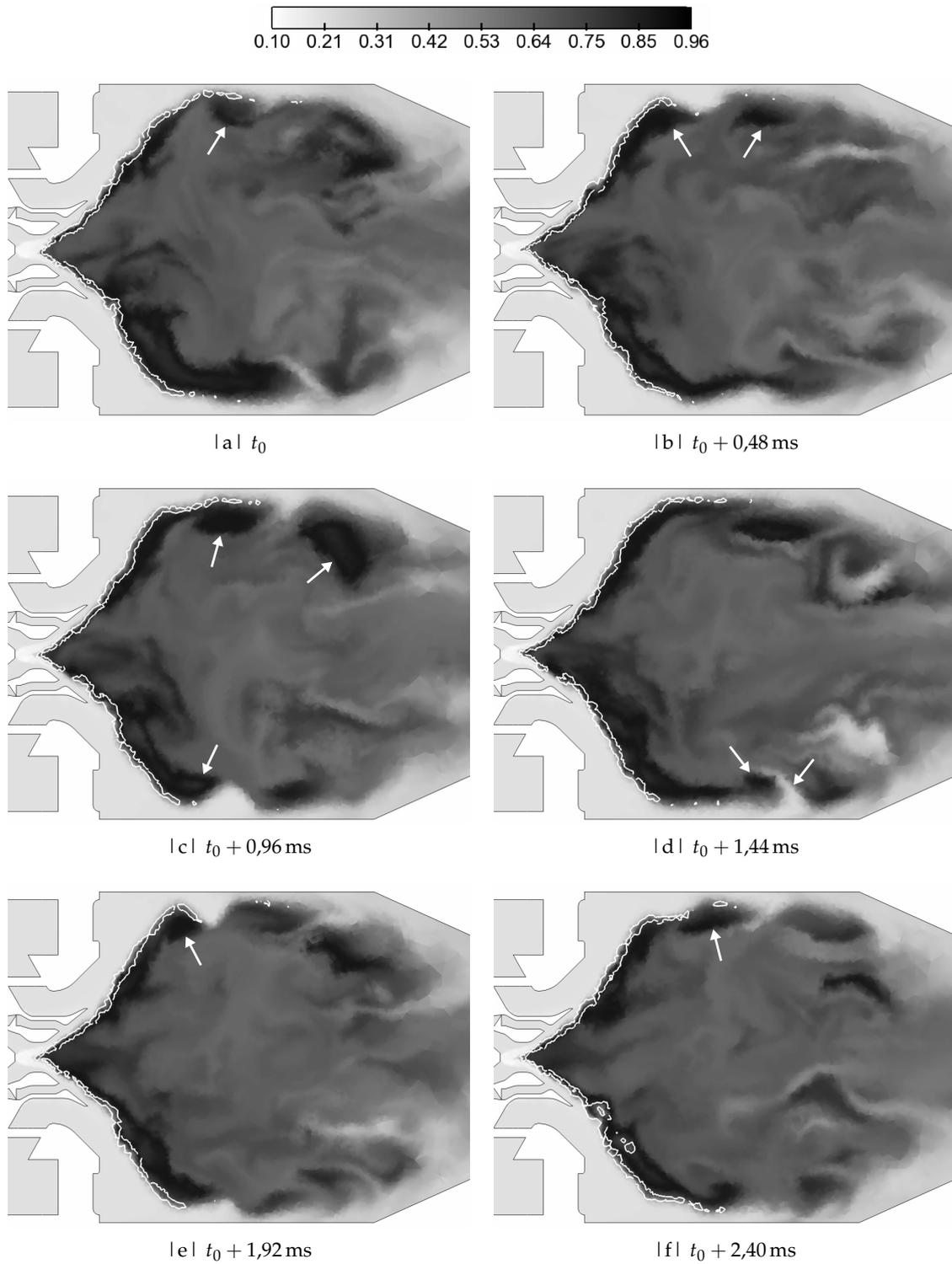


FIG. 6.18 | Évolution instationnaire du champ de température adimensionnée et de l'isoligne (en blanc) de terme source de combustible $\dot{\omega}_F = -200 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.

Ces observations sont importantes pour la modélisation du couplage instationnaire mécanique des fluides – transferts radiatifs. Elles nous renseignent sur les phénomènes qui seront sensibles à la fréquence temporelle du couplage.

6.1.3 Comparaison mesures - simulation

On confronte les résultats décrits dans les sections précédentes aux mesures réalisées sur la chambre TLC. Pour cela on exploite les mesures de température et la caractérisation des concentrations de kérosène et de radical OH décrites en section 5.1.3.1.

6.1.3.1 Profils de température et de vitesse

Les profils de température ont d'abord été tracés à l'emplacement des profils expérimentaux localisés dans la chambre sur la figure 5.8. On distingue sur la figure 6.19 les profils moyens obtenus avec l'approche LES, ceux issus de la simulation RANS réalisée pour l'initialisation du calcul LES, la température d'équilibre à la richesse globale de la chambre et les points expérimentaux avec l'incertitude de mesure associée. Celle-ci est décrite par les expérimentateurs [162] comme égale à 5 % à $T^* = 0,107$, décroissante jusqu'à 3 % à $T^* = 0,607$, puis constante à plus haute température. On suppose ici une décroissance linéaire de l'incertitude sur l'intervalle $T^* \in [0,107; 0,607]$. Le profil amont, situé en $x_e = 20 \text{ mm}$ ^(d), montre une bonne correspondance de la simulation LES avec les mesures situées dans la recirculation, la flamme étant située pour cette abscisse en $y > 0,03 \text{ m}$, ce qui la rend inaccessible aux mesures optiques limitées par les dimensions des hublots. Cependant, les prédictions sont bien moins bonnes sur le profil situé juste en aval et sur les suivants, avec une surestimation de 29 à 41 % des températures mesurées. Contrairement à la simulation, les mesures se rapprochent à moins de 10 % de la température d'équilibre $T_{\text{eq}}^*(\phi_g)$ sur les trois profils aval, ce qui indique un bien meilleur mélange de l'écoulement dans la recirculation dans l'expérience que dans la simulation. Pour compléter l'analyse, les fluctuations des mesures liées à la turbulence ont été tracées sous la forme d'écart types et confrontés sur la figure 6.20 aux valeurs RMS obtenues en LES avec l'équation (1.50) (section 1.2.3). L'écart type expérimental apparaît élevé sur le profil en $x_e = 20 \text{ mm}$, alors que la simulation montre une fluctuation de température moins élevée de moitié, alors que sur les profils aval, les écart types expérimentaux sont moins élevés et mieux reproduits par le calcul.

Il est assez étonnant d'observer entre les mesures en $x_e = 20 \text{ mm}$ et celles en $x_e = 29 \text{ mm}$ une baisse de 25 à 30 % de la température dans la recirculation, sur une distance de 9 mm. À l'inverse, entre chacun des trois profils aval, la température mesurée évolue d'au plus 5 %. En outre, les fortes fluctuations de l'écoulement en $x_e = 20 \text{ mm}$ ont conduit à écarter 40 % des mesures instantanées qui présentaient un rapport signal/bruit trop faible [162]. En revanche, pour les autres profils, 100 % des mesures ont pu être conservées. En conséquence, il semble qu'on puisse accorder plus de confiance aux profils en $x_e = 29, 51$ et 65 mm qu'à celui en $x_e = 20 \text{ mm}$.

Finalement, sur ces trois profils, les fluctuations de température sont plutôt bien reproduites mais on ne peut rien en conclure car les valeurs moyennes sont loin des mesures, tant avec l'approche LES qu'avec l'approche RANS qui se rapproche de la LES sur l'axe, mais donne une évolution radiale différente. On compare également les champs de vitesse obtenus en RANS et en LES, sur les figures 6.21 et 6.22. On remarque que la vitesse axiale RANS est très éloignée de celle donnée par la LES,

(d). L'abscisse x_e a pour origine le fond de chambre, comme repéré sur la figure 5.8.

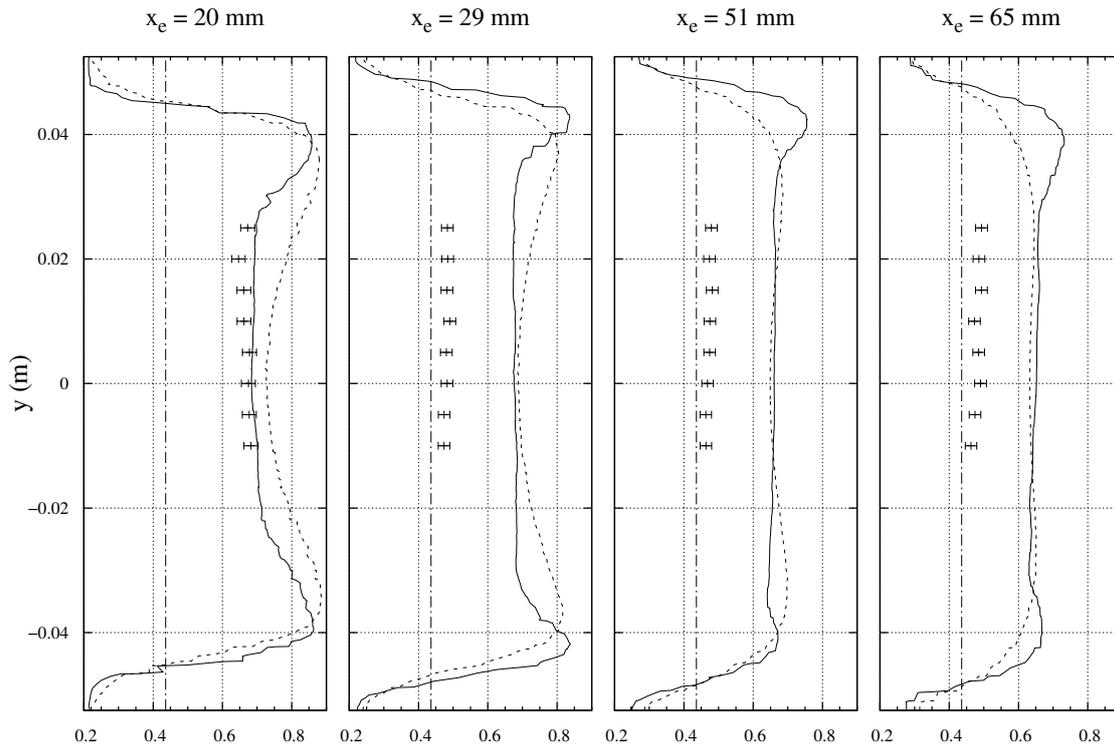


FIG. 6.19 | Comparaison des profils de température moyenne adimensionnée obtenus en LES (—) et en RANS (----) avec les mesures CARS (barres d'erreur) et la température d'équilibre à la richesse globale de la chambre $T_{eq}^*(\phi_g)$ (-·-·-·).

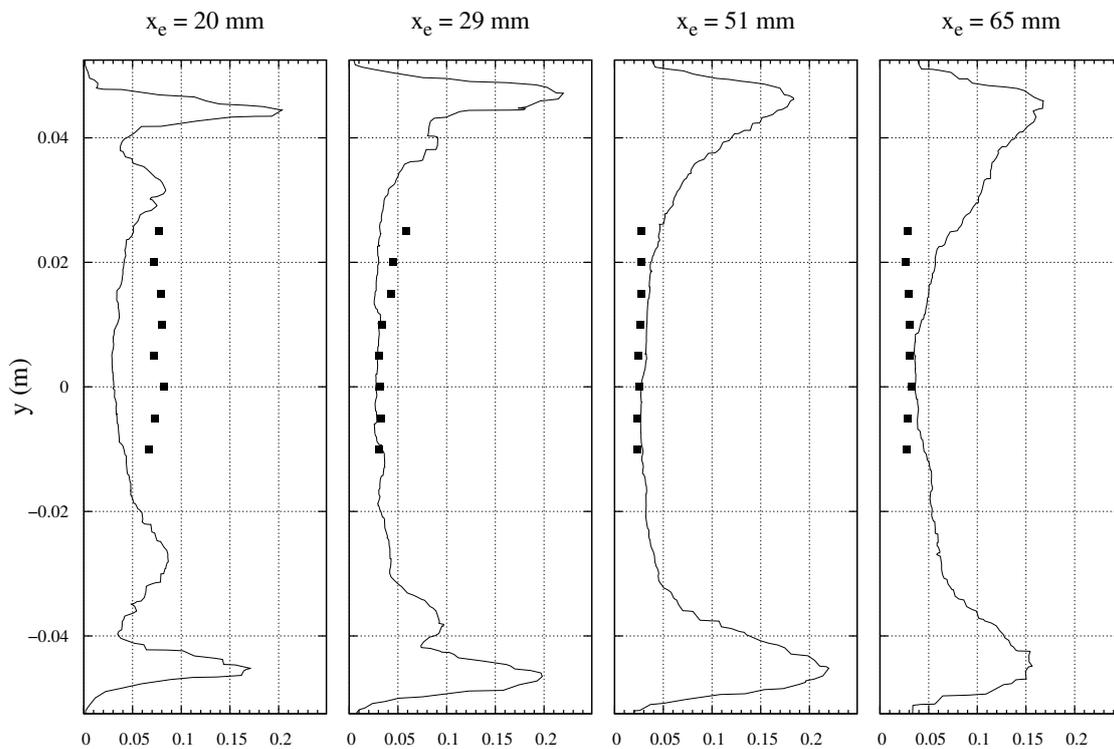


FIG. 6.20 | Comparaison des profils des écarts types de température adimensionnée obtenus en LES (trait plein) et expérimentalement (carrés).

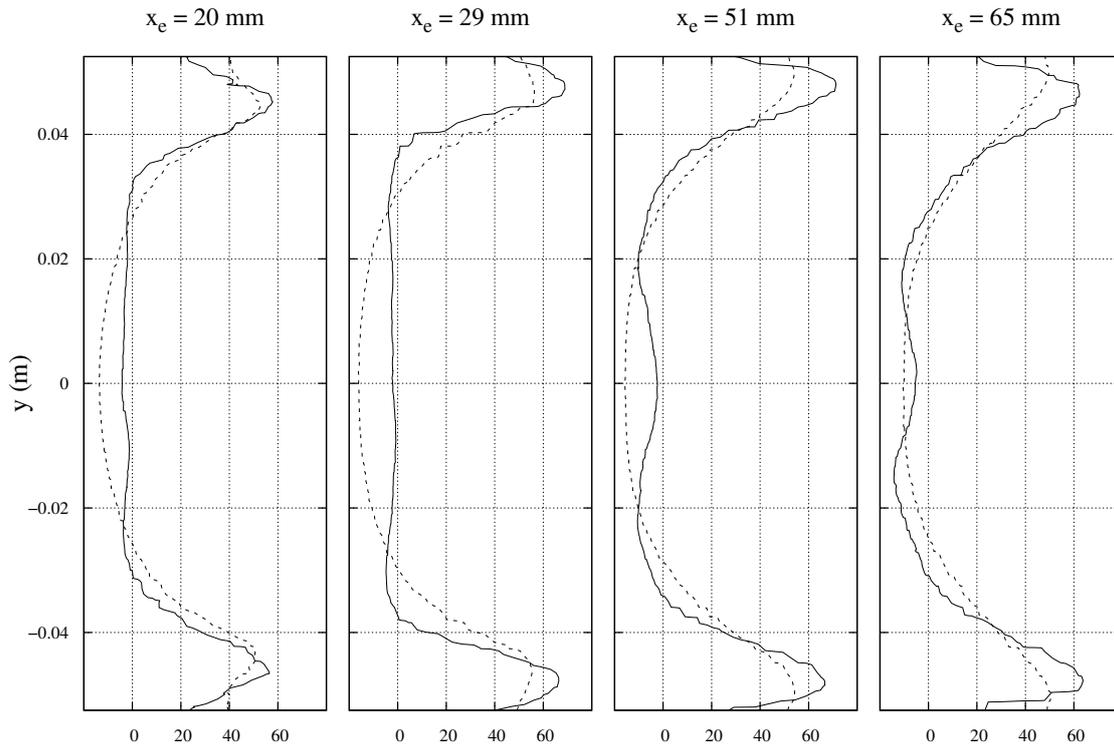


FIG. 6.21 | Comparaison des profils de vitesse axiale moyenne obtenus en LES (—) et en RANS (----).

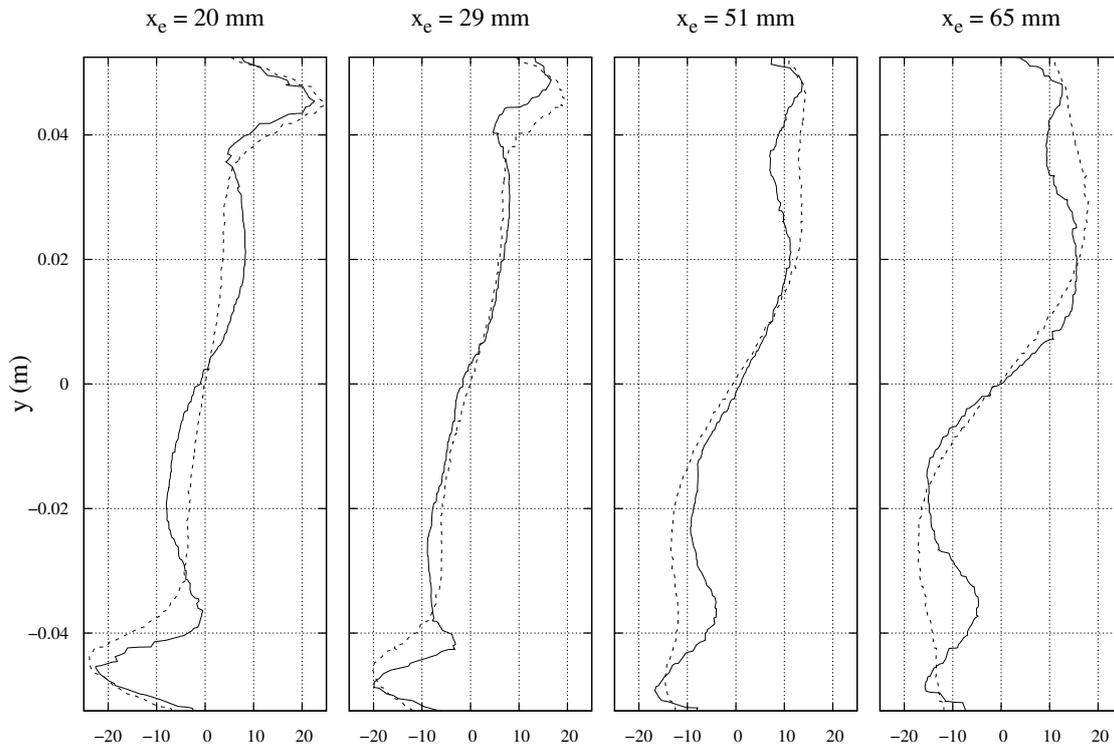


FIG. 6.22 | Comparaison des profils de vitesse azimutale moyenne obtenus en LES (—) et en RANS (----).

avec une surestimation de la vitesse en proche paroi allant jusqu'à 150 %, et une large sous-estimation dans la zone de vitesse négative à proximité de l'axe. Pour la vitesse azimutale, l'approche RANS suit mieux la LES à proximité de l'axe, dans l'ARZ, et donne des valeurs de vitesse supérieures à celles de la LES dans la zone de forte vitesse axiale. Les écarts de température entre RANS et LES à cet endroit semblent donc liés aux écarts sur les champs aérodynamiques. Ces observations démontrent ici l'intérêt de l'approche LES, qui améliore la précision des prédictions du champ aérothermique, par rapport au calcul RANS tel qu'on peut le mettre en œuvre dans CEDRE. Pour améliorer les prédictions RANS, il serait intéressant de tester un modèle de turbulence adapté aux effets de swirl, tel que le modèle $k - \omega$ EARSM, ainsi qu'un modèle de combustion turbulente apte à traiter à la fois les régimes de flamme de diffusion et de prémélange.

6.1.3.2 Structure de flamme et champ de kérosène

Il est également intéressant de comparer les résultats des calculs LES aux champs — non quantitatifs — obtenus par la méthode PLIF (*Planar Laser-Induced Fluorescence*) appliquée au radical OH et à une espèce aromatique représentative de la vapeur de kérosène. Le radical OH est produit dans la flamme et en grande partie rapidement oxydé, ce qui en fait un traceur pour la flamme dont le champ peut être comparé à celui du terme de consommation de la vapeur de kérosène ou du dégagement de chaleur obtenus numériquement. Les mesures présentées n'ont pas été corrigées par les expérimentateurs pour tenir compte de l'absorption progressive du faisceau laser le long de sa trajectoire, à l'exception de deux d'entre-elles (précisées plus loin). On a donc pour toutes les autres une dissymétrie d'intensité sur les champs présentés, entre haut et bas sur le plan médian, et entre gauche et droite sur les plans transversaux, dissymétrie qui ne correspond pas à une dissymétrie de l'écoulement.

La partie gauche de la figure 6.23 présente le champ instantané obtenu par PLIF-OH ainsi qu'une isoligne (en rouge) délimitant la zone de présence de vapeur de kérosène obtenue par PLIF-kérosène, issu de [183]. On observe sur le champ de OH une

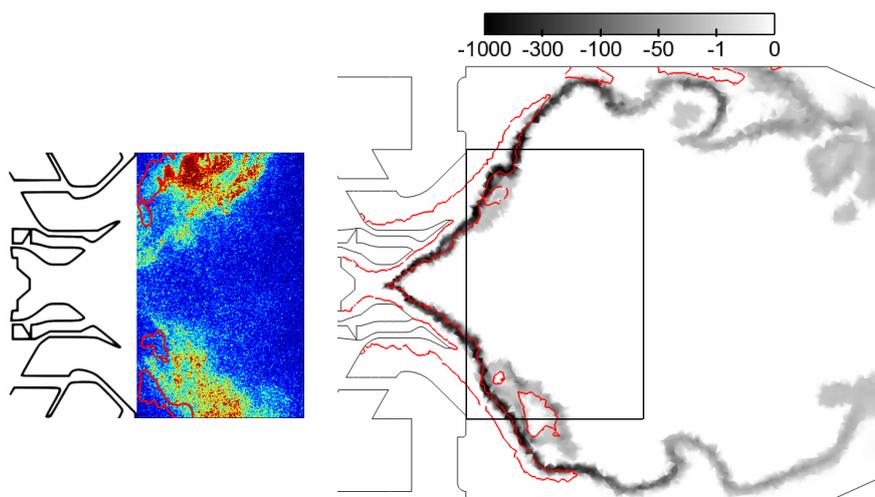


FIG. 6.23 | Champ instantané mesuré par PLIF-OH avec l'isoligne délimitant la zone de présence de vapeur de kérosène, mesurée par PLIF-kérosène (à gauche), comparé au champ instantané de $\dot{\omega}_F$ calculé en LES, avec une isoligne $Y_F = 10^{-2}$ délimitant la zone de Y_F non nulle (à droite).

structure de flamme double, avec une partie interne liée à l'étage pilote et une partie plus externe produite par l'étage multipoint. On a une bonne corrélation spatiale entre

la concentration de kérosène et la position du front de flamme, ce qui indique que les composés aromatiques présents dans le kérosène et mis en évidence par fluorescence ont bien le même comportement que le kérosène lui-même. Ces mesures sont comparées à un champ instantané de terme source de kérosène $\dot{\omega}_F$ et à une isoligne $Y_F = 10^{-2}$ représentés sur la partie droite de la figure 6.23. Le cadre noir représente la zone visible par le hublot, afin de restreindre la comparaison à la zone commune mesures-simulation. Le front de flamme est beaucoup plus fin dans la simulation, mais on retrouve la structure double au niveau de zones de $\dot{\omega}_F$ de faible intensité. On ne peut poursuivre la comparaison puisqu'elle dépend essentiellement du choix de l'instantané, mais on retrouve globalement les caractéristiques phénoménologiques des mesures.

Les champs moyens sont comparés de la même manière sur la figure 6.24, mais ici les mesures sont corrigées pour tenir compte de l'absorption du laser. Le front de flamme

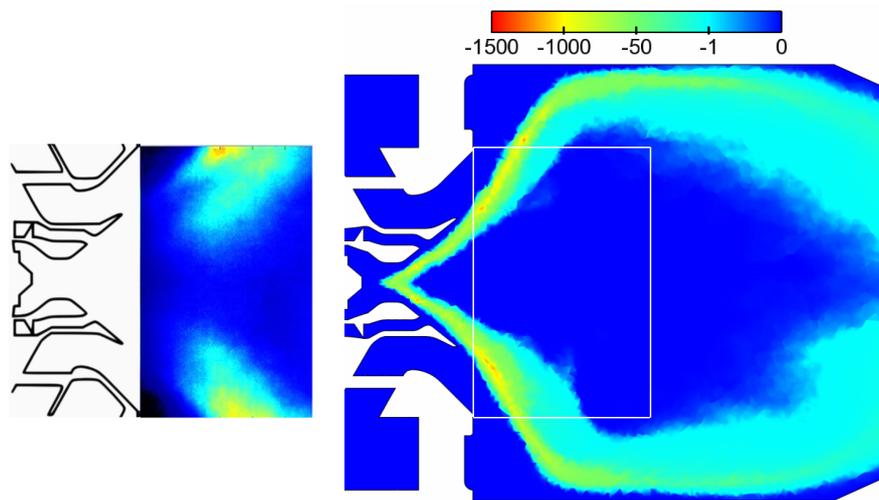
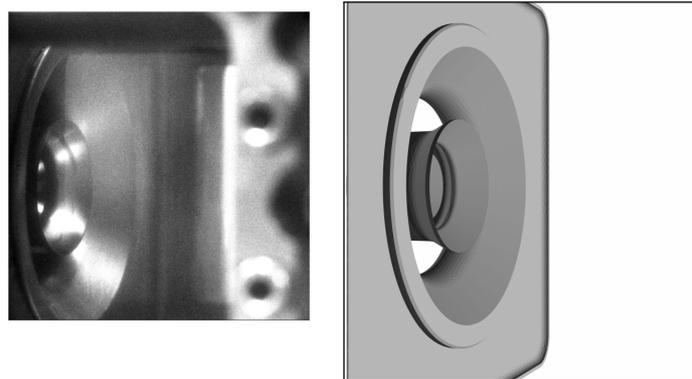


FIG. 6.24 | Champ moyen mesuré par PLIF-OH issu de [163] (à gauche), comparé au champ moyen de $\langle \dot{\omega}_F \rangle$ calculé en LES (à droite).

expérimental apparaît plus épais, ce qui doit être lié à une plus grande dispersion du traceur. La localisation du front de flamme est bien reproduite par la simulation, avec néanmoins un angle de la flamme avec l'axe de la chambre plus ouvert dans la simulation.

On peut poursuivre la comparaison sur des plans transversaux à partir des figures 6.25 et 6.26, qui présentent respectivement les champs instantanés et moyens mesurés (issus de [184]) ainsi que leur équivalent simulé, présenté de la même manière. On retrouve expérimentalement la structure de flamme double sur les plans situés à 4 et 8 mm du fond de chambre. Le champ mesuré à $d = 13$ mm est incomplet car limité par la taille des hublots dans ses parties supérieure et inférieure. Le diamètre de la flamme apparaît plus grand dans la simulation, et le calcul ne reproduit pas clairement la structure de flamme double, ce qui peut indiquer que la flamme pilote est plus courte dans le calcul, n'étant alors pas visible sur ces plans.

Il est également intéressant de comparer les champs moyens de concentration de kérosène mesurés par fluorescence avec ceux de fraction massique de kérosène obtenus par la simulation. Sur le plan médian, la figure 6.27 montre que le champ de kérosène expérimental provient quasi-exclusivement de l'étage multipoint. La simulation est un peu différente puisqu'un jet de kérosène issu de l'étage pilote est aussi visible dans la fenêtre de mesure, ce qui épaissit la zone de présence du kérosène. Notons que les mesures sur la figure 6.27 tiennent compte de l'absorption progressive du laser. La



|a| Angle de vue de l'injecteur

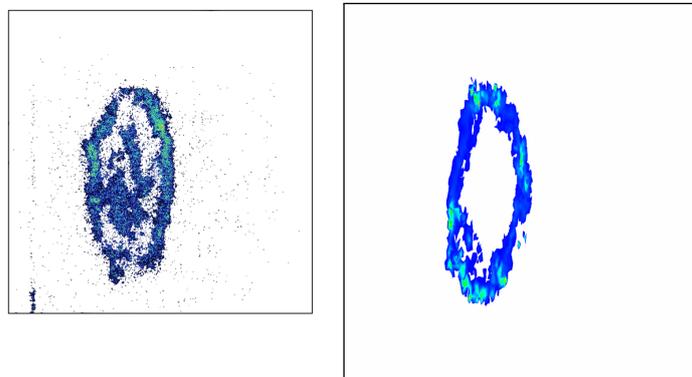
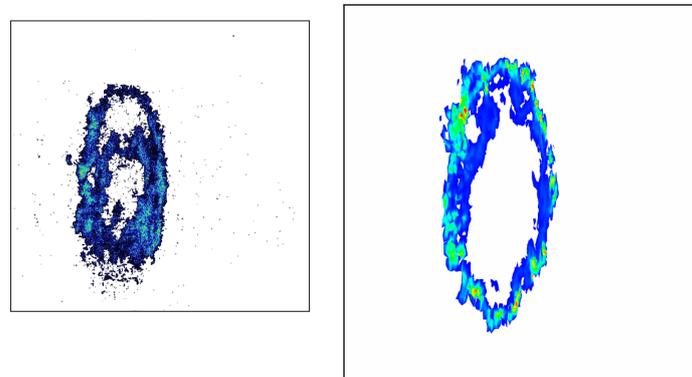
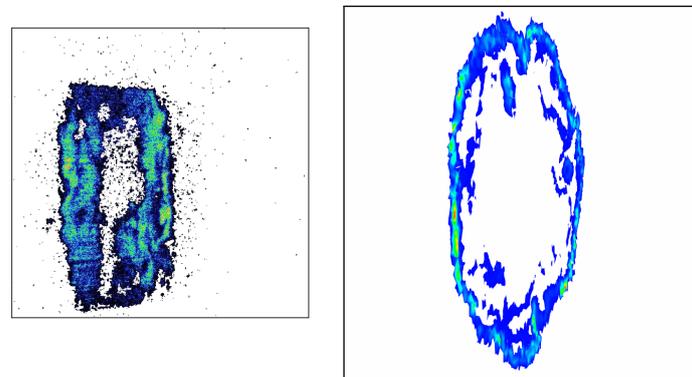
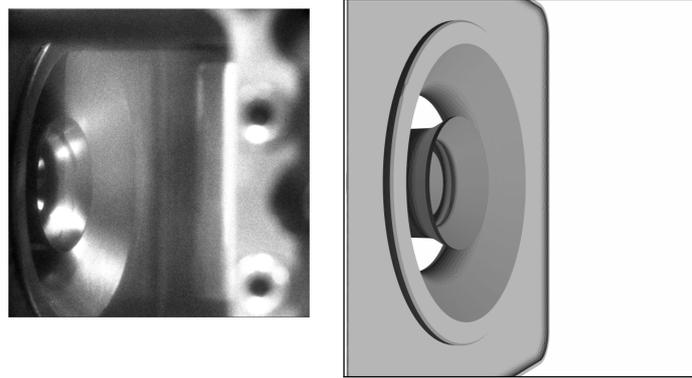
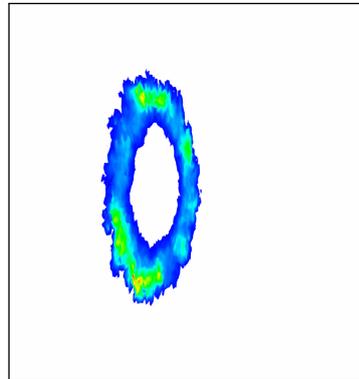
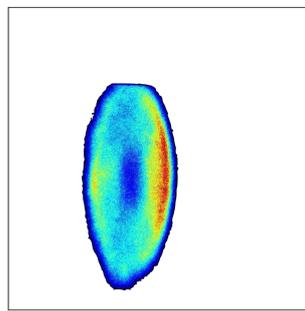
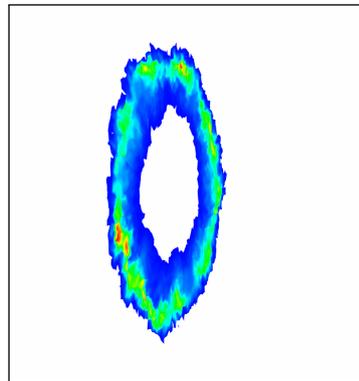
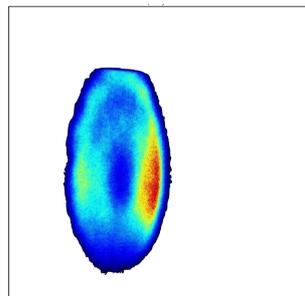
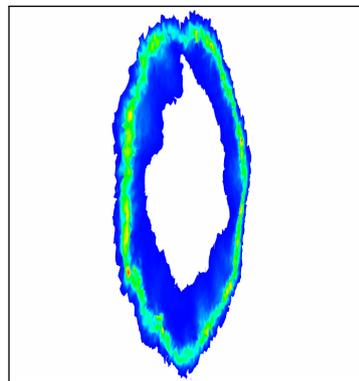
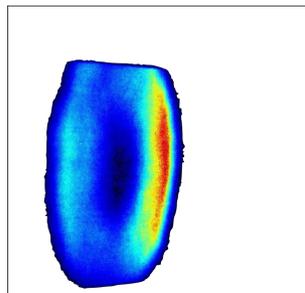
|b| $d = 4 \text{ mm}$ |c| $d = 8 \text{ mm}$ |d| $d = 13 \text{ mm}$

FIG. 6.25 | Comparaison entre mesures instantanées par PLIF-OH (1^{re} colonne) et champ instantané LES de ω_F (2^e colonne), dans des plans transversaux.



|a| Angle de vue de l'injecteur

|b| $d = 4 \text{ mm}$ |c| $d = 8 \text{ mm}$ |d| $d = 13 \text{ mm}$ FIG. 6.26 | Comparaison entre mesures moyennes par PLIF-OH (1^{re} colonne) et champ moyen LES de $\langle \dot{\omega}_F \rangle$ (2^e colonne), dans des plans transversaux.

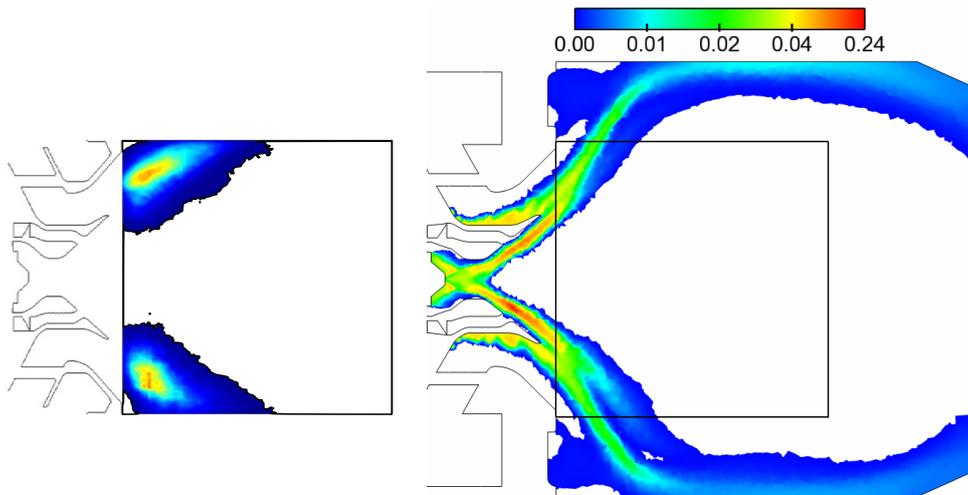


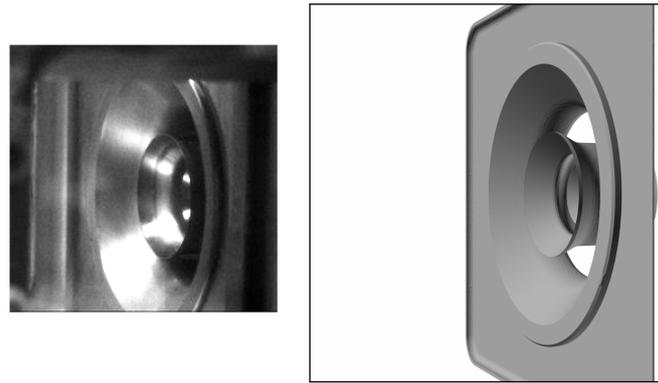
FIG. 6.27 | Champ moyen mesuré par PLIF-kérosène issu de [163] (à gauche), comparé au champ moyen de Y_F calculé en LES (à droite).

figure 6.28 permet de comparer les mêmes champs sur des plans transversaux : la zone de présence de vapeur de kérosène obtenue numériquement semble également plus épaisse que celle obtenue expérimentalement.

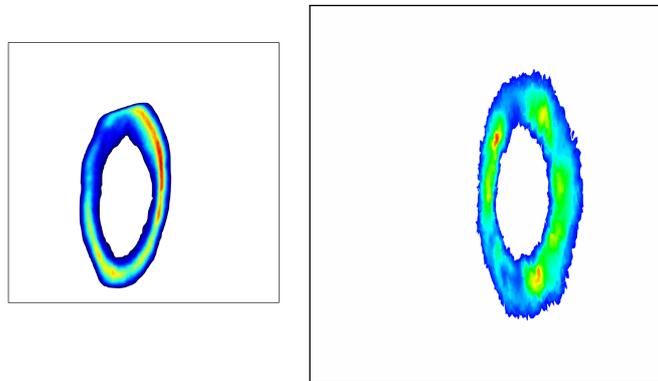
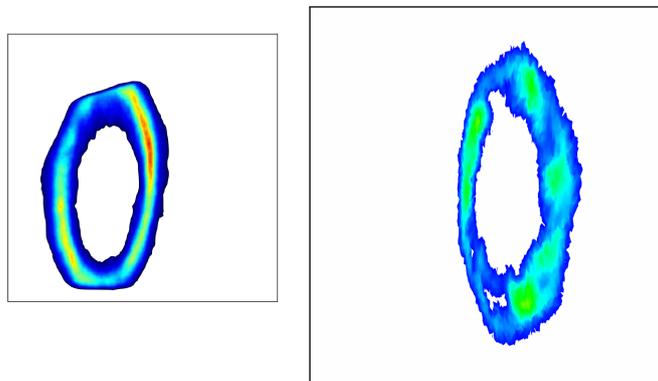
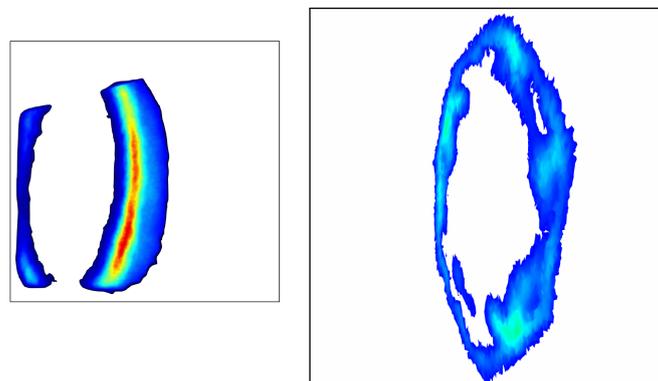
6.1.4 Conclusion

Pour récapituler ces comparaisons entre mesures et simulation, on a constaté que les calculs surestiment fortement la température dans la recirculation, de l'ordre de 30 %. La comparaison menée sur la structure de flamme et le champ de vapeur de kérosène fait apparaître des écarts moins significatifs, même si la comparaison reste qualitative. On a observé que la flamme se situe dans la même zone de l'écoulement, avec une ouverture légèrement plus importante de la flamme calculée. On a relevé des différences au niveau de l'étage pilote, où la flamme est plus courte et le kérosène consommé moins rapidement dans la simulation. Ces écarts soulignent un défaut de modélisation au niveau de l'étage pilote. Les caractéristiques de l'injecteur pilote et du spray de kérosène injecté sont en effet mal connues, et son confinement au centre de l'injecteur augmente le risque d'interaction de la phase liquide avec les parois de l'injecteur, phénomène mal modélisé dans cette étude.

Notons ici que des tests ont été réalisés, en approche RANS pour des raisons de coût, et en utilisant des conditions aux limites légèrement différentes de celles mentionnées en section 5.3.2, afin d'évaluer l'influence des caractéristiques de l'injection pilote sur la température dans la recirculation. En faisant varier séparément le diamètre des gouttes, l'angle du cône d'injection, la vitesse d'injection des gouttes ainsi que leur température d'injection, des variations de l'ordre de 3 % tout au plus ont été constatées sur le profil de température situé à 65 mm. Ces tests indiquent que les incertitudes sur les conditions d'injection des gouttes de l'injecteur pilote ne sont pas la cause première des écarts de température relevés précédemment.



|a| Angle de vue de l'injecteur

|b| $d = 4$ mm|c| $d = 8$ mm|d| $d = 13$ mmFIG. 6.28 | Comparaison entre mesures moyennes par PLIF-kérosène (1^{re} colonne) et champ moyen LES de Y_F (2^e colonne), dans des plans transversaux.

6.2 MODIFICATION *ad hoc* DE LA SIMULATION ET MODÉLISATION DE LA FORMATION DES SUIES

L'objectif de notre travail est la simulation numérique instationnaire des écoulements réactifs en prenant en compte les transferts radiatifs et la formation des suies. Il est peu pertinent de simuler les transferts radiatifs et la formation des suies dans un écoulement dont la température est surestimée de 30 %, car ces phénomènes sont fortement dépendants des niveaux de température et un tel calcul ne permettrait pas d'estimer correctement l'effet du rayonnement dans un foyer aéronautique. Après avoir émis des hypothèses sur les causes possibles de ces écarts de température en section 6.2.1, on propose en section 6.2.2 une modification *ad hoc* destinée à rapprocher la simulation des niveaux de température expérimentaux. Enfin, on peut modéliser dans ces conditions la formation des suies, analyser les différents résultats obtenus, et les comparer aux mesures disponibles, en section 6.2.3.

6.2.1 Intérêt, détails et limitations des modifications apportées

Afin d'expliquer les écarts de température entre la simulation et les mesures, observés dans la section 6.1, on cherche d'abord à estimer la part de ceux-ci due aux transferts radiatifs, qui ne sont pas pris en compte par le calcul réalisé. On met ensuite en évidence le problème de mélange qui apparaît dans les résultats présentés en section 6.1, et des hypothèses sont émises sur ses causes possibles.

6.2.1.1 Estimation de l'effet du rayonnement

Pour comparer les mesures de température aux valeurs calculées sans prendre en compte le rayonnement, on doit majorer les mesures de l'effet des transferts radiatifs. Cet effet est estimé en se basant sur l'état de l'art, détaillé dans le chapitre 7.

Mehta *et al.* [6] ont observé une baisse de 300 K due au rayonnement pour une flamme C_2H_4 /air à environ 1600 K avec une charge en suies $f_v \simeq 1,3 \cdot 10^{-6}$. Sur une flamme C_2H_2 /air moins chaude (~ 1000 K) mais davantage chargée en suies ($f_v \sim 10^{-5}$), Chandy *et al.* [19] ont observé une baisse d'environ 350 K due au rayonnement. Les travaux de Gonçalves dos Santos *et al.* [17] et de Poitou [175] ont montré que le rayonnement induit une baisse de température comprise entre 100 et 200 K dans une flamme C_3H_8 /air prémélangée ($\phi = 1$) à une température de l'ordre de 2100 K, et pratiquement dépourvue de suies. La flamme de la chambre TLC se rapproche plutôt de la flamme étudiée par Gonçalves dos Santos *et al.* [17] et de Poitou [175], pour sa faible charge en suies et sa température élevée. On estime donc l'effet du rayonnement à une diminution de température d'environ 100 K, soit 4 à 5 fois moins que les écarts relevés entre le calcul et les mesures. Les transferts radiatifs ne suffisent donc pas à expliquer ces écarts, et il est nécessaire d'isoler d'autres causes possibles pouvant les expliquer.

6.2.1.2 Mise en évidence du problème de mélange

Pour vérifier l'état du mélange entre l'air frais et les gaz brûlés dans la chambre, on se place en un point représentatif des conditions des gaz brûlés dans la chambre, et on relève, à partir des champs moyens obtenus en LES, les valeurs de température et de richesse reportées dans la première colonne du tableau 6.1. Pour simplifier le problème, on suppose que les gaz brûlés ont atteint l'état d'équilibre, ce qui est valable à condition de choisir un point assez en aval dans la chambre. En réalisant des calculs d'équilibre, on peut remonter à la température des gaz frais T_{GF} à partir de la température des gaz

brûlés, de manière dichotomique. On supposera T_{GF} être une donnée du problème dans la suite du raisonnement.

		Valeurs LES	Valeurs déduites de la mesure de T
T	(K)	1825	1450
P	(bar)	9	9
T_{GF}	(K)	552	552
ϕ_m		0,551	0,367

TAB. 6.1 | Évaluation de données à l'équilibre, à l'endroit considéré de l'écoulement.

D'après la section précédente, on admet que notre simulation ne prenant pas en compte le rayonnement devrait donner une température égale à la température mesurée majorée de 100 K, soit 1450 K. En considérant une telle température, on peut remonter à la richesse du mélange à l'équilibre (2^e colonne du tableau 6.1), qui révèle que la richesse obtenue dans la simulation est localement surestimée de 50 %, ce que l'on peut assimiler à une surestimation du rapport des débits $\dot{m}_F / \dot{m}_{air}$ d'après la formule (1.54). Plusieurs explications sont possibles. Le calcul montre que seules les lignes de courant issues du 1^{er} étage de vrilles axiales atteignent la recirculation (voir section 6.1.1.3), le reste de l'écoulement ne se mélangeant pas avec les gaz contenus dans l'ARZ. La surestimation de la richesse dans l'ARZ peut dans ce cas provenir de la mauvaise reproduction de l'aérodynamique de l'écoulement, en particulier du mélange des films de refroidissement avec l'ARZ. Il peut également s'agir d'une erreur dans la répartition des débits entre l'injecteur et les deux films, qui est décisive dans le cas où les films de refroidissement ne se mélangent pas avec l'ARZ. Pour appuyer ces deux hypothèses, les points suivants peuvent être évoqués :

- (i) Le maillage, qui reste assez grossier dans les vrilles (voir figures 5.13 et 5.14), peut influencer sur le calcul des pertes de charges dans les vrilles, et donc sur la topologie de l'écoulement en aval, notamment sur l'ouverture de la flamme qui influence le mélange des films avec l'écoulement principal.
- (ii) L'incertitude sur le diamètre du col, qui n'a pu être mesuré mais seulement estimé au moyen de corrélations, peut influencer sur l'ouverture de la flamme via le champ de pression.
- (iii) La répartition des débits entre l'injecteur et les deux films de refroidissement résulte de mesures de débits réalisées à 1 atm, alors que la pression dans la chambre est 10 fois supérieure. On peut donc s'interroger sur la validité de cette répartition.

On peut évoquer une troisième hypothèse, portant sur le combustible : la surestimation de la richesse dans l'ARZ peut provenir d'un rendement de combustion trop important, induit par la mauvaise reproduction de différents phénomènes comme le chauffage, la fragmentation ou l'évaporation des gouttes de kérosène liquide, la combustion turbulente ou le piégeage du kérosène gazeux par l'écoulement d'air frais autour de l'ARZ.

6.2.2 Modification de la répartition des débits d'air injecté

6.2.2.1 Principe

Pour pouvoir mettre en place le couplage avec le rayonnement et réaliser un calcul représentatif du point de vue du champ de température, il a été décidé de modifier la répartition des débits afin de rapprocher le champ de température des valeurs expérimentales majorées de l'écart dû au rayonnement, avant d'établir le couplage LES-rayonnement. On a donc cherché à diminuer la richesse des gaz brûlés en aval de l'injecteur en augmentant le débit d'air injecté dans le plenum et en réduisant celui des films de refroidissement afin de conserver un débit d'air total identique. Plusieurs ajustements, réalisés en RANS, ont été nécessaires pour déterminer la nouvelle répartition de débits.

Les modifications de la répartition des débits sont significatives, puisque le débit à travers l'injecteur a été augmenté de près de 40 %, et les débits des écoulements de refroidissement (film et colerette) ont été diminués de 82 %. La section suivante met en évidence les modifications de l'écoulement liées à cette nouvelle répartition.

6.2.2.2 Conséquences des modifications sur l'aérothermique

On observe tout d'abord les changements induits par la nouvelle répartition sur le champ de température, sur la figure 6.29. La baisse de température est importante dans

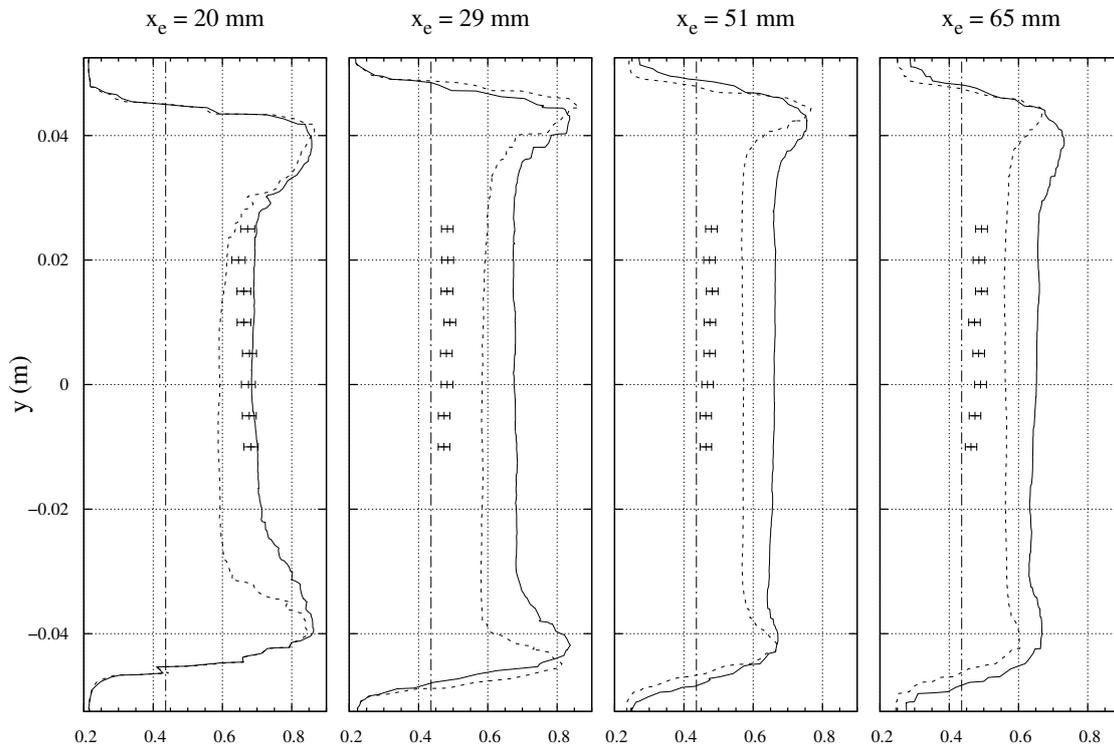


FIG. 6.29 | Comparaison des profils de température moyenne adimensionnée obtenus en LES sans ajustement des débits (—) et avec ajustement (----) avec les mesures CARS (barres d'erreur) et la température d'équilibre à la richesse globale de la chambre $T_{eq}^*(\phi_g)$ (-.-.-).

la recirculation, d'environ 15 % sur les deux profils amont, et entre 11 et 15 % sur les deux profils aval. Avec cette nouvelle répartition des débits, le calcul sous-estime la température en $x_e = 20$ mm, mais se rapproche des mesures sur les trois autres profils,

qui sont les plus fiables. La température qui avait été ciblée dans le tableau 6.1 n'est pas atteinte : l'écart entre la température du calcul et la valeur cible, s'élevant initialement à 26 % de la valeur cible, en vaut maintenant 9 % avec la nouvelle répartition des débits. Cependant une modification plus importante de cette répartition n'est pas souhaitable car elle tendrait à annuler les débits à travers le film et la colerette, avec un risque de modifier excessivement la topologie de l'écoulement dans la chambre ainsi que celle de la flamme. On choisit donc de conserver ces niveaux de température.

L'effet de la nouvelle répartition des débits apparaît nécessairement sur les profils de vitesse axiale et azimutale, tracés respectivement sur les figures 6.30 et 6.31. L'effet de la baisse de débit des films se traduit par une forte augmentation du gradient de vitesse axiale entre la paroi et la zone de forte vitesse axiale située à proximité. Le débit injecté par les films et qui passait en proche paroi est reporté dans les vrilles ce qui augmente de plus de 30 % la vitesse maximale, et diminue à l'inverse la vitesse en proche paroi. Le même effet est observé sur la vitesse azimutale : la nouvelle répartition des débits accélère les zones les plus rapides de l'écoulement. Pour s'assurer que ce nouvel écoulement reste proche de l'ancien, on évalue le nombre de swirl comme en section 6.1.1.2. On obtient $S = 0,697$, identique à 10^{-3} près à celui de l'écoulement calculé avec l'ancienne répartition des débits.

Finalement, une telle modification de la répartition des débits d'air injecté montre qu'une possible incertitude de mesure de cette répartition ne serait qu'une cause secondaire des écarts de température constatés, puisque les modifications à apporter à cette répartition pour retrouver les niveaux de température mesurés sont trop importantes. L'aérodynamique de l'écoulement doit donc vraisemblablement être radicalement différente pour induire la forte chute de température observée sur les trois profils de mesure les plus en aval. Expérimentalement, il serait intéressant de caractériser le champ de vitesse de l'écoulement, tandis que numériquement, la simulation doit être réalisée sur un maillage plus fin afin d'augmenter l'intervalle des échelles simulées et d'améliorer la simulation du mélange des films de refroidissement avec le reste de l'écoulement et la reproduction des pertes de charge dans l'injecteur.

6.2.3 Simulation de la formation des suies dans le foyer TLC

Les niveaux de température étant plus représentatifs de la réalité, on peut maintenant modéliser la formation des suies dans la chambre, dernière brique nécessaire avant la mise en place du couplage avec le rayonnement. On analyse dans un premier temps la topologie du champ de suies puis on le compare avec les mesures optiques disponibles.

6.2.3.1 Topologie du champ de suie et détails de sa formation

Le modèle de formation des suies de Tesner-Magnussen, adapté comme indiqué dans le chapitre 4, est utilisé ici. Pour les raisons déjà évoquées en section 4.3, on met en œuvre le modèle tel qu'il a été éprouvé sur une flamme 1D laminaire prémélangée en section 4.2. Cette démarche est en partie justifiée par le fait que la combustion dans la chambre TLC adopte majoritairement un régime prémélangé (voir section 6.1.1.6). Cependant le sous-modèle d'oxydation des suies n'a pu être évalué dans la flamme 1D riche de la section 4.2. Il a néanmoins été utilisé à de nombreuses reprises avec des constantes identiques ou très proches (voir les études de Yunardi *et al.* [152], Lignell *et al.* [117, 160], Kronenburg *et al.* [157] et Fairweather *et al.* [185]).

Pour appliquer le modèle à la chambre TLC, les valeurs des constantes données dans le tableau 4.1 ont été conservées, sauf pour a et b , qui sont ajustées de la même manière qu'en section 4.2, à l'aide de la relation (4.21). Pour cela, on détermine d'abord

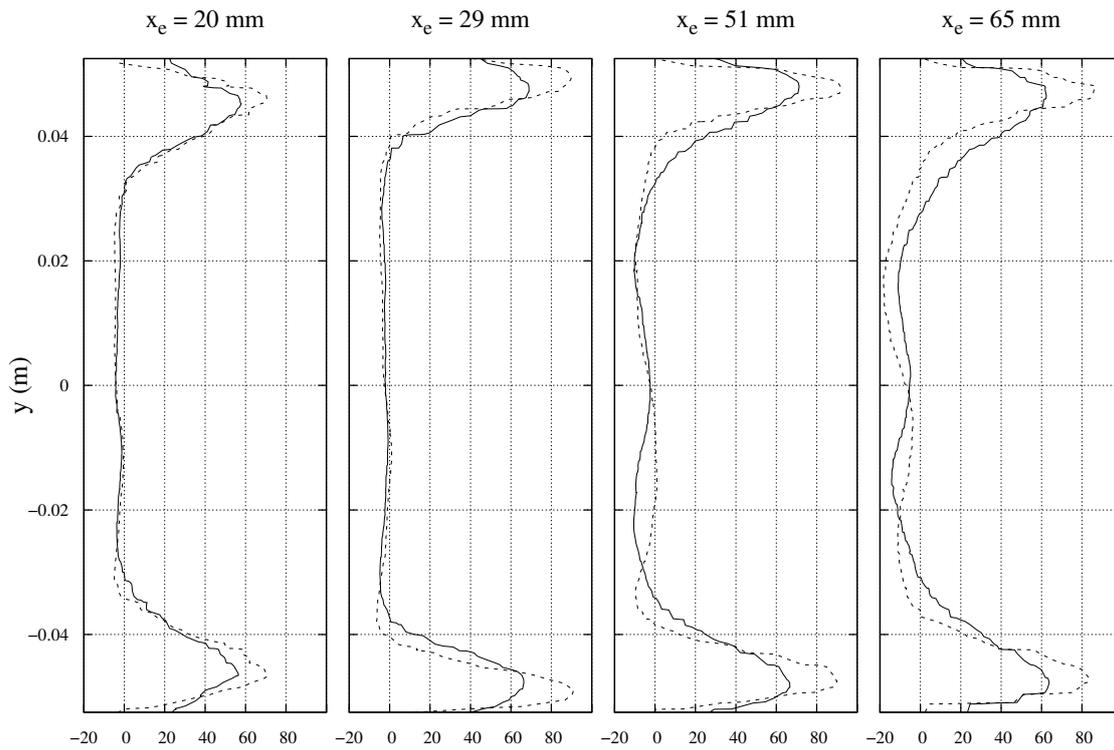


FIG. 6.30 | Comparaison des profils de vitesse axiale moyenne obtenus en LES sans ajustement des débits (—) et avec ajustement (----).

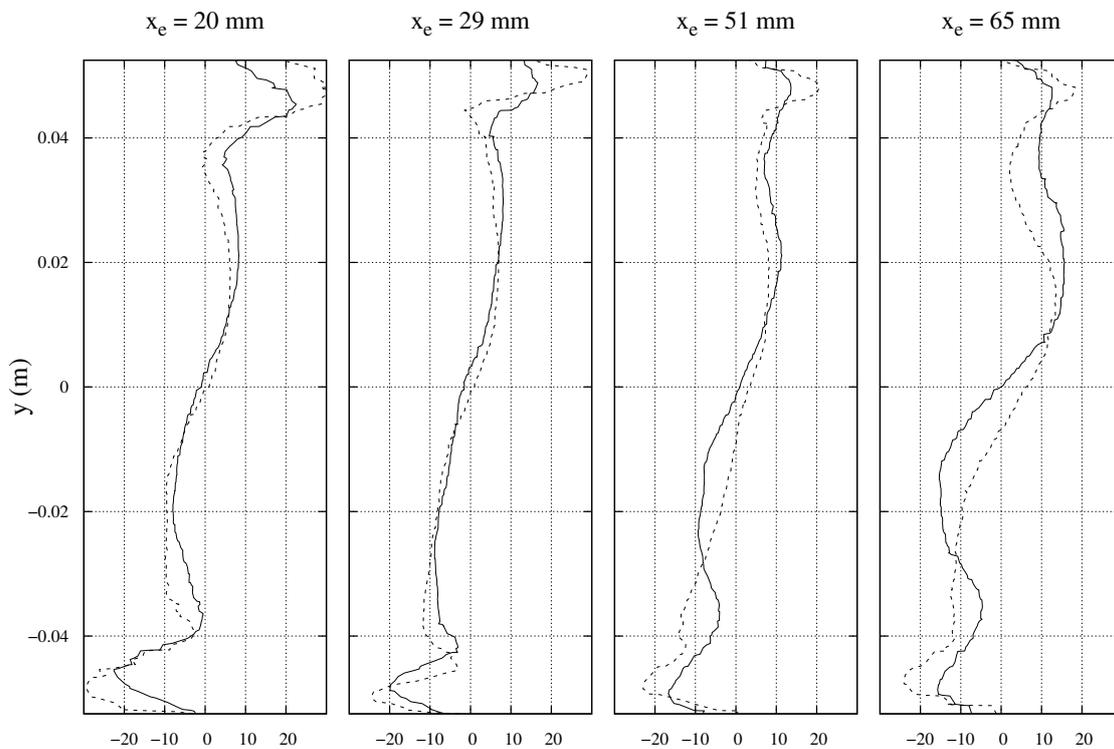


FIG. 6.31 | Comparaison des profils de vitesse azimutale moyenne obtenus en LES sans ajustement des débits (—) et avec ajustement (----).

le diamètre caractéristique des particules de suies dans la chambre. Les mesures qui ont été réalisées en sortie (voir section 5.1.3.1 et [164]) donnent un diamètre moyen en sortie de chambre $d_{p,\text{sortie}} = 27,5 \text{ nm}$. Il est difficile d'estimer les rôles concurrents de l'oxydation et de l'agglomération dans la flamme et jusqu'à la sortie de chambre. On se contente donc de choisir un diamètre approché proche du diamètre en sortie $d_p = 20 \text{ nm}$. En relevant la fraction volumique maximale mesurée dans la chambre $f_v^{\text{max}} = 3,5 \cdot 10^{-9}$ et en faisant l'hypothèse que f_v atteint dans la chambre la valeur de saturation du modèle (soit $f_{v,\text{sat}} = f_v^{\text{max}}$), on obtient la valeur du rapport a/b par la relation (4.21). On en déduit les valeurs de a et b en conservant les proportions respectives de a et de $1/b$ adoptées pour la flamme 1D en section 4.2.2.4, ce qui revient à garder le produit ab constant. Les valeurs obtenues sont les suivantes :

$$\begin{aligned} a &= 1,987 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}, \\ b &= 2,378 \cdot 10^{-8} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{part}^{-1}. \end{aligned}$$

Par ailleurs, la fraction massique de carbone dans l'espèce fictive $\text{C}_{10}\text{H}_{20}$ vaut $f_c = 0,857$. On dispose maintenant des constantes nécessaires à la mise en œuvre du modèle de Tesner-Magnussen. Les résultats obtenus après convergence des moyennes, réalisée avec la nouvelle répartition des débits, sont présentés sur la figure 6.32. Le résultat principal est le champ de fraction volumique de suies sur la figure 6.32a, accompagné des valeurs RMS sur la figure 6.32b. On observe un champ de f_v fortement marqué topologiquement, avec un niveau uniforme à la valeur cible $f_{v,\text{sat}}$ qui se déploie depuis la zone de flamme jusqu'en sortie de chambre, en circulant le long des parois dans la partie de l'écoulement qui ne rentre pas dans l'ARZ. On ne trouve donc que très peu de suies dans l'ARZ. Enfin, on constate que les CRZ en fond de chambre capturent une quantité significative de suies. Les valeurs RMS apparaissent élevées dans les zones où $f_v < f_{v,\text{sat}}$, et sont à l'inverse très faibles là où $f_v = f_{v,\text{sat}}$, comme attendu.

Pour expliquer les phénomènes menant à l'obtention de ce champ de f_v , les taux moyens de formation $R_{s,f}$ et d'oxydation $R_{s,c}$ des suies (définis dans les sections 4.1.2.2 et 4.1.2.3) ont été tracés sur la figure 6.32, ainsi que le nombre moyen de noyaux radicalaires par unité de volume ρN_r et la fraction massique de kérosène Y_F . Notons tout d'abord que les noyaux radicalaires sont formés spontanément dans une zone chaude et riche en vapeur de kérosène (figures 6.32e et 6.32f). La dissymétrie observée entre les parties supérieure et inférieure du champ de ρN_r est intéressante car on peut la relier à celle du champ de Y_F . On observe en effet qu'une partie du combustible est présente dans la zone chaude (en partie supérieure), ce qui induit une importante formation spontanée de noyaux radicalaires, et permet l'initiation de la réaction en chaîne qui conduit à la formation de noyaux hors de la zone de présence de vapeur de kérosène. À l'inverse, en partie inférieure, le combustible est beaucoup moins présent dans la zone chaude, ce qui limite l'initiation de la réaction en chaîne.

Une fois formés, les noyaux sont consommés par la formation des suies (terme de rappel de l'expression (4.4)) et l'oxydation. Les suies se forment dans la région de forte présence des noyaux radicalaires, avec un taux de formation $R_{s,f}$ (figure 6.32c) variant fortement dans cette zone. Ces variations sont dues au terme de rappel de l'expression (4.9) qui limite le taux de formation à mesure que f_v se rapproche de $f_{v,\text{sat}}$. $R_{s,f}$ atteint donc sa valeur maximale pour $f_v < f_{v,\text{sat}}$ là où les conditions sont favorables à la formation des suies (présence suffisante de noyaux radicalaires). L'oxydation des suies (figure 6.32d) a lieu majoritairement dans la région de l'écoulement à haute température et de concentration en oxygène non nulle, d'après l'expression (4.12) de $R_{s,c}$. Elle se poursuit en aval de la zone très chaude, avec moins d'intensité, tant que les suies sont présentes.

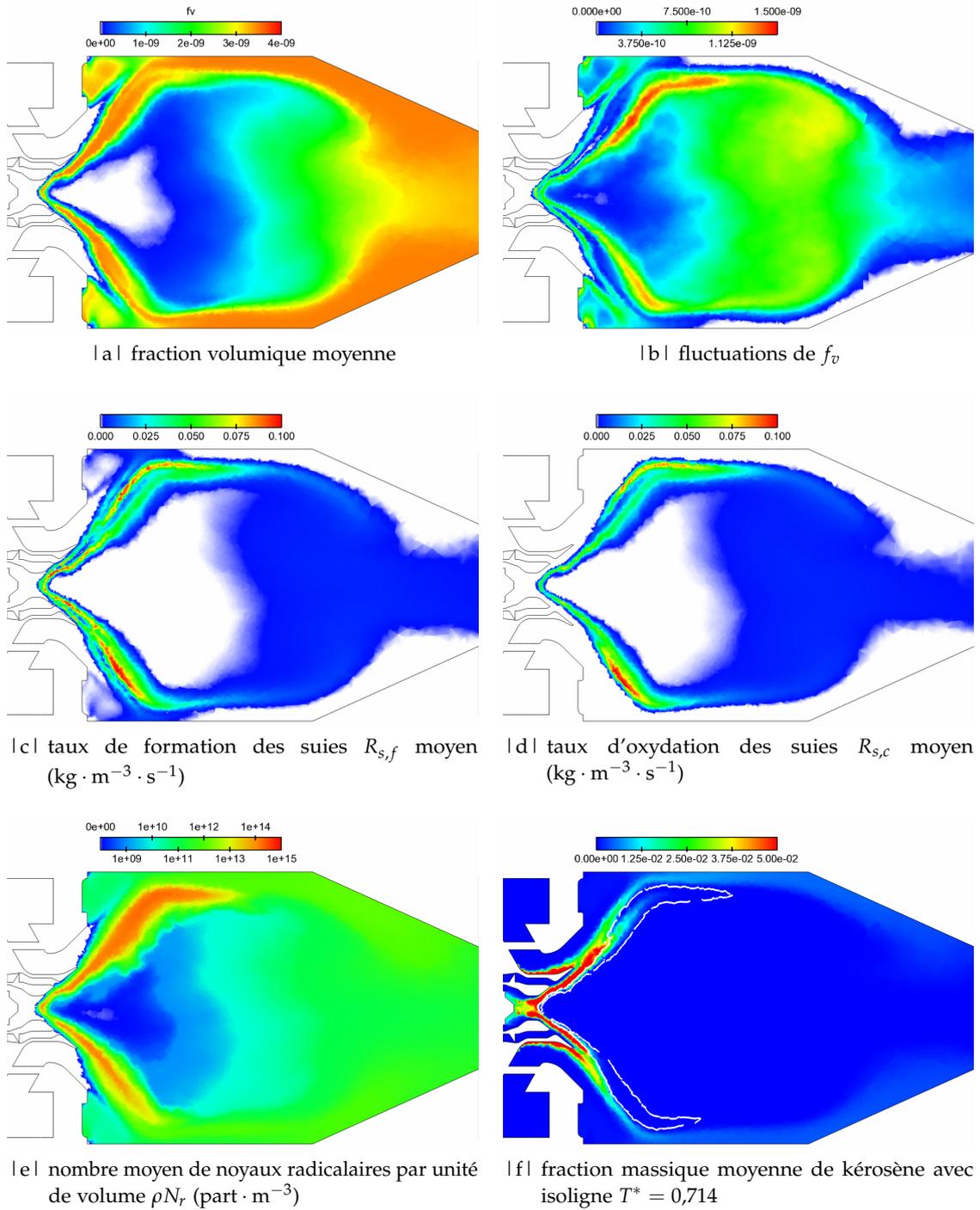


FIG. 6.32 | Grandeurs statistiques obtenues en LES avec le modèle de formation des suies de Tesner-Magnussen.

Finalement, la formation des suies telle qu'elle est modélisée ici est pilotée de façon importante par la zone de l'écoulement chaude et riche en combustible. Les suies sont ensuite convectées par l'écoulement et oxydées, l'oxydation déterminant la topologie du champ de suies dans la partie aval de l'écoulement.

6.2.3.2 Comparaison avec les mesures expérimentales

Pour évaluer la justesse de la modélisation des suies réalisée dans cette étude, on confronte les résultats aux mesures réalisées par LII (*Laser Induced Incandescence*) dans le plan médian (voir section 5.1.3.1 et le rapport technique [164]). La figure 6.33 compare donc le champ moyen de fraction volumique de suies mesuré, restreint aux dimensions des hublots de la chambre, avec le champ LES moyen de f_v de la figure 6.32a dont l'échelle a été ajustée à l'échelle expérimentale. À l'intérieur du cadre, on observe

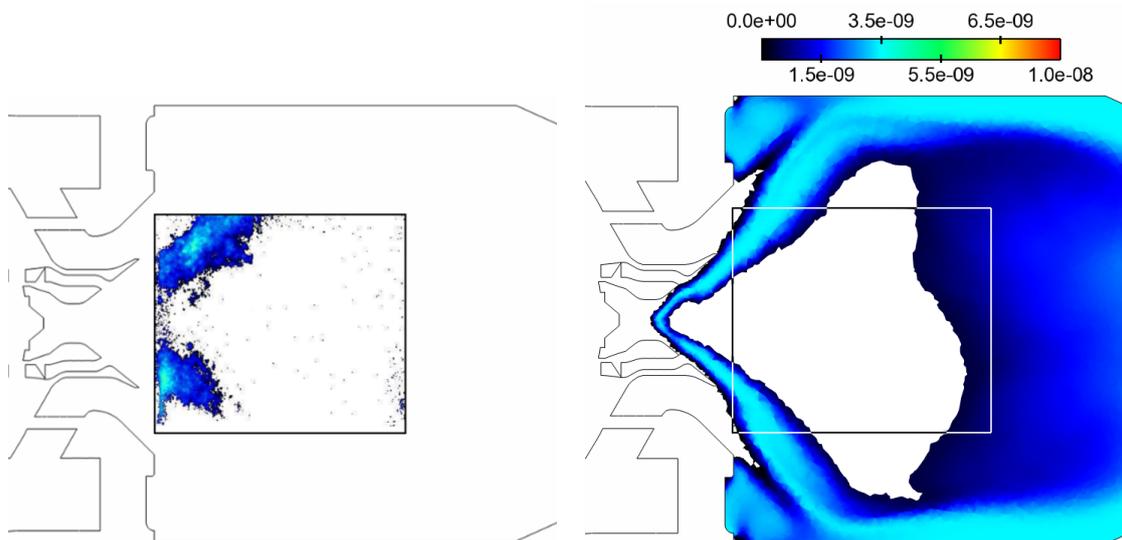


FIG. 6.33 | Comparaison des champs moyens de fraction volumique de suies obtenu par LII (à gauche) et par simulation LES avec ajustement des débits d'air (à droite).

une reproduction correcte de la topologie du champ mesuré, mis à part en aval où, expérimentalement, les suies sont très peu présentes dans l'ARZ. Les niveaux sont moins bien reproduits, mais il faut noter qu'ils sont très dépendants de la modélisation du mécanisme de formation utilisée et des constantes du modèle.

La bonne reproduction de la topologie du champ de suies confirme que l'écoulement réactif calculé est proche de la topologie réelle, avec la modification de la répartition des débits expliquée en section 6.2.2.1.

6.2.4 Conclusion

On a apporté dans cette section une modification importante à la répartition des débits entre l'injecteur et les films de refroidissement. En se basant sur l'hypothèse d'équilibre de l'écoulement dans la recirculation, on a en effet montré qu'il était nécessaire d'introduire davantage d'air dans la recirculation pour atteindre les températures expérimentales. En trouvant un compromis entre la baisse de température vers la valeur cible et la modification de l'écoulement induite par le changement de répartition des débits, on arrive à réduire la surestimation de température à 9% de la valeur de la température expérimentale majorée de l'effet supposé du rayonnement.

Dans ces nouvelles conditions, le modèle de suies développé pour cette étude a été mis en œuvre, ce qui a permis d'étudier le rôle des différents sous-modèles de formation et d'oxydation des noyaux radicalaires et des suies dans un écoulement complexe. On a vérifié que la valeur de fraction volumique ciblée en ajustant les constantes du modèle est effectivement atteinte dans la chambre, ce qui permet d'obtenir des niveaux de suies proches des niveaux expérimentaux. Par ailleurs, la topologie de la répartition des suies dans la chambre est bien reproduite par le calcul, ce qui permet la validation partielle de la simulation pour le cas étudié.

6.3 SIMULATION DU RÉGIME DE MONTÉE

Comme la cause des écarts constatés en section 6.1.3 entre les profils de température mesurés et ceux donnés par la simulation n'a pas été identifiée de façon certaine, on propose dans cette section d'évaluer la simulation mise en place sur un autre point de fonctionnement, le régime de montée, choisi en section 5.3.1 et dont les conditions ont été détaillées en section 5.1.2.

Après avoir précisé les conditions aux limites et les modèles utilisés pour ce calcul, on propose d'analyser les résultats au moyen des champs déjà tracés pour le régime d'approche, et de comparer ces champs entre les deux régimes.

6.3.1 Conditions aux limites et modèles

Pour la phase gazeuse, les conditions aux limites spécifiques au régime de montée sont précisées dans le tableau 5.6 en section 5.3.3, et celles pour la phase liquide, dans le tableau 5.5 en section 5.3.2.4. En particulier, la répartition des débits d'air entre les films de refroidissement et l'injecteur a été appliquée telle qu'elle a été mesurée à pression atmosphérique et reportée dans le tableau 5.7 du chapitre 5.

Les modèles utilisés sont ceux décrits dans la section 5.4. La mise en œuvre du calcul en LES a cependant nécessité la désactivation du modèle de fragmentation secondaire pour les gouttes de kérosène liquide. Celui-ci a été mis en cause dans la déstabilisation du calcul observée dans le cas du régime d'approche, du fait de la génération d'ondes acoustiques de basse fréquence dans la chambre. Les conséquences de cette désactivation sur les résultats sont observées dans la section suivante. En particulier, le calcul n'est plus cohérent avec le choix des tailles de gouttes détaillé en section 5.3.2.4 qui suppose la prise en compte de la fragmentation secondaire. Il sera nécessaire dans une prochaine étude de réintroduire le modèle de fragmentation secondaire dans le calcul, ou d'utiliser des conditions d'injection de gouttes différentes de celles spécifiées jusqu'ici (distribution de taille de goutte cohérente avec les mesures expérimentales plutôt qu'une taille uniforme).

6.3.2 État aérothermochimique moyen dans la chambre

La figure 6.34 présente les champs moyens de vitesse axiale et de température, ainsi que ceux de leurs fluctuations. On peut les comparer à ceux obtenus en régime d'approche, sur la figure 6.4. L'aérodynamique de l'écoulement ne change pas fondamentalement en régime de montée, mais l'écoulement est plus rapide et la recirculation centrale moins marquée à proximité de l'injecteur, en particulier au niveau de l'injecteur pilote. En revanche, le champ moyen de température est foncièrement différent de celui du régime d'approche, avec un écoulement de gaz brûlés plus homogène en température et plus chaud de 30 % dans l'ARZ. Les fluctuations de température révèlent

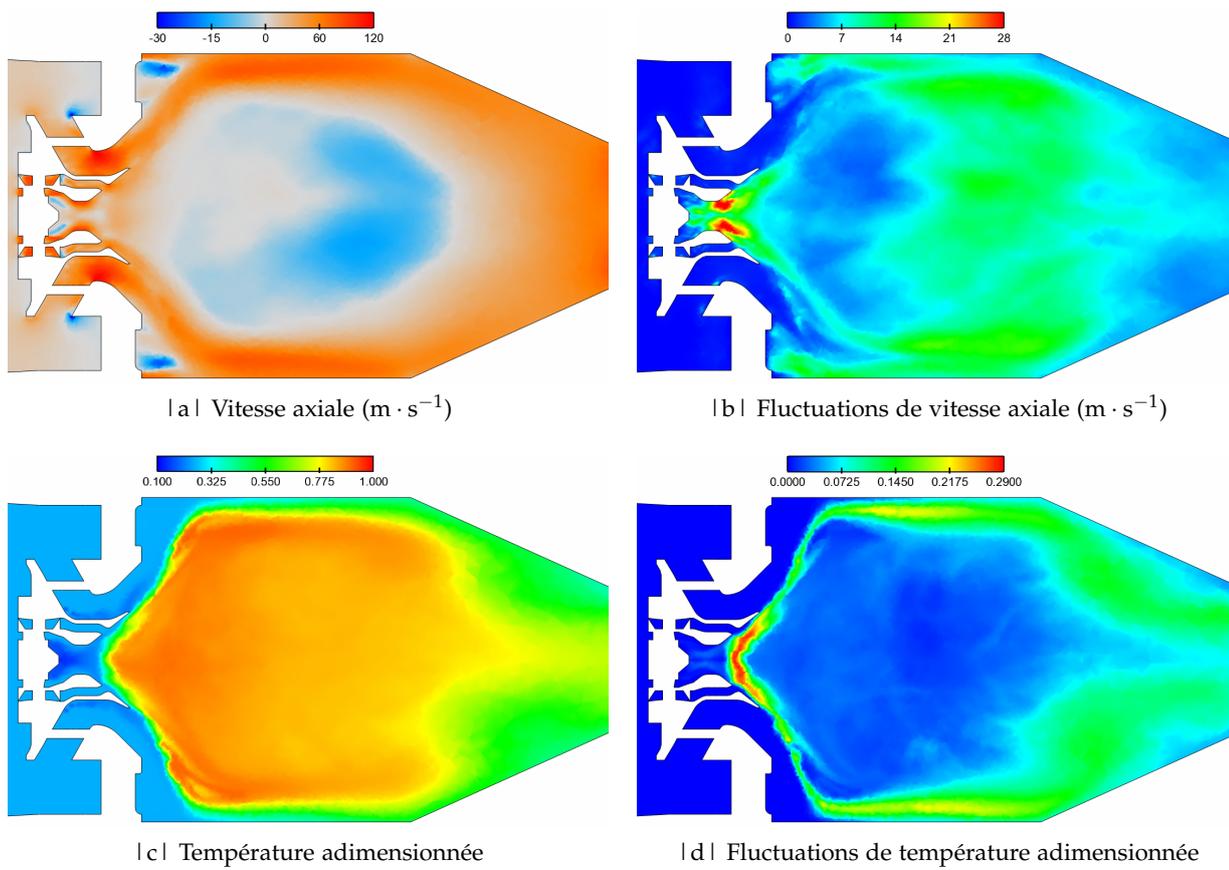


FIG. 6.34 | Champs moyens obtenus en LES (visualisation restreinte à la chambre de combustion), en régime de montée.

un accrochage de la flamme plus difficile au niveau de l'étage pilote qu'en régime d'approche.

Le champ de gouttes de kérosène est représenté dans les mêmes conditions qu'en section 6.1.1.5, par la figure 6.35. Celle-ci donne la topologie du champ de gouttes en 3D et met en évidence la tranche dans laquelle sont tracés les champs de gouttes numériques colorées par le diamètre des gouttes physique et leur température, sur la figure 6.36.

Les jets de gouttes provenant de l'étage multipoint sont beaucoup moins dispersés qu'en régime d'approche : sans fragmentation secondaire, les gouttes conservent un grand diamètre et une inertie élevée. Elles sont donc moins sujettes aux fluctuations de vitesse. En conséquence, on n'observe pas sur la figure 6.36a de stratification des sprays suivant le diamètre des gouttes comme on avait pu l'observer sur la figure 6.10a. On remarque par ailleurs sur la figure 6.36b que le nombre de gouttes à température élevée est plus important qu'en régime d'approche et elles s'évaporent plus rapidement, au niveau de l'étage multipoint, mais il est difficile de dissocier les effets du changement de régime et de l'absence de fragmentation secondaire. L'évaporation serait encore plus rapide si on activait le modèle de fragmentation secondaire.

En ce qui concerne l'évaporation des gouttes et la combustion du kérosène gazeux, la figure 6.37 présente sur un instantané LES le champ de ω_F^* , grandeur définie par l'équation (6.4) et dérivée de l'indice de Takeno (6.3), ainsi que le champ de fraction massique de kérosène gazeux, à l'instar de la figure 6.11. La flamme apparaît plus ouverte qu'en régime d'approche, ce qui crée, avec un écoulement d'air plus rapide, un chevauchement des zones d'évaporation et de combustion à l'étage multipoint observé

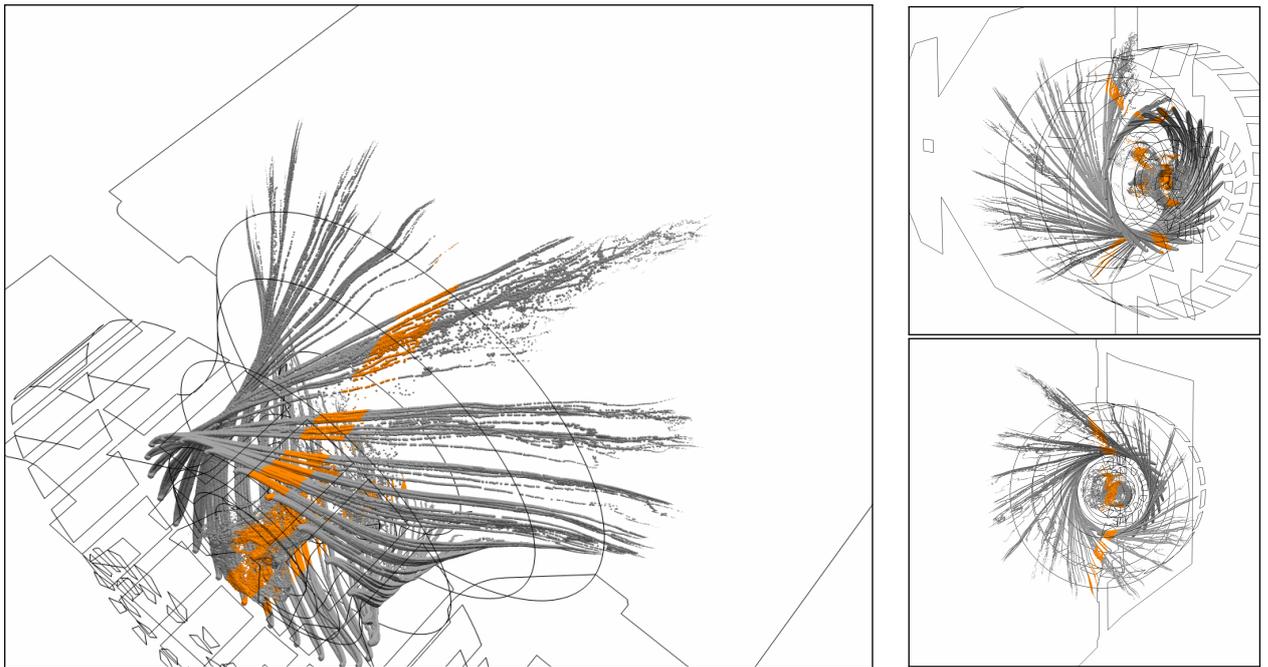


FIG. 6.35 | Topologie du champ instantané de gouttes numériques de kérosène, représentées par des sphères de diamètre proportionnel à celui des gouttes physiques. Mise en évidence par coloration de la tranche utilisée pour la visualisation 2D.

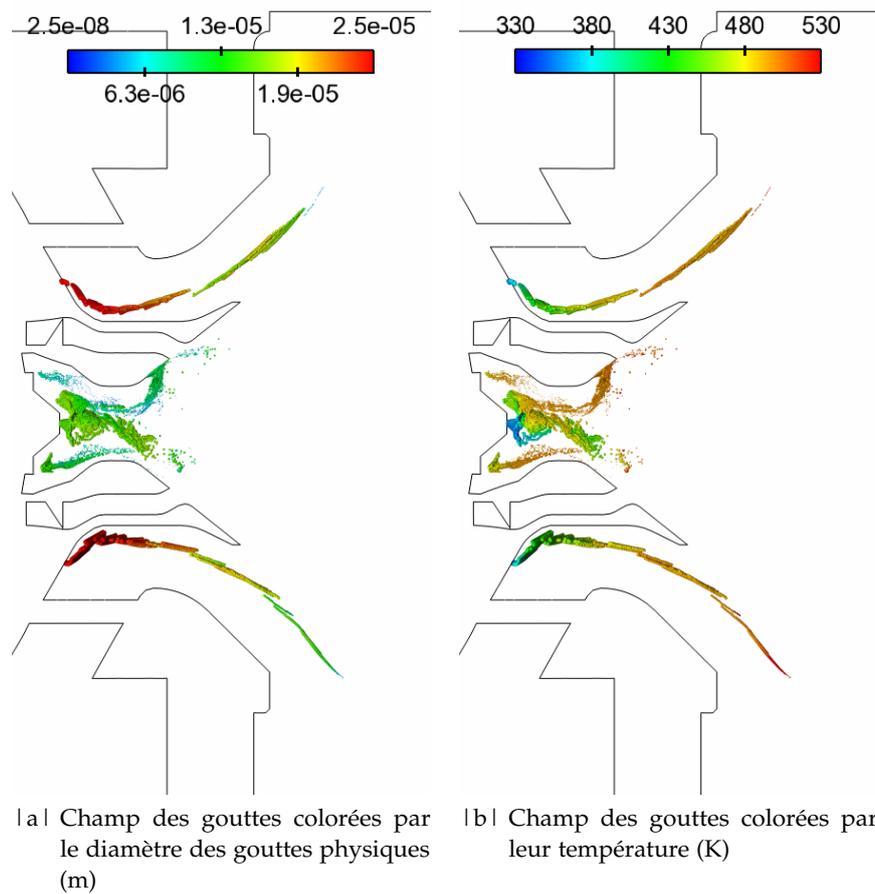
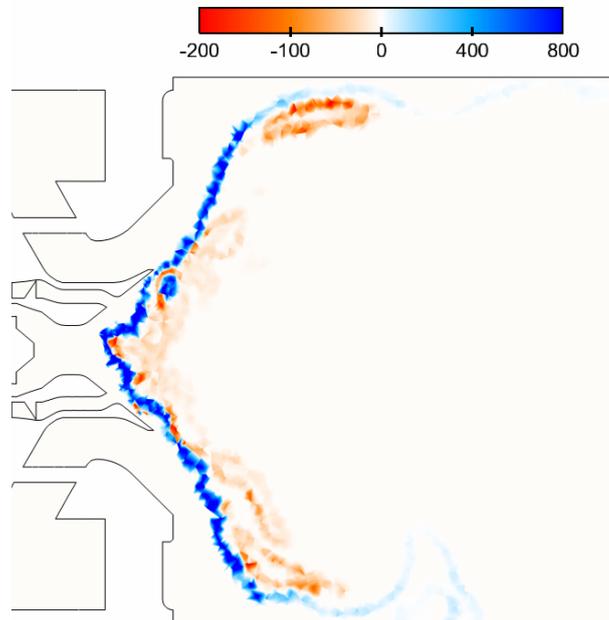
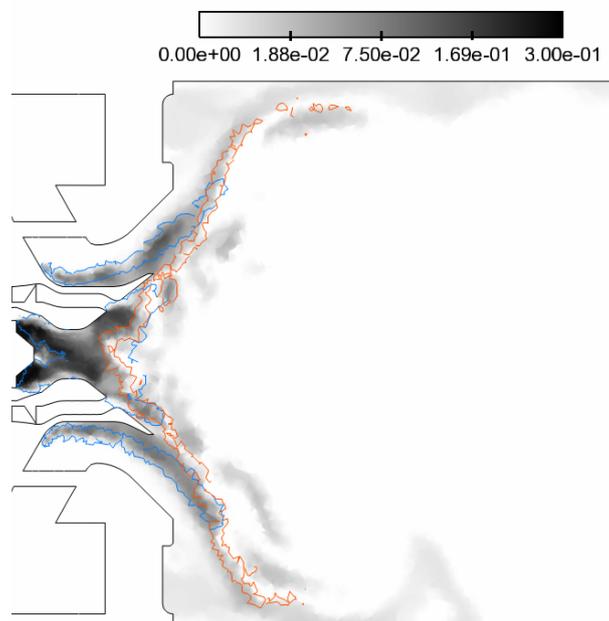


FIG. 6.36 | Visualisation du champ de gouttes numériques.



a | Champ instantané de $\dot{\omega}_F^*$ ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$).



b | Champ instantané de fraction massique de kérosène gazeux Y_F , avec une isoligne bleue de terme source d'évaporation des gouttes $\dot{\omega}_{\text{evap}} = 0,6 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$, et une isoligne orange de terme source de kérosène gazeux $\dot{\omega}_F = -200 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.

FIG. 6.37 | Analyse des phénomènes d'évaporation et de combustion sur un état instantané LES.

sur la figure 6.37b. Cela donne lieu à la présence de kérosène gazeux en aval de la flamme, qui brûle alors en diffusion d'après l'indice de Takeno sur la figure 6.37a ($\dot{\omega}_F^* < 0$). Au niveau de l'étage pilote, on remarque que la flamme se stabilise plus en aval par rapport au régime d'approche.

Enfin, le champ instantané de richesse, tracé sur la figure 6.38, révèle une zone de l'écoulement à richesse $\phi_m \geq 1$ plus étendue qu'en régime d'approche, mais elle reste décorrélée de la zone réactive au niveau de l'étage multipoint, ce qui permet de maintenir un régime de combustion pauvre à cet endroit.

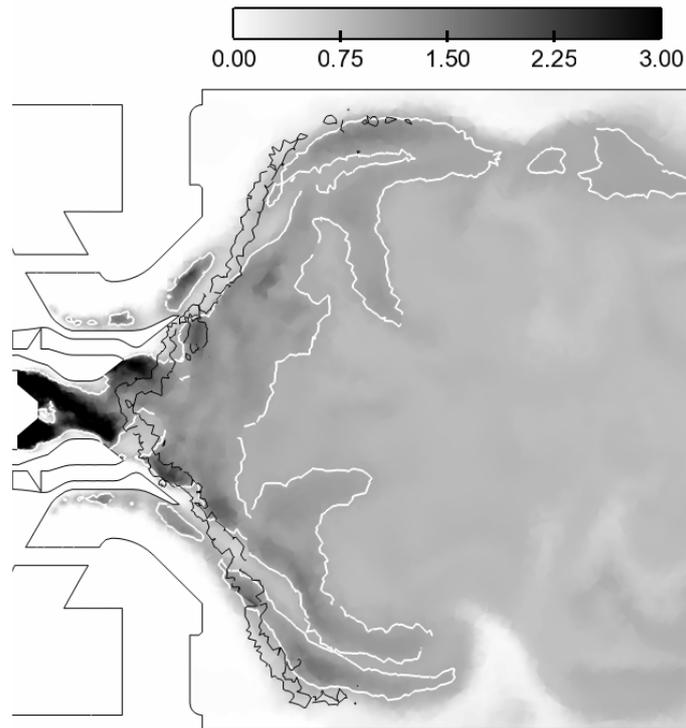


FIG. 6.38 | Champ instantané de richesse ϕ_m , avec une isoligne pour $\phi_m = 1$ (en blanc) et une isoligne de terme source de combustible $\dot{\omega}_F = -200 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ (en noir).

6.3.3 Comparaison mesures - simulation

Comme la flamme est plus ouverte en régime de montée, le mélange des films avec l'écoulement principal est amélioré. On peut en conséquence s'attendre à ce que la répartition des débits entre les films de refroidissement et l'injecteur soit moins déterminante sur l'état de l'écoulement dans la chambre. D'autre part, l'évaporation est plus rapide, ce qui réduit la quantité de kérosène piégée dans les films de refroidissement, quantité qu'il est difficile d'obtenir de façon précise dans la simulation. La simulation globale est donc facilitée puisque cela réduit la dépendance des résultats envers ce phénomène de piégeage.

On compare sur la figure 6.39 le champ moyen de température obtenu aux mesures dont on dispose, qui sont localisées en $x_e = 65 \text{ mm}$. Les 3 autres profils ont été tracés afin de permettre la comparaison avec le régime d'approche (figure 6.19). La simulation surestime la température d'environ 9% par rapport aux valeurs mesurées, ce qui est mieux qu'en régime d'approche où la surestimation est de 29 à 41%. Les mesures sont elles supérieures de 30% de la valeur de la température d'équilibre contre 10% en régime d'approche, ce qui montre que le mélange des gaz brûlés avec l'air frais est moins

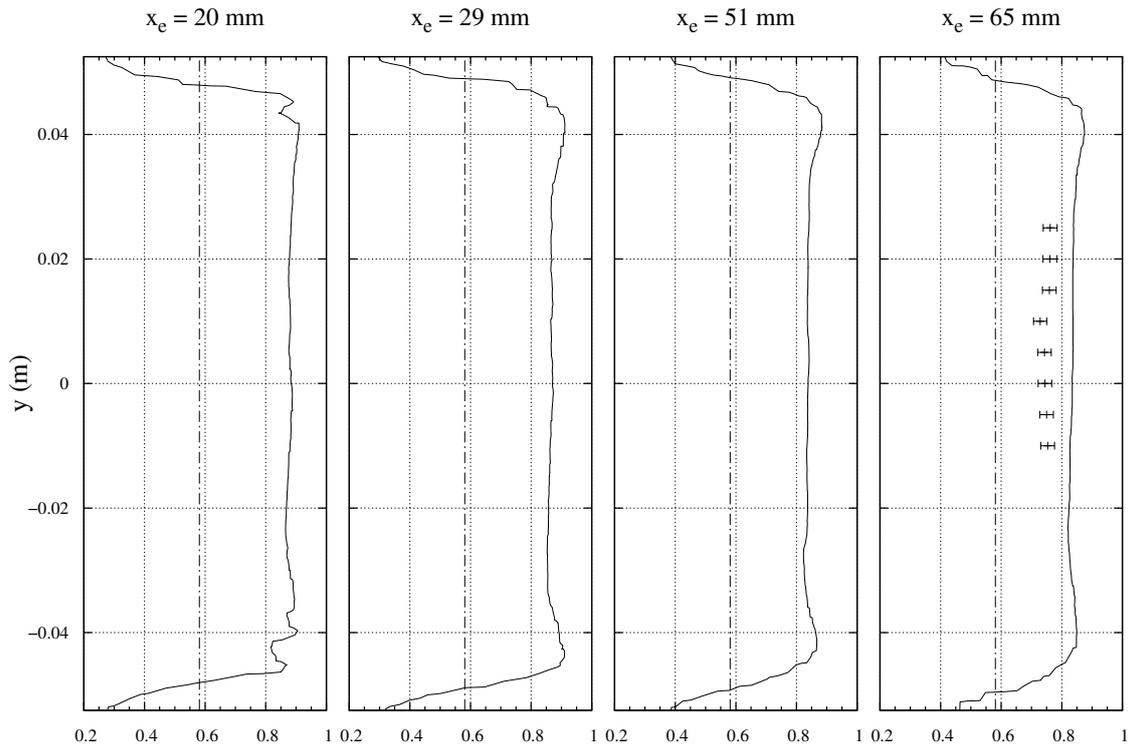


FIG. 6.39 | Comparaison des profils de température moyenne adimensionnée obtenus en LES (—) avec les mesures expérimentales CARS (barres d'erreur) et la température d'équilibre à la richesse globale de la chambre $T_{eq}^*(\phi_g)$ (---) (régime de montée).

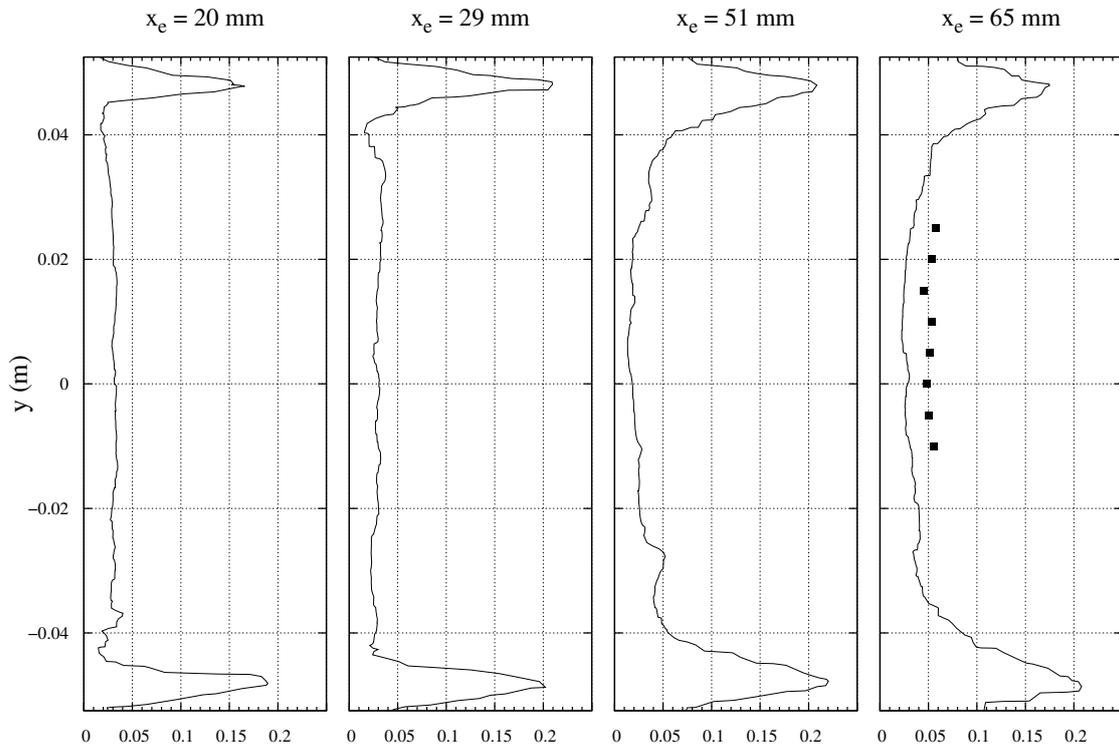


FIG. 6.40 | Comparaison des profils des écarts types de température adimensionnée obtenus en LES (trait plein) et expérimentalement (carrés) (régime de montée).

bon pour ce régime de montée. La figure 6.40 montre également que les fluctuations de température sont sous-estimées d'un facteur 2 par la simulation.

6.3.4 Conclusion

Finalement, la simulation du régime de montée a permis d'obtenir des résultats plus proches des mesures de température, ce qui montre que l'approche et les modèles mis en œuvre donnent des résultats cohérents. Ils restent cependant perfectibles. Il serait nécessaire d'évaluer l'effet du modèle de fragmentation secondaire sur les résultats, qui pourrait expliquer au moins en partie les écarts numérique-expérience restants. Le régime d'approche semble lui plus difficile à modéliser, ou plus sensible aux approximations et aux modèles utilisés. D'autres pistes doivent être explorées comme l'optimisation du maillage ou l'amélioration de l'estimation des pertes de charge dans l'injecteur.

6.4 CONCLUSION DU CHAPITRE

Dans ce chapitre, les résultats des simulations instationnaires dans la chambre TLC ont été analysés, interprétés et confrontés aux données expérimentales. Les objectifs étaient multiples : il s'agissait d'évaluer la précision des modèles et méthodes numériques utilisés, d'appliquer le modèle de formation des suies élaboré dans le chapitre 4 à une configuration complexe pour évaluer son comportement, et enfin de réaliser la simulation d'un foyer aéronautique récent pour préparer la simulation des transferts radiatifs dans ce foyer.

À partir des choix et des paramètres d'entrée déterminés dans le chapitre 5, le régime d'approche a d'abord été simulé en LES. Différents aspects de l'écoulement et des phénomènes physiques y prenant place ont été observés et quantifiés, par l'observation des états moyens et instantanés de l'écoulement. La comparaison des résultats numériques avec les mesures a révélé des écarts importants sur les niveaux de température, qui sont déterminants pour l'évaluation des transferts radiatifs et de la production de polluants tels que les NO_x . Certaines limitations de la simulation ont été identifiées et des perspectives sont proposées :

- La répartition de débits utilisée en condition limite peut être erronée. Pour remédier à cela, il faudrait prendre en compte la géométrie complète de la chambre pour ne plus avoir à spécifier une répartition de débits. Néanmoins le maillage de ces canaux de géométrie complexe induit un coût bien supérieur et la simulation devrait reproduire correctement les pertes de charges dans ces canaux, ce qui apporte une difficulté supplémentaire.
- La discrétisation spatiale utilisée peut être insuffisante pour reproduire le mélange des films de refroidissement avec l'écoulement principal, et le piégeage du kérosène gazeux dans ces films. Cependant l'utilisation d'un maillage plus fin est pour le moment incompatible avec le couplage LES-rayonnement, pour des raisons de temps de calcul et d'occupation mémoire, comme on le verra dans le chapitre 7.
- Aucun modèle d'interaction combustion-turbulence n'a été utilisé, pour les raisons évoquées en section 5.4.1. Il serait nécessaire d'évaluer l'effet du modèle TFLES sur les résultats, qui pourrait modifier le rendement de combustion et par conséquent les niveaux de température dans l'ARZ.
- La modélisation du spray de gouttes de kérosène à l'étage pilote en particulier apparaît insuffisante. Pour l'améliorer, il faudrait modéliser l'atomisation primaire

du jet et la formation de film liquide sur les parois de l'injecteur. On ne dispose néanmoins pas encore des outils nécessaires pour cela.

Parmi ces limitations, la discrétisation spatiale insuffisante semble être la cause la plus probable des écarts de température obtenus.

Dans un second temps, les conditions aux limites de la simulation ont été adaptées pour rapprocher la simulation des résultats expérimentaux, dans l'unique but de disposer d'un cas réaliste du point de vue des niveaux de température pour la simulation des transferts radiatifs dans une telle configuration. Cette modification a permis de réduire les écarts de température observés. À cette occasion, le modèle de formation des suies a été introduit dans la simulation pour son évaluation. La comparaison des résultats à l'expérience a montré la reproduction correcte de la répartition des particules de suie dans l'écoulement. Dans un troisième temps, le régime de montée a été simulé avec la même stratégie, mais sans modification artificielle des conditions aux limites. Ce calcul a permis d'évaluer la pertinence des modèles et de l'approche utilisés dans des conditions différentes. Les résultats obtenus sont plus proches des mesures que dans le cas du régime d'approche, ce qui met en évidence la sensibilité de la modélisation aux conditions de calcul.

À la suite de ces travaux, on dispose d'une base de simulation numérique sur laquelle on peut mettre en place la modélisation des transferts radiatifs dans le foyer TLC, établir son couplage avec le calcul CFD instationnaire, et étudier l'influence du rayonnement sur l'écoulement. Par ailleurs, pour expliquer les écarts numérique-expérience obtenus, il sera nécessaire dans une prochaine étude de quantifier les effets du maillage, des simplifications de la géométrie et du modèle de fragmentation secondaire (pour le régime de montée) sur la flamme et la zone chaude de l'écoulement. Il serait également nécessaire d'améliorer la modélisation de l'interaction des gouttes avec la paroi, qui pourrait avoir un effet important sur la prédiction des niveaux d'imbrûlés et donc sur la température. Du côté expérimental, bien que les expérimentateurs affichent un bon niveau de confiance, les mesures de température CARS (*Coherent Anti-Stokes Raman Scattering*) restent rares à pression élevée, ce qui peut inciter à une certaine prudence. Pour aller plus loin dans l'analyse, il serait utile de disposer de mesures de vitesse en écoulement réactif dans la chambre pour confirmer l'aérodynamique de l'écoulement, notamment la répartition des débits d'air.

Simulation du couplage LES - rayonnement dans le foyer TLC

7

Après avoir décrit dans le chapitre 6 la simulation instationnaire de l'écoulement turbulent réactif diphasique dans la chambre TLC, il reste à évaluer l'influence des transferts radiatifs sur la combustion et la thermique, qui est actuellement assez mal connue dans ce type de chambre de nouvelle génération. Pour ce faire, le calcul des transferts radiatifs doit être mis en place et optimisé, de manière à pouvoir ensuite établir un couplage cohérent à un coût abordable entre d'un côté le calcul instationnaire d'aérothermochimie et de l'autre le calcul des transferts radiatifs. Il s'agira alors de réaliser des calculs permettant de déterminer avec précision l'effet d'un tel couplage dans la chambre.

Après un état de l'art sur la simulation du couplage entre la combustion et le rayonnement, on présente tout d'abord la stratégie élaborée. Celle-ci dépend de la parallélisation des différents codes de calcul utilisés, et est basée sur un ordonnancement spécifique de ces codes et sur des échanges mutuels. Le calcul des transferts radiatifs dans la chambre TLC est ensuite mis en place et l'influence des différents paramètres choisis est déterminée. Ce calcul est également optimisé avec pour objectif une réduction maximale du coût de calcul. Enfin, des calculs couplés LES-rayonnement sont réalisés en régime d'approche avec plusieurs périodes de couplage, et leurs résultats sont analysés.

Pour permettre la diffusion publique de ce mémoire, des données confidentielles concernant le foyer TLC ne peuvent y figurer. En conséquence, la température des gaz dans cette chambre a été rapportée à une valeur arbitraire. On note T^* la température adimensionnée résultante.

Table des matières

7.1	État de l'art concernant la simulation du couplage combustion-rayonnement	197
7.2	Stratégie de couplage LES-rayonnement	201
7.2.1	Parallélisation des différents solveurs de CEDRE et stratégie de partitionnement	201
7.2.2	Échanges et ordonnancement du couplage multi-solveurs	203
7.2.2.1	Échanges inter-solveur	203
7.2.2.2	Ordonnancement du calcul couplé instationnaire	204
7.3	Paramétrisation et optimisation du calcul de transfert radiatif	205
7.3.1	Paramètres pour la simulation des transferts radiatifs dans la chambre TLC	205
7.3.2	Calcul radiatif Monte Carlo de référence	207
7.3.2.1	Résultats du calcul radiatif de référence	208
7.3.2.2	Influence de la dilution sur l'émission de rayonnement dans les flammes	209
7.3.2.3	Rôle des différentes espèces gazeuses	210
7.3.3	Amélioration du calcul des transferts radiatifs dans la chambre TLC avec la méthode de Monte Carlo	212
7.3.3.1	Parallélisation par sous-calculs indépendants.	213
7.3.3.2	Développement d'une parallélisation par trajectoires adaptée aux architectures massivement parallèles.	214
7.3.4	Choix de la distribution spatiale et de la méthode de Monte Carlo	216
7.3.5	Évaluation des performances des méthodes DOM et Monte Carlo	217
7.3.6	Influence du modèle de propriétés radiatives des gaz	223
7.3.7	Influence de la condition limite aval	223
7.3.8	Conclusion	227
7.4	Application du couplage combustion-rayonnement au foyer TLC	227
7.4.1	Détermination des paramètres de couplage	227
7.4.2	Effet des transferts radiatifs sur la combustion en régime d'approche	228
7.4.2.1	Résultats du calcul couplé de référence.	228
7.4.2.2	Effet de la période de couplage	234
7.4.2.3	Évaluation des flux convectifs et radiatifs aux parois	234
7.5	Conclusion	238

7.1 ÉTAT DE L'ART CONCERNANT LA SIMULATION DU COUPLAGE COMBUSTION-RAYONNEMENT

Dans cette section, des études portant sur la modélisation du rayonnement dans les flammes turbulentes, avec ou sans suies, sont présentées. L'objectif est de mettre en évidence les problèmes rencontrés pour la modélisation du rayonnement dans les flammes. Les interactions entre la turbulence et la chimie ou le rayonnement sont particulièrement délicates à modéliser. Ces phénomènes dépendent en effet de manière fortement non-linéaire des grandeurs telles que la température et la composition chimique, ce qui impose de prendre en compte leurs fluctuations. En particulier, l'interaction rayonnement-turbulence (TRI pour *Turbulence Radiation Interaction*) a été beaucoup étudiée avec l'approche RANS (voir par exemple les travaux de Tessé *et al.* [7, 9]). On ne détaillera pas ici toutes les études qui ont été faites sur le sujet, car malgré les modèles qui ont été développés sur la TRI pour améliorer les prédictions de l'approche RANS, les chercheurs se tournent de plus en plus vers la LES dont l'intérêt a été démontré dans le chapitre 6 et dont le coût devient abordable grâce à l'augmentation croissante des ressources informatiques.

Cependant, l'approche RANS n'est pas devenue désuète. Mehta *et al.* l'ont démontré très récemment [6] en prévoyant les niveaux de température et de fraction volumique de suie dans six flammes turbulentes en utilisant des paramètres fixes pour modéliser la chimie et les particules de suie. Leur but est de développer une approche complète pour la simulation des écoulements turbulents réactifs avec suies, en utilisant des modèles avancés. Pour modéliser la chimie et la formation des suies, les auteurs choisissent une approche déjà éprouvée sur des flammes laminaires prémélangées et à contre-courant (modèle 32 de [114]) : le mécanisme chimique est une réduction du mécanisme de Qin *et al.* [155] et comporte 33 espèces et 205 réactions élémentaires, et la dynamique des particules est modélisée par la méthode des moments en considérant les six premiers moments (voir section 3.1.2.2). Une approche basée sur le transport d'une PDF (*Probability Density Function*) de composition a été utilisée et étendue pour inclure les moments de la PSDF (*Particle Size Distribution Function*) des suies et ainsi prendre en compte l'effet des fluctuations turbulentes sur les sous-modèles non-linéaires de formation des suies. L'équation de transport de la PDF est résolue en approche lagrangienne par la méthode de Monte Carlo, la PDF étant ainsi représentée par un grand nombre de particules transportées dans l'écoulement. Les auteurs ont utilisé la méthode de Monte Carlo pour calculer les transferts radiatifs en tenant compte des espèces gazeuses CO_2 , H_2O et des particules de suie. Avec cette approche les auteurs ont simulé les flammes turbulentes à symétrie axiale de Coppalle et Joyeux [128], Kent et Honnery [153] et Endrud [186]. Les champs de température expérimentaux sont bien reproduits grâce à la prise en compte du rayonnement. Les niveaux de suies expérimentaux sont eux aussi correctement estimés par le calcul, à un facteur compris entre 1,5 et 2 sur une gamme étendue de nombres de Reynolds, de combustibles et de concentrations en suie représentée par les six flammes étudiées. Pour améliorer ces résultats déjà encourageants, il reste à modéliser l'agglomération des particules de suie, ce qui aura pour effet d'accroître les niveaux de suies calculés dans les flammes étudiées.

D'un autre côté, les simulations instationnaires donnent accès à la distribution spatiale instantanée des gaz chauds et frais, ce qui est important pour le rayonnement, et n'est pas possible en RANS. Desjardin *et al.* ont été parmi les premiers à avoir réalisé un calcul LES avec suies couplé au rayonnement [16]. Ils ont simulé en LES 2D une flamme plane turbulente de diffusion acétylène/air avec le modèle de formation des suies de Leung et Lindstedt et la méthode DOM (*Discrete Ordinates Method*) pour simuler leur

rayonnement. Leur but était d'améliorer leur modèle de combustion de sous-maille (approche de flammelettes) et d'appliquer leur méthodologie à une flamme turbulente. Les résultats ont montré que les fluctuations de fraction volumique de suie sont du même niveau que les moyennes, ce qui révèle un comportement fortement fluctuant. D'autre part, les auteurs ont montré que la TRI liée aux grandes échelles doit être prise en compte sous peine de largement sous-estimer l'émission radiative moyenne. Cependant le modèle de sous-maille utilisé ici pour prédire la composition du mélange en fonction de la fraction de mélange repose sur des relations empiriques tabulées qui limitent son utilisation dans des configurations et des régimes de combustion différents. Il sur-estime par ailleurs la température instantanée .

Gonçalves dos Santos *et al.* [17] ont couplé le code CFD AVBP avec un code de tracé de rayons 2D pour étudier l'effet du rayonnement sur la dynamique d'une flamme prémélangée propane/air à la stœchiométrie au moyen de calculs couplés 2D LES-rayonnement, suffisants pour une première approche malgré la forte limitation induite par le caractère bidimensionnel des calculs. Un modèle CK a été utilisé pour modéliser les propriétés radiatives de CO_2 et H_2O . Le couplage a été réalisé au moyen du langage spécialisé CORBA de manière asynchrone, le champ de puissance radiative transmis au code de CFD étant calculé sur le champ aérothermochimique de l'instant de couplage précédent. Des tests préliminaires ont montré qu'une période de couplage correspondant à environ $0,4\Delta t_{\text{conv}}$, où Δt_{conv} est le temps convectif d'une grande structure de l'écoulement, permet d'obtenir un bon compromis entre la précision des résultats et le temps de calcul. L'influence du rayonnement sur la flamme se caractérise par une baisse de température d'environ 10 % (soit 200 K), un lissage des gradients de température et une augmentation de l'épaisseur du front de flamme laminaire d'environ 30 %. Pour conserver la sensibilité du front de flamme aux mouvements turbulents résolus, l'épaisseur du front de flamme a été conservée lors du couplage du calcul LES avec le rayonnement, en ajustant les coefficients du modèle de flamme épaissie utilisé. Notons que la baisse de température observée dans la zone de recirculation en aval du dièdre qui sert d'accroche-flamme affecte la stabilité de la flamme, ce qui s'est traduit par une augmentation des valeurs RMS de température de 20 à 100 K. Enfin, les auteurs ont confronté leurs résultats à l'expérience en comparant des profils de variable d'avancement moyenne et de sa variance. Les comparaisons sont encourageantes et mettent en évidence l'importance de la prise en compte du rayonnement. Par la suite, Gonçalves dos Santos [187] a réitéré les calculs couplés en 3D et avec la méthode DOM, ce qui a permis de montrer le caractère tridimensionnel de la flamme ainsi que l'importance des conditions aux limites. Les résultats ont été améliorés par rapport aux calculs 2D. Plus récemment, Zhang *et al.* [188] ont confronté deux méthodes de calcul de rayonnement sur une flamme déjà étudiée par Gonçalves dos Santos *et al.* [17]. Des calculs de rayonnement avec la méthode de Monte Carlo et la méthode DOM ont été réalisés sur un champs instantané LES, sans réaliser de couplage. À paramètres identiques, la méthode de Monte Carlo apparaît moins coûteuse que la méthode DOM. La complexité de la configuration (grand nombre de bandes spectrales, présence de zones émettrices et de zones absorbantes et géométrie complexe) est en effet favorable à la méthode de Monte Carlo.

Très récemment également, Poitou *et al.* [18, 175, 189] ont étudié en détail le couplage LES-rayonnement dans le but de démontrer la faisabilité de calculs couplés instationnaires dans des configurations 3D avec un coût raisonnable. Une méthodologie de couplage optimisée a été élaborée dans ce but. Un modèle spectral global tabulé combiné à la méthode DOM ont permis d'obtenir des résultats précis avec un temps de calcul réduit. Un ordonnancement de couplage sous-cyclé à une période d'environ 100

itérations du solveur fluide a également contribué à réduire le temps de calcul. Enfin, les auteurs ont mis en place une méthode de réduction de maillage, permettant de s'affranchir de la finesse du maillage dédié à la LES pour le calcul du rayonnement, ce qui permet une réduction du coût de la méthode DOM proportionnelle au nombre de mailles. Cette méthodologie a été utilisée pour calculer la flamme turbulente prémélangée propane-air à richesse 1 calculée par Gonçalves dos Santos [187]. La prise en compte du rayonnement permet d'améliorer l'accord des résultats avec l'expérience [175]. L'effet du rayonnement est faible sur l'aérodynamique de l'écoulement, mais significatif localement sur la thermique : à proximité du front de flamme, la température est réduite jusqu'à 140 K tandis que dans les gaz frais, un réchauffement de 100 K est observé [18]. Cela a pour effet indirect de modifier les fluctuations de l'écoulement comme déjà observé dans [187], car dans cette chambre dotée d'un dièdre, les transferts thermiques jouent un rôle important dans la stabilisation de la flamme. De plus, le dégagement de chaleur est réduit de 15 % dans le front de flamme sous l'effet indirect du rayonnement, qui contribue à augmenter le plissement de la flamme [18]. Par ailleurs, les auteurs ont montré et vérifié *a posteriori* que, dans le cadre de l'approche LES, la TRI à l'échelle de sous-maille a un impact négligeable sur les transferts radiatifs [175]. Cette conclusion est en accord avec d'autres études portant sur le même sujet [190, 191]. L'effet d'un modèle de flamme épaissie sur les transferts radiatifs dans la flamme a également été évalué, montrant que le problème se rapproche de l'étude de l'effet de la TRI, étant donné que l'épaississement de la flamme a pour effet indirect de filtrer des fluctuations [175]. Pour des épaississements limités, l'effet de l'épaississement reste localisé et a peu d'impact sur les flux radiatifs globaux. Enfin, Poitou *et al.* [18] ont utilisé l'approche LES pour calculer les termes de corrélation rayonnement - turbulence dans la flamme considérée, afin de fournir des données pour le développement de la modélisation de la TRI pour l'approche RANS. Les auteurs ont ainsi observé que la TRI contribue à une augmentation globale de 7,4 % de la perte radiative de la flamme. Il apparaît que l'ensemble des termes de corrélations sont importants et ne peuvent être négligés.

On peut également citer les travaux de thèse de Hernández Vera [192] qui simule une flamme méthane/air à la pression atmosphérique stabilisée derrière un obstacle de manière similaire à la flamme de Gonçalves dos Santos [187]. La flamme est turbulente, partiellement prémélangée (injection séparée des réactifs) et dépourvue de suies. L'approche LES est utilisée pour simuler cette flamme en prenant en compte de manière simplifiée le rayonnement au moyen des hypothèses OTL (*Optically Thin Limit*) et de gaz gris. L'absorption des gaz n'est donc pas prise en compte : seule l'émission est calculée et considérée comme perte radiative. Les résultats montrent que le rayonnement induit une baisse progressive de la température des gaz le long de la chambre, qui atteint 300 K au bout de la chambre longue de 75 cm, ce qui permet de rejoindre les valeurs de température mesurées à cet endroit. Cette forte baisse de température due au rayonnement s'explique par la longueur de la chambre et des vitesses de convection de l'ordre de $25 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, ce qui donne un temps de séjour assez long par rapport à celui obtenu dans des chambres de combustion de configuration plus proche des chambres industrielles, comme la chambre TLC (voir chapitre 5) d'une longueur de 18 cm et dans laquelle l'écoulement atteint des vitesses de 40 à $80 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$.

Par ailleurs, Joseph *et al.* [193] ont développé une méthodologie pour calculer les transferts radiatifs dans les flammes en cherchant à quantifier l'erreur de la méthode DOM. Elle consiste à utiliser la méthode DOM pour calculer le champ de puissance radiative dans la flamme, mais comme la solution obtenue n'est pas exacte et l'erreur inconnue, la méthode de Monte Carlo est utilisée pour calculer la puissance radiative en un nombre limité de points représentatifs. En comparant les deux solutions en ces points,

on peut quantifier l'erreur commise avec la méthode DOM et augmenter sa convergence en cas d'erreurs trop importantes. Le potentiel de cette méthode a été démontré par des calculs non couplés sur un cas de validation académique et sur une chambre industrielle dotée d'un injecteur à swirl. En particulier, dans cette chambre, les auteurs comparent un profil de puissance radiative obtenu avec la méthode de Monte Carlo et avec la méthode DOM avec une quadrature S_4 et une quadrature LC_{11} . La quadrature LC_{11} (96 directions) donne des résultats très proches de ceux de la méthode de Monte Carlo, tandis que la quadrature S_4 induit une erreur d'au plus 20 %. Cette méthode de contrôle d'erreur permet donc de quantifier l'erreur commise avec la méthode DOM. Cependant une procédure de contrôle automatique reste à développer pour la réalisation de calculs couplés combustion-rayonnement.

La LES permet également de s'affranchir d'une partie de la modélisation de la TRI en résolvant les grandes échelles de l'écoulement. La modélisation de la TRI est alors cantonnée aux échelles de sous-maille. Outre les études précédemment citées [175, 189–191], Chandy *et al.* [19] ont caractérisé l'influence de la TRI à l'échelle de sous-maille dans une flamme à haute concentration en suies et fortement rayonnante. Pour cela, l'approche LES a été mise en œuvre avec, pour modélisation des échelles de sous-maille, le transport de la densité de masse filtrée (FMDF pour *Filtered Mass Density Function*). Les auteurs veulent démontrer que cette méthode est capable de traiter la TRI à l'échelle de sous-maille et quantifier l'influence de la TRI. L'équation de transport de FMDF est résolue par la méthode de Monte Carlo appliquée dans chaque cellule du maillage à un ensemble de particules. Le modèle de suies est basé sur une relation de type flammelettes entre la fraction volumique de suies et la fraction de mélange, ce qui en fait un modèle très simple. L'ETR (Équation du Transfert Radiatif) filtrée est résolue par la méthode DOM en supposant le milieu gris et non diffusif et en négligeant la participation des espèces gazeuses aux transferts radiatifs. Un des paramètres de l'étude est la prise en compte ou non de la TRI à l'échelle de sous-maille dans le calcul du terme d'émission moyen $\langle \kappa I_b \rangle$. En simulant une flamme acétylène/air choisie pour sa forte concentration en suies, les auteurs ont d'abord démontré que la prise en compte du rayonnement de la flamme induit une baisse de presque 50 % de la température, que ce soit avec DOM ou l'OTFA. En outre, les différences sont plus faibles entre les deux méthodes, l'OTFA sur-estimant les pertes radiatives. Dans un second temps, la comparaison de calculs réalisés avec DOM avec ou sans TRI à l'échelle de sous-maille a montré que négliger la TRI à l'échelle de sous-maille conduit à une sous-estimation des pertes par rayonnement et donc à un refroidissement insuffisant de la flamme. Le terme source radiatif moyen peut en effet être sous-estimé d'un facteur 2. Cependant, ces résultats mériteraient d'être confrontés à des résultats expérimentaux. Le modèle de suies pourrait également être amélioré, la formation des suies étant beaucoup plus lente que l'évolution de la fraction de mélange.

Dans un autre domaine d'application, Collin *et al.* [194, 195] ont développé une méthodologie de couplage pour la simulation de la dynamique d'un spray de gouttelettes d'eau dans un mélange gazeux d'air, de CO_2 et d' H_2O , et des transferts radiatifs dans ce milieu semi-transparent. Le but est de prédire l'atténuation à travers le spray d'une source de rayonnement incidente. Cette étude concerne la protection incendie par bouclier radiatif constitué de rideau ou brouillard d'eau destiné uniquement à absorber le rayonnement. La méthodologie développée consiste en un couplage itératif entre l'approche eulérienne utilisée pour la modélisation stationnaire de l'écoulement gazeux induit par le spray, l'approche lagrangienne qui simule la phase liquide dispersée et la méthode de Monte Carlo pour l'évaluation des transferts radiatifs. Les auteurs ont validé cette méthodologie et les modèles utilisés sur des résultats expérimentaux tels que la

température des gouttelettes et la transmittivité spectrale du spray. Bien que cette étude soit un peu éloignée de celle de la combustion dans les foyers aéronautiques, certains aspects pourraient servir, dans une étude future, à la modélisation de l'atténuation du rayonnement par les sprays d'injection de kérosène liquide dans les chambres de combustion, dans le but de prendre en compte l'effet du rayonnement sur la température des gouttes et indirectement sur leur évaporation.

Conclusion

Finalement, les études décrites précédemment révèlent que le couplage de la combustion instationnaire avec le rayonnement des gaz et des suies est un sujet de recherche en plein développement. Cependant, peu d'études parmi celles évoquées ci-dessus modélisent la formation des suies pour les prendre en compte dans les transferts radiatifs, et les études qui mettent en œuvre une telle modélisation négligent le rayonnement des gaz dans les applications considérées [16, 19]. Par ailleurs, le couplage entre un code CFD et un code de transfert radiatif doit être optimisé en cherchant à minimiser le surcoût dû au calcul du rayonnement, connu pour être élevé. Les études de Gonçalves dos Santos [187] et de Poitou [175] ont abordé ce problème en proposant une méthodologie applicable à notre étude. D'un autre côté, la plupart des études répertoriées ici ont été réalisées pour des géométries simples, et sur des flammes de laboratoire dont les conditions sont éloignées de celles rencontrées dans les chambres de combustion actuelles. Cet aspect a son importance car le coût du calcul de transfert radiatif dépend de la complexité de la géométrie du domaine de calcul, et cette dépendance est différente selon la méthode de calcul des transferts radiatifs utilisée. Par ailleurs, les coûts de calcul qui restent limités lorsqu'on traite des flammes de laboratoire sont accrus lorsqu'on est amené à traiter les flammes rencontrées dans les foyers aéronautiques actuels, car les vitesses d'écoulement et les fluctuations accrues limitent la période de couplage.

Dans ces travaux de thèse, on étudie l'effet du rayonnement des gaz et des suies dans un dispositif doté d'un injecteur industriel impliquant une injection de combustible liquide et des conditions de mélange et de combustion spécifiques, ce qu'aucune étude présentée ci-dessus ne traite en combinant tous ces aspects. Dans ce cadre, l'originalité de cette étude est de traiter l'ensemble de ces aspects dans une même simulation.

7.2 STRATÉGIE DE COUPLAGE LES-RAYONNEMENT

Il s'agit dans cette section de décrire une stratégie de couplage pour la réalisation de calculs instationnaires modélisant à la fois la combustion turbulente diphasique et les transferts radiatifs induits. Ce couplage est réalisé par méthode partitionnée, où l'on traite séparément chaque physique, tout en les faisant dialoguer entre elles.

On détaille dans cette section le contexte de couplage de codes au sein de la chaîne CEDRE et la stratégie de couplage instationnaire adoptée, incluant le choix du domaine de calcul et du maillage pour le calcul du transfert radiatif, l'établissement des échanges entre les solveurs, et l'élaboration de leur ordonnancement.

7.2.1 Parallélisation des différents solveurs de CEDRE et stratégie de partitionnement

Pour calculer l'écoulement turbulent réactif diphasique dans la chambre TLC présenté au chapitre 6, on a utilisé les solveurs CHARME et SPARTE, tous deux parallélisés par domaines géométriques. Le domaine de calcul est donc découpé en sous-domaines,

chacun étant pris en charge par un processus du calcul, comme schématisé sur la partie supérieure de la figure 7.1. On parlera dans ce chapitre de *processus* pour désigner les processus MPI établis pour gérer l'exécution parallèle du calcul, chaque processus étant hébergé sur un cœur physique d'un des processeurs du supercalculateur utilisé.

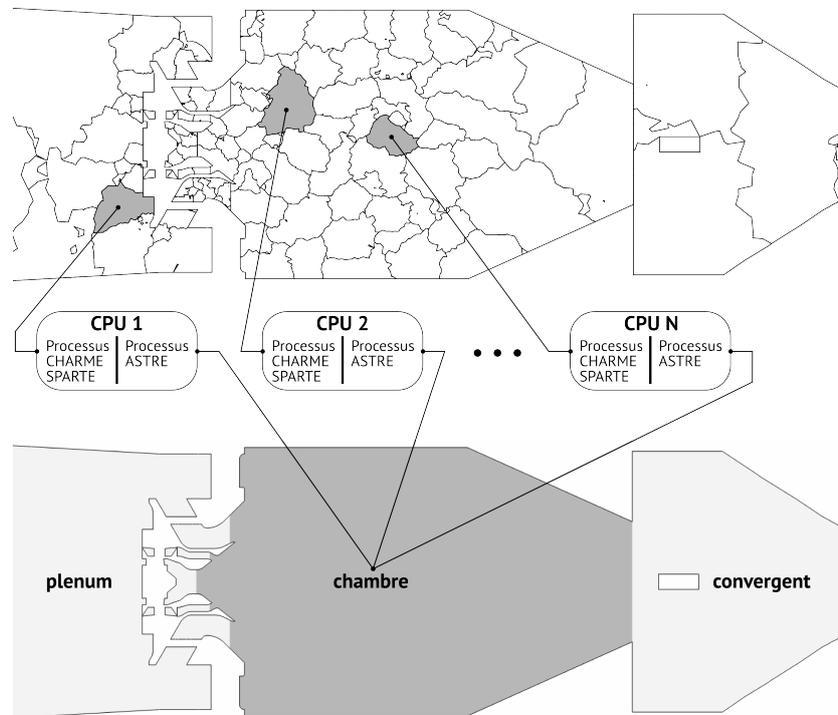


FIG. 7.1 | Mise en évidence des données géométriques nécessaires sur chaque cœur, selon le solveur utilisé : partitionnement par domaines géométriques (partie supérieure) et partitionnement par *domaines utilisateurs* (partie inférieure).

On ajoute à ce couplage bisolveur le solveur radiatif Monte Carlo ASTRE qui lui est parallélisé par trajectoires. Cela signifie, comme illustré sur la partie inférieure de la figure 7.1, que chaque processus doit connaître l'ensemble du domaine de calcul. Cela a plusieurs conséquences importantes pour la mise en place du couplage :

- chaque cœur doit héberger sur la mémoire qui lui est dédiée les données géométriques relatives à l'ensemble du maillage, ce qui peut occuper plusieurs Go de mémoire avec des maillages dépassant le million de mailles ;
- le traitement des données géométriques est différent selon la parallélisation adoptée ;
- les échanges de données entre ASTRE et les autres solveurs impliquent de réaliser des échanges entre les processus, dont le coût peut être réellement significatif.

Au cours de cette étude, le solveur ASTRE, qui constituait un code de calcul indépendant, a été implanté dans la chaîne CEDRE, et les difficultés qui viennent d'être répertoriées ont dû être résolues lors d'un travail de développement de grande envergure. Il a d'abord fallu convertir les données géométriques de CEDRE partitionnées par domaines géométriques pour qu'elles soient exploitables par ASTRE, qui concatène ces sous-domaines pour n'en former qu'un seul. Les échanges entre solveurs ont ensuite été établis, et sont décrits dans la section suivante. Un module d'archivage des résultats pour leur exploitation ultérieure par un logiciel de visualisation comme EnSight a également été mis en place. Enfin, l'ordonnancement du couplage a été conçu et optimisé pour la réalisation de calculs LES. Toutes ces fonctionnalités doivent bien entendu être parallélisées et pouvoir être compatibles le traitement de plusieurs sous-domaines par

processus, comme pour l'ensemble de la chaîne CEDRE.

Pour permettre la réalisation de calculs couplés avec le maillage présenté en section 5.2.2, l'occupation mémoire du solveur ASTRE a dû être réduite drastiquement en calculant les transferts radiatifs dans un domaine de calcul réduit par rapport à celui utilisé pour l'aérothermochimie. On peut en effet cantonner le calcul du rayonnement à la chambre de combustion, en excluant le plenum dans lequel l'écoulement est isotherme et froid, et le convergent aval qui n'est qu'un accessoire du banc d'expérimentation et non un organe du moteur. L'effet du rayonnement issu du convergent aval sur la chambre devra néanmoins être pris en compte. Grâce à la récente fonctionnalité *domaines utilisateurs* de CEDRE, le domaine de calcul a été partitionné en trois parties (domaines utilisateurs) mises en évidence sur la moitié inférieure de la figure 7.1. Ces trois parties sont traitées par les solveurs CHARME et SPARTE, tandis que le solveur ASTRE ne traite que la partie *chambre* pour le calcul des transferts radiatifs. On obtient alors la répartition du maillage sur les trois domaines utilisateurs donnée dans le tableau 7.1 : la chambre ne contient que 52 % des cellules du maillage, ce qui rend possible le calcul des transferts radiatifs dans la chambre. À titre d'exemple, le calcul couplé occupe alors 3,3 Go sur les 4 Go disponibles sur chaque cœur.

	Cellules	Faces	Répartition	Partitionnement
Plenum	1 890 474	3 844 610	46 %	222
Chambre	2 112 422	4 253 738	52 %	248
Convergent	83 272	171 592	2 %	10

TAB. 7.1 | Caractéristiques des trois domaines utilisateurs.

7.2.2 Échanges et ordonnancement du couplage multi-solveurs

On détaille dans cette section les spécificités du couplage entre les solveurs CHARME, SPARTE et ASTRE, concernant les échanges et l'ordonnancement du calcul couplé.

7.2.2.1 Échanges inter-solveur

Considérons d'abord les interactions possibles entre les gouttes de kérosène liquide et le rayonnement. En réalité, les gouttes de kérosène peuvent diffuser le rayonnement dans le milieu et en absorber une partie ; le rayonnement contribue ainsi à leur échauffement. Néanmoins, il serait nécessaire d'étudier ces interactions sur une configuration plus simple et fondamentale que la chambre TLC, pour pouvoir les modéliser correctement. Pour ne pas augmenter la complexité de l'étude, on choisit de négliger ces interactions. Les solveurs ASTRE et SPARTE n'échangent donc aucune donnée.

Entre CHARME et ASTRE, les échanges ont nécessairement lieu dans les deux sens pour un calcul instationnaire :

- CHARME \rightarrow ASTRE : les données locales de pression, température, fraction volumique de suies et fractions molaires des gaz pris en compte par le modèle de propriétés radiatives (généralement CO₂, H₂O et CO) sont transmises à ASTRE ;
- ASTRE \rightarrow CHARME : la puissance radiative locale est ajoutée au terme source \mathcal{S}_{e_t} de l'équation de l'énergie (1.9) résolue par CHARME, via la relation (1.11). En revanche, pour le calcul de la chambre TLC, les flux radiatifs pariétaux ne sont pas échangés puisque la conduction dans les parois de la chambre n'est pas modélisée.

Ainsi, les transferts radiatifs sont calculés à partir des conditions locales et instantanées de l'écoulement, pour obtenir une puissance radiative également locale et instantanée,

mais dépendante de l'état de l'ensemble de l'écoulement, le rayonnement étant un transfert d'énergie instantané à grande distance.

7.2.2.2 Ordonnancement du calcul couplé instationnaire

Il existe plusieurs algorithmes et stratégies pour ordonnancer un couplage par méthode partitionnée. Garaud [196] donne une description exhaustive de ces méthodes dans le cadre du couplage aérothermomécanique. Dans une précédente étude [197], ces méthodes ont également été mises en œuvre pour le couplage conduction-rayonnement.

Dans le cadre de cette étude, la chaîne CEDRE impose une méthode de couplage faible, c'est-à-dire sans retour en arrière possible et sans convergence forcée des itérations de couplage. Par ailleurs, le coût élevé des calculs radiatifs impose le sous-cyclage, qui consiste à réaliser $N_c > 1$ itérations d'avance en temps (CHARME-SPARTE) entre deux couplages avec le solveur radiatif. La période de couplage N_c doit être déterminée suivant le cas d'étude car elle dépend essentiellement du temps convectif dans la chambre.

Une stratégie de couplage séquentielle est utilisée et schématisée sur la figure 7.2 : le solveur radiatif récupère la solution de l'écoulement à l'instant courant, et dispose de l'ensemble des ressources informatiques pour évaluer le champ radiatif, pendant que le code CFD attend de le recevoir. Dès sa réception, le code CFD (ici CHARME-SPARTE) poursuit l'avance en temps du calcul pendant que le solveur radiatif attend le prochain instant de couplage. Cette méthode a pour avantage de permettre la consistance en temps du couplage. À l'inverse, Poitou [175] a utilisé une stratégie de couplage parallèle qui attribue une part des ressources informatiques à chaque solveur pour leur exécution en continu en parallèle, mais qui oblige le code CFD à utiliser, entre les instants $t = [(i + 1)N_c + 1] dt$ et $t = [(i + 2)N_c + 1] dt$, le champ radiatif calculé à partir du champ CFD obtenu à l'instant $t = (iN_c + 1) dt$.

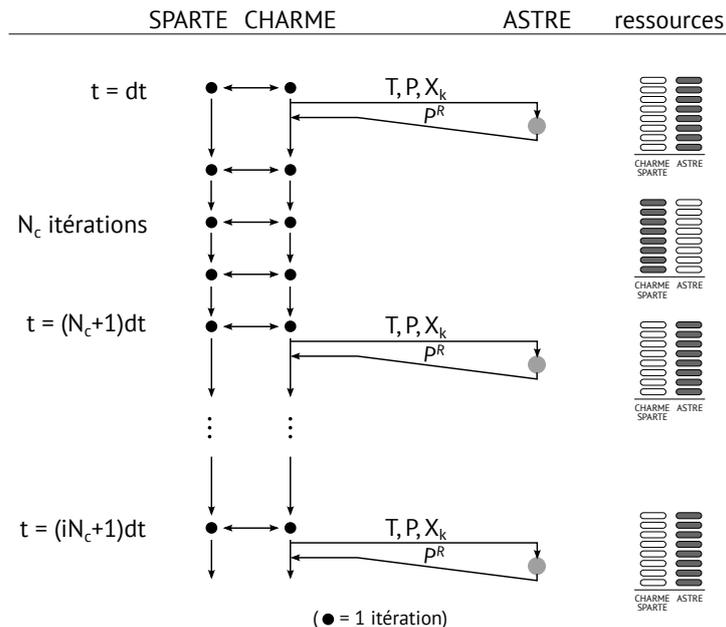


FIG. 7.2 | Ordonnancement séquentiel du couplage trisolveur et ressources associées.

7.3 PARAMÉTRISATION ET OPTIMISATION DU CALCUL DE TRANSFERT RADIATIF

Après avoir établi une méthodologie de couplage entre la modélisation instationnaire de l'écoulement turbulent diphasique réactif et celle des transferts radiatifs, il est nécessaire de mettre au point le calcul de rayonnement en choisissant les méthodes et paramètres adaptés, et de l'améliorer pour réduire au maximum les coûts de calcul. C'est l'objet de cette section, qui détaille les différents choix et améliorations réalisés à partir d'un calcul de référence.

7.3.1 Paramètres pour la simulation des transferts radiatifs dans la chambre TLC

Pour mettre au point le calcul des transferts radiatifs dans la chambre TLC, on se base sur un état instantané du calcul LES qui a été présenté en section 6.2 du chapitre 6. On détermine d'abord les conditions aux limites pour le rayonnement, les limites étant localisées sur la figure 7.3 et récapitulées dans le tableau 7.2. La partie *chambre* a été isolée conformément à la méthodologie de calcul détaillée en section 7.2.1 selon laquelle le calcul de rayonnement doit être restreint à cette partie du domaine de calcul.

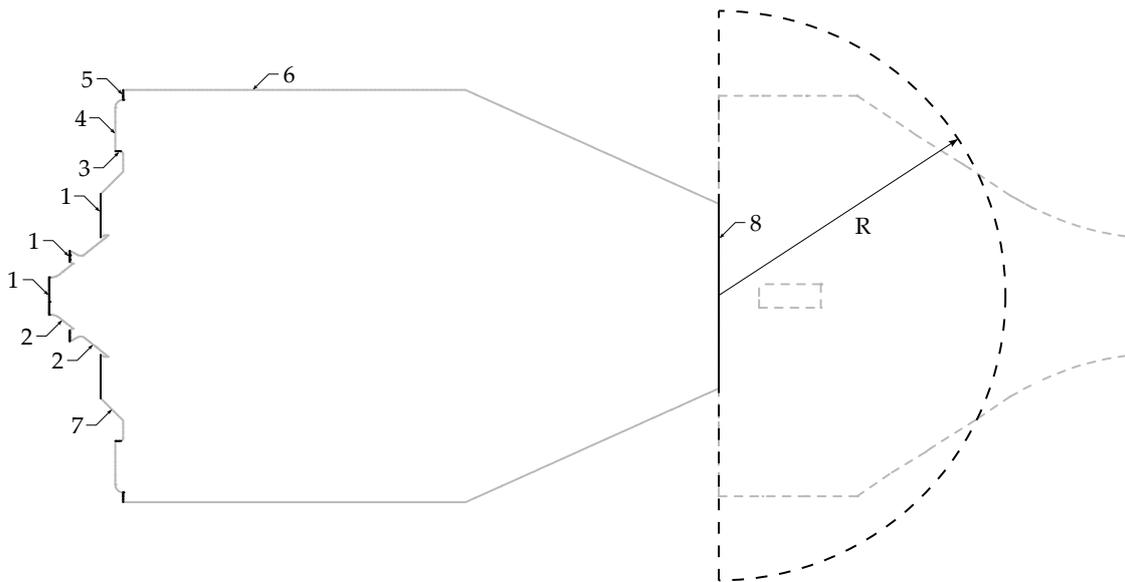


FIG. 7.3 | Localisation des différentes limites du calcul dans le domaine utilisateur *chambre* (traits pleins) : interfaces entre domaines utilisateur (en noir) et parois (en gris), et géométrie fictive utilisée pour fixer la condition limite aval du calcul radiatif (pointillés noirs).

Les parois de la chambre sont traitées comme des parois grises d'émissivité estimée à $\varepsilon = 0,8$, à défaut d'informations précises sur les caractéristiques radiatives de ces parois. Leur température, donnée dans le tableau 7.2, est celle obtenue par le calcul CFD réalisé sans prendre en compte les transferts radiatifs (présenté en section 6.2) et avec l'hypothèse de parois adiabatiques, sauf pour la frontière n° 6 dont la température est imposée. La réflexion sur toutes les parois est traitée de manière diffuse. Les interfaces 1 et 8 entre la chambre et le reste du domaine de calcul sont traitées du point de vue radiatif par des « orifices », de même que les entrées d'air de refroidissement 3 et 5. Une condition limite de type « orifice » est caractérisée par deux grandeurs : la température et l'émissivité du milieu extérieur situé derrière cette condition limite. Ces deux grandeurs ne servent qu'à définir le rayonnement entrant (émission du milieu extérieur entrant dans le domaine de calcul). En revanche, il n'y a pas de réflexion sur ce type de condition

Numéro de la frontière	Type de condition	T^*	ε
1	orifice	0,211	0,8
2	paroi	0,211	0,8
3	orifice	0,211	0,8
4	paroi	0,214	0,8
5	orifice	0,211	0,8
6	paroi	0,250	0,8
7	paroi	0,212	0,8
8	orifice	0,475	0,1

Tab. 7.2 | Conditions aux limites pour le calcul des transferts radiatifs dans le domaine utilisateur *chambre*, caractérisée par leur température adimensionnée T^* et leur émissivité grise ε .

quelle que soit la valeur de l'émissivité du milieu extérieur choisie : tout rayonnement incident sur ce type de condition limite sort intégralement du domaine de calcul. Les émissivités pour les interfaces entre le plenum et la chambre ont peu d'importance puisque l'air frais qui les traverse et les parois froides situées derrière ont un rôle négligeable sur les transferts radiatifs. En revanche, les caractéristiques de l'interface 8 entre la chambre et le convergent doivent modéliser l'effet des gaz brûlés situés derrière cette interface. Pour déterminer leur émissivité, valable dans toutes les directions, on considère l'émission des gaz brûlés situés dans une demi-sphère en aval de la limite considérée, schématisée sur la figure 7.3. Son rayon R est déterminé de manière à ce que le volume de la demi-sphère soit approximativement égal à celui de la géométrie réelle (en pointillés gris). En supposant les gaz brûlés uniquement composés de CO_2 , H_2O et N_2 , dont la composition, la température et la pression sont uniformes, on peut utiliser les corrélations de Leckner [198], dont on donne ici le principe. L'émissivité d'un mélange de CO_2 et H_2O est évaluée par l'expression suivante :

$$\varepsilon_{\text{CO}_2+\text{H}_2\text{O}} = \varepsilon_{\text{CO}_2} + \varepsilon_{\text{H}_2\text{O}} + \Delta\varepsilon(p_{\text{CO}_2}L, p_{\text{H}_2\text{O}}L), \quad (7.1)$$

où ε_i , avec $i = \text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}$, est l'émissivité d'un gaz contenant uniquement l'espèce i , et $\Delta\varepsilon$ est un terme de correction donné par Modest [199] prenant en compte le recouvrement partiel des bandes spectrales des deux espèces CO_2 et H_2O , dépendant des pressions partielles p_{CO_2} , $p_{\text{H}_2\text{O}}$ et de l'épaisseur $L (= R)$ de la couche de gaz. L'émissivité ε_i est évaluée à la pression p , à partir de l'émissivité $\varepsilon_{i,0}$ calculée à 1 bar, par la relation suivante :

$$\frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_{i,0}} = 1 - \frac{(a_i - 1)(1 - P_{E,i})}{a_i + b_i - 1 + P_{E,i}} \exp \left\{ -c_i \left[\log \frac{(p_iL)_{m,i}}{p_iL} \right]^2 \right\}, \quad (7.2)$$

où $P_{E,i}$ est une pression effective dépendant de la pression, et a_i , b_i , c_i et $(p_iL)_{m,i}$ sont des paramètres de la corrélation ([199]). Enfin, on évalue l'émissivité de l'espèce i à 1 bar par l'expression suivante :

$$\varepsilon_{i,0} = \exp \left[\sum_{k=0}^{M_i} \sum_{j=0}^{N_i} c_{jk,i} \left(\frac{T}{T_0} \right)^j \left(\log \frac{p_iL}{(p_iL)_0} \right)^k \right], \quad (7.3)$$

où les matrices de taille (M_i, N_i) des constantes de corrélation $c_{jk,i}$ sont données pour chaque espèce [199], T est la température du gaz adimensionnée par $T_0 = 1000 \text{ K}$, et $(p_iL)_0 = 1 \text{ bar cm}$. Pour les caractéristiques du gaz évaluées à partir du calcul de la section 6.2, réalisé sans prendre en compte le rayonnement et reproduites dans le tableau

7.3, on évalue finalement l'émissivité des gaz brûlés à $\varepsilon = 0,1$. En raison du caractère empirique de ces corrélations, on ne considère qu'un seul chiffre significatif pour cette valeur.

Paramètre	Valeur
Rayon de la demi-sphère $R = L$ (m)	$6,5 \cdot 10^{-2}$
Pression (Pa)	$8,8 \cdot 10^5$
Température T^*	0,475
Fractions molaires	
X_{CO_2}	$4,04 \cdot 10^{-2}$
$X_{\text{H}_2\text{O}}$	$4,08 \cdot 10^{-2}$

TAB. 7.3 | Conditions uniformes estimées des gaz brûlés situés dans le convergent en aval de la chambre.

Pour l'analyse des résultats de calcul de transfert radiatif présentés dans la suite de cette section, quatre profils dans la chambre ont été choisis sur le plan $z = 0$ afin de permettre la comparaison quantitative des puissances radiatives obtenues en fonction des différents paramètres testés (2 profils du type $x = \text{cste}$ et 2 profils du type $y = \text{cste}$). Ces profils, localisés sur le champ de température instantanée sur la figure 7.4, sont supposés être représentatifs de ce qui se passe dans l'ensemble de la chambre.

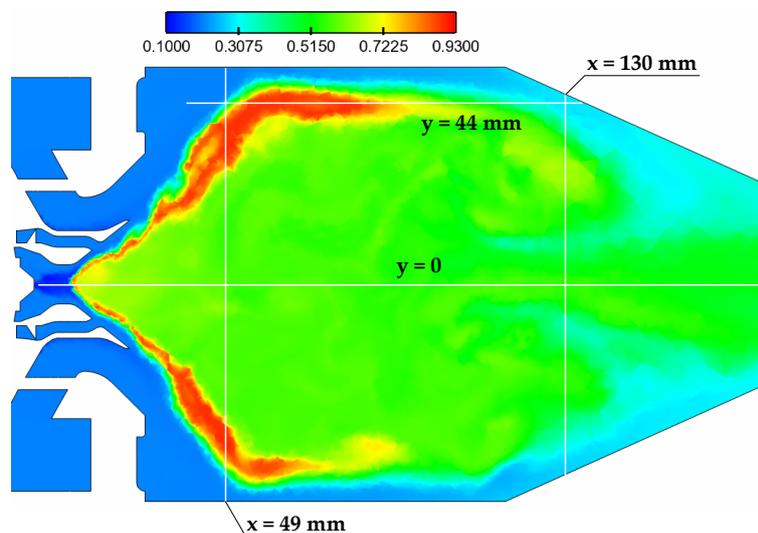


FIG. 7.4 | Visualisation des 4 profils examinés pour la mise au point du calcul des transferts radiatifs, superposés au champ instantané de température adimensionnée.

7.3.2 Calcul radiatif Monte Carlo de référence

Pour pouvoir estimer la précision des résultats lors de l'optimisation du calcul des transferts radiatifs dans la chambre TLC, un calcul très convergé, servant de référence, a été réalisé au moyen du code Monte Carlo ASTRE de la chaîne CEDRE. La section 2.2.1 donne quelques précisions sur le principe de la méthode de Monte Carlo.

L'état instantané qui sert à tous les calculs de cette section 7.3 est présenté sur la figure 7.5 qui donne les champs de température et de fractions molaires utilisés. Leur topologie est peu éloignée de celle des champs moyens, ce qui en fait des champs représentatifs des

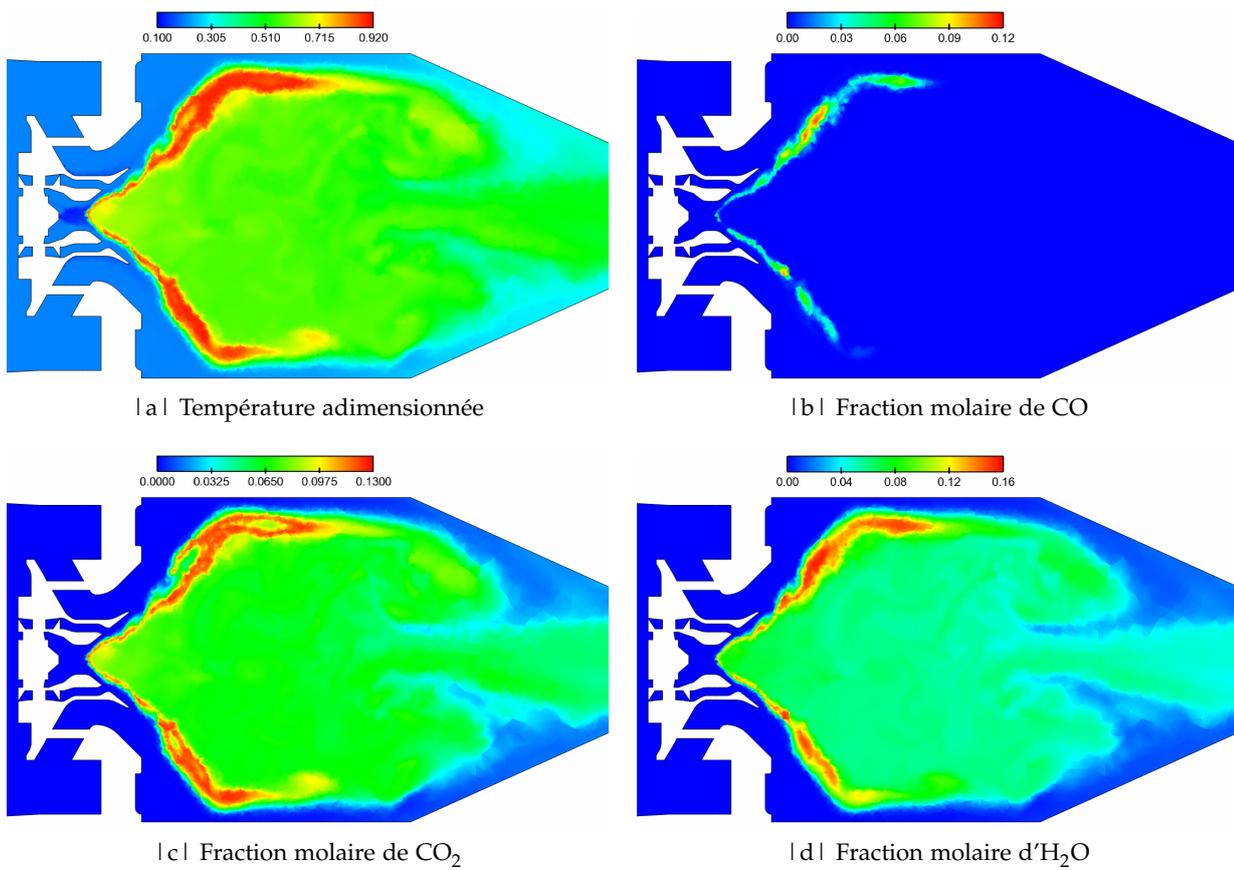


FIG. 7.5 | Champs instantanés LES utilisés pour la mise au point du calcul des transferts radiatifs dans la chambre TLC.

conditions que l'on peut rencontrer tout au long d'un calcul instationnaire. Dans cette section, on présente d'abord les champs de puissance et les grandeurs globales résultant du calcul de transfert radiatif. Pour expliquer les résultats obtenus, on s'intéresse ensuite au rôle de la dilution sur l'émission radiative, ainsi qu'à celui des différentes espèces participant aux transferts radiatifs.

7.3.2.1 Résultats du calcul radiatif de référence

Pour calculer les transferts radiatifs, $34,56 \cdot 10^9$ tirs ont été répartis sur 480 sous-calculs indépendants^(a), ce qui a permis d'obtenir des écarts types très bas, compris entre 0,1 et 1 %. La figure 7.6 présente les champs de puissances émise P^e , absorbée P^a et de puissance $P^R = P^a - P^e$ obtenus. On constate que les zones de fortes puissances émises et absorbées coïncident en raison de la présence simultanée des espèces CO₂, H₂O à haute température. Le champ de puissance radiative résultant est clairement corrélé à cette zone de haute température délimitée par l'isoligne $T^* = 0,750$, qui forme une zone fortement émettrice. La recirculation principale constitue une zone faiblement émettrice qui couvre une grande partie du volume de la chambre, tandis qu'en périphérie, on distingue une fine zone absorbante constituée de gaz brûlés refroidis par le mélange avec l'air frais.

(a). Les sous-calculs indépendants sont des réalisations statistiquement identiques qui diffèrent par les nombres aléatoires utilisés pour la construction des chemins optiques. La réalisation de plusieurs sous-calculs indépendants permet l'évaluation d'un écart type lié à la puissance radiative calculée dans chaque maille. Voir aussi la section 2.2.1.

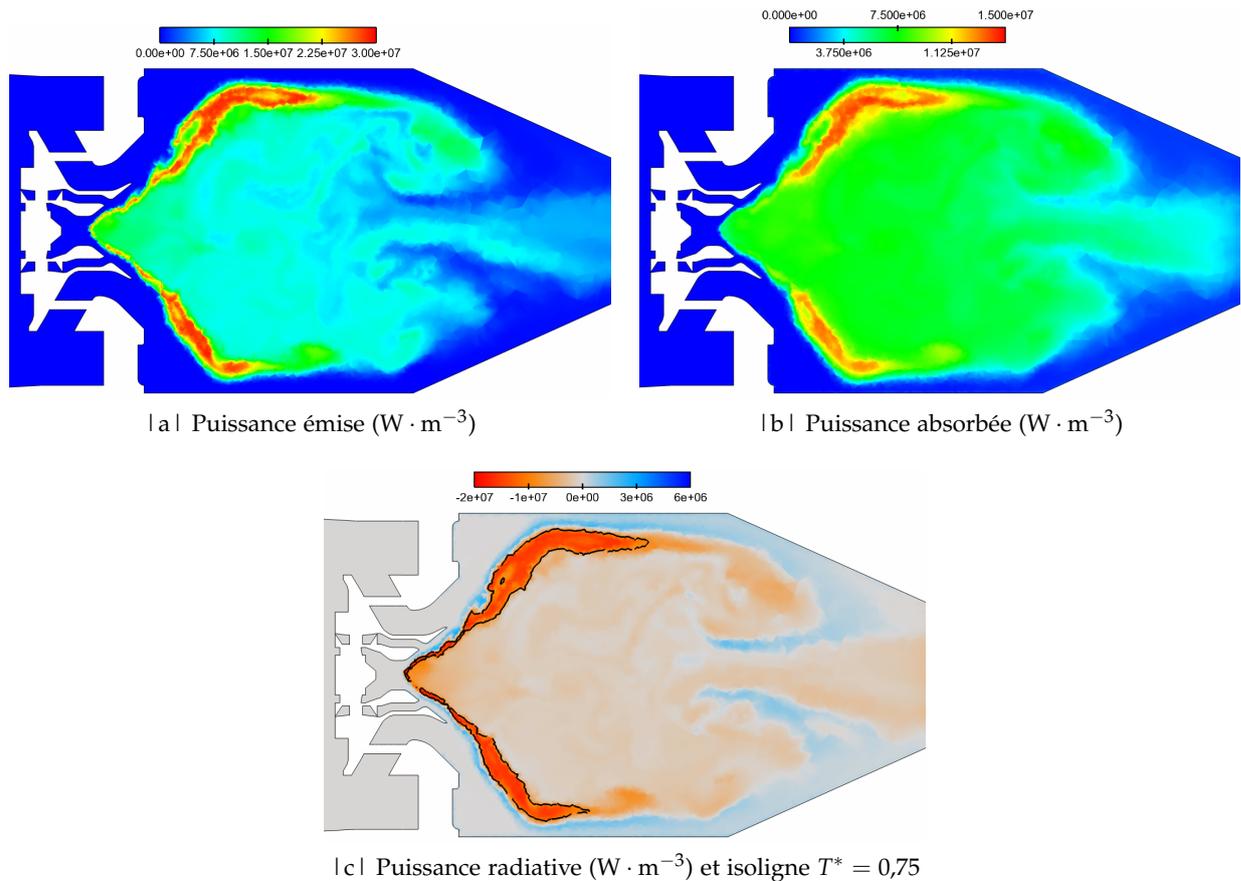


FIG. 7.6 | Champs de puissances obtenus sur l'instantané LES choisi, avec les paramètres de référence.

Globalement, la puissance émise totale s'élève à 9,25 kW, soit 1,66 % de la puissance chimique théorique dégagée. D'autre part, le milieu absorbe 68 % de cette puissance émise (soit 6,29 kW et 1,13 % de la puissance chimique théorique dégagée), ce qui signifie que le milieu ne peut pas être considéré comme optiquement mince, comme on le voit parfois dans certaines études [175, 192]. De tels résultats sont confirmés par le calcul des transferts radiatifs sur les champs moyens du calcul instationnaire, ce qui élimine la présomption d'un état instantané particulier non représentatif des conditions moyennes.

7.3.2.2 Influence de la dilution sur l'émission de rayonnement dans les flammes

Pour expliquer cette émission radiative très faible par rapport au dégagement de chaleur dû à la combustion, on s'intéresse à d'autres flammes étudiées dans la littérature, afin d'établir un lien entre la part d'énergie émise par rayonnement et les conditions de combustion. Contrairement à la chambre TLC en régime d'approche, la part de la puissance chimique émise sous forme de rayonnement peut être bien plus élevée dans d'autres flammes. On relève par exemple dans les travaux de thèse de Tessé [7] une puissance émise par les espèces CO_2 et H_2O de l'ordre de 25 % de la puissance chimique, dans une flamme turbulente de diffusion éthylène/air à pression atmosphérique.

Pour expliquer une telle différence, il faut analyser les conditions de combustion, comme le précisent Gaydon et Wolffhard [200] : pour des flammes partiellement pré-mélangées de type Bunsen, les pertes radiatives représentent 10 à 18 % de la puissance libérée par la combustion, en l'absence de suies. Mais ces pertes dépendent fortement de

l'influence de l'écoulement sur l'état thermo-chimique des gaz brûlés. Ainsi, l'émission de rayonnement peut être élevée si les gaz brûlés sont protégés de toute dilution par le reste de l'écoulement, puisqu'ils restent alors très chauds, et elle peut au contraire être beaucoup plus faible lorsque le mélange turbulent force la dilution des gaz brûlés avec de l'air frais, et donc une baisse de température du mélange, ce qui est le cas dans la chambre TLC.

En effet, l'énergie dégagée lors de la combustion sert à chauffer le mélange de gaz brûlés et de réactifs obtenu après combustion. Plus la richesse des gaz frais s'éloigne de la stœchiométrie, plus la température de ce mélange diminue. La puissance radiative émise peut donc être fortement diminuée du fait de sa dépendance en T^4 . Schmitt *et al.* [11] ont par exemple obtenu dans une flamme méthane/air swirlée de richesse globale 0,54 confinée à 5 bar 8 % de pertes radiatives, soit 3 fois moins que pour la flamme étudiée par Tessé [7], et dans une configuration plus proche de la chambre TLC. Par ailleurs, Gore et Zhan [201] ont fait varier la puissance émise par rayonnement par la seule variation du débit d'air de prémélange dans une flamme partiellement prémélangée méthane/air, tout en conservant une puissance dégagée par la combustion constante. Ils ont ainsi mis en évidence l'effet de la richesse des gaz frais sur la température des gaz brûlés et donc sur l'émission radiative.

La dilution est la cause d'une émission radiative faible dans la chambre TLC. Pour illustrer ce phénomène, en calculant les transferts radiatifs sur les champs moyens issus des calculs LES, on observe une baisse de 17 % de la puissance émise par rayonnement lors de la modification de la répartition des débits d'air (établie en section 6.2), qui consiste en une augmentation de près de 40 % du débit d'air passant à travers l'injecteur, tout en conservant la même richesse globale.

Par ailleurs, la part de puissance absorbée par le milieu est plus élevée dans la chambre TLC que dans la flamme étudiée par Tessé [7], avec 68 % d'absorption dans TLC contre 56 % pour les gaz seuls dans la flamme étudiée par Tessé. Cela s'explique d'une part par l'influence importante des conditions aux limites, qui réfléchissent dans TLC 20 % du rayonnement, alors qu'elles absorbent la totalité du rayonnement dans la configuration étudiée par Tessé [7]. L'émissivité des parois de la chambre TLC est un paramètre du problème qu'il faudrait connaître avec plus de précision, car il conditionne la répartition de l'absorption de la puissance émise entre le milieu et les parois. D'autre part, la topologie de la flamme dans TLC est très différente de la flamme jet de Coppalle et Joyeux [128] simulée par Tessé : cette dernière présente une zone chaude centrale, à partir de laquelle les photons émis traversent une zone moins chaude et absorbante d'épaisseur réduite, avant d'être évacués vers le milieu extérieur. Dans la chambre TLC, la zone chaude entoure la recirculation centrale composée de gaz brûlés à plus basse température. Cette zone occupant la majeure partie du volume de la chambre contribue alors à l'absorption du rayonnement émis par la zone chaude, ce qui a tendance à augmenter la part d'énergie absorbée par le milieu.

7.3.2.3 Rôle des différentes espèces gazeuses

Le rôle des différentes espèces participant aux transferts radiatifs est mis en évidence sur la figure 7.7 par le tracé des profils spectraux du coefficient d'absorption de chaque espèce sur la plage de température des gaz brûlés dans la chambre TLC, et pour une composition et une pression représentatives des conditions relevées dans la chambre. Pour les 4 valeurs de température choisies, la forme des profils est similaire et seule l'amplitude des profils varie, diminuant lorsque la température augmente. Ce comportement est dû à l'augmentation de la population d'états excités des molécules

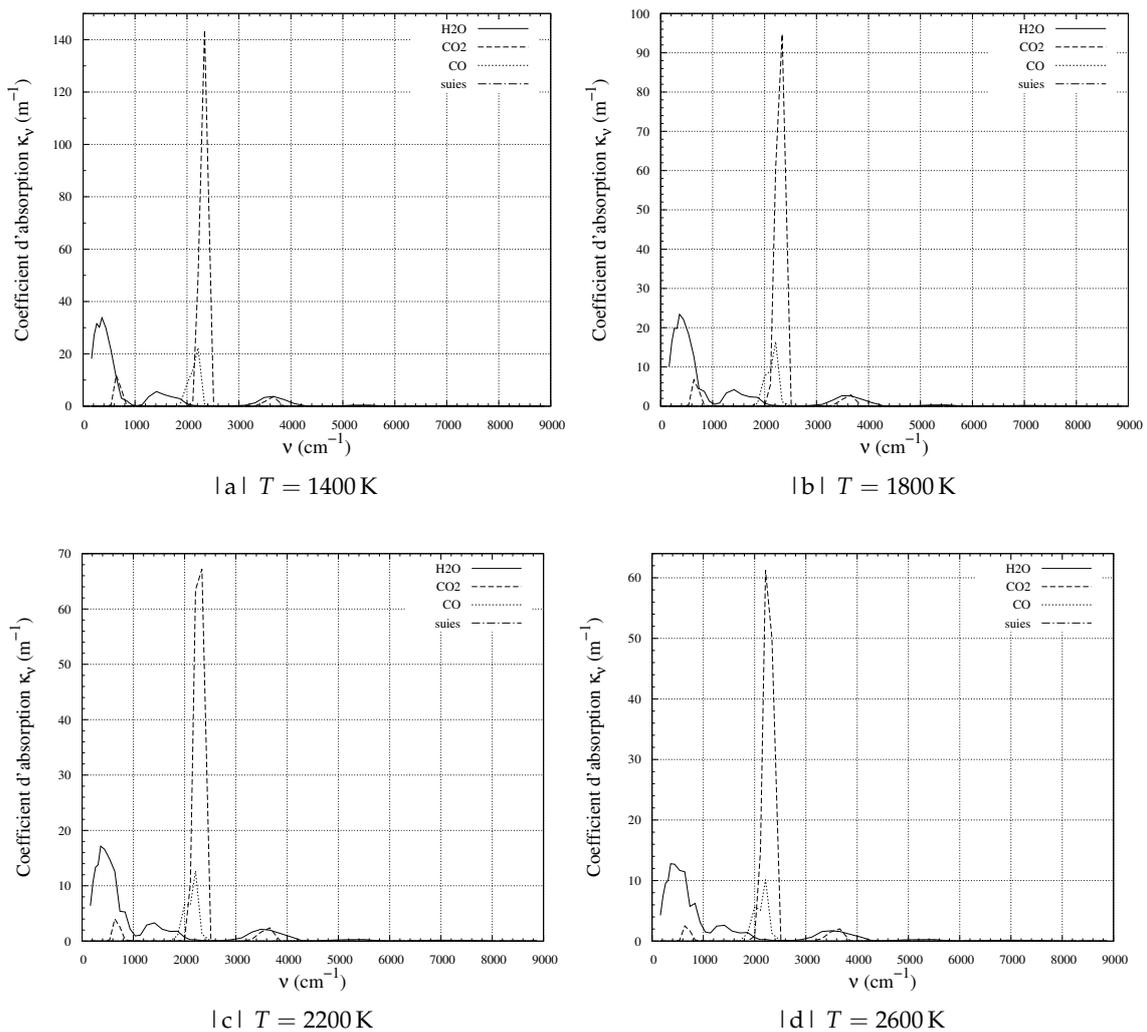


FIG. 7.7 | Profils spectraux du coefficient volumique d'absorption κ_v des espèces prises séparément, à $P = 9$ bar, $f_v = 3,5 \cdot 10^{-9}$, $X_{\text{CO}_2} = X_{\text{H}_2\text{O}} = 0,06$, $X_{\text{CO}} = 0,1$, et pour plusieurs valeurs de température.

avec la température, ce qui diminue en conséquence la population d'états non-excités susceptibles d'absorber des photons. On observe sur ces spectres que le CO a un rôle limité à une seule bande de faible amplitude à 2200 cm^{-1} , et le coefficient d'absorption des suies est de l'ordre de 10^{-2} m^{-1} pour $f_v = 3,5 \cdot 10^{-9}$ et donc indiscernable sur la figure 7.7.

Ces spectres sont à mettre en relation avec les contributions des différentes espèces aux parts de puissances absorbée et émise dans la chambre TLC, représentées sur la figure 7.8. Ces données ont été obtenues en réalisant plusieurs calculs, chacun prenant

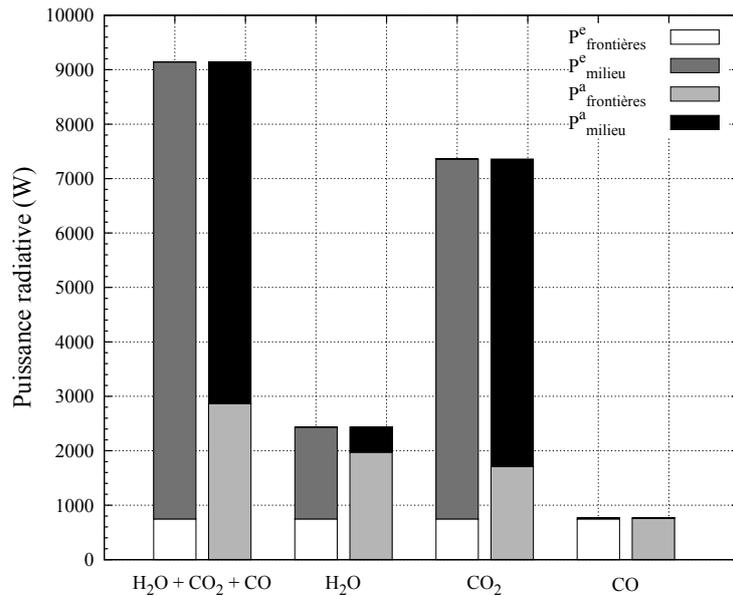


FIG. 7.8 | Histogramme de la répartition des puissances émises et absorbées par chaque espèce prise séparément dans la chambre TLC.

en compte de façon isolée une espèce. Elles ne tiennent donc pas compte des interactions entre espèces, une espèce pouvant absorber le rayonnement émis par une autre. On constate que la puissance émise P_{milieu}^e par le CO₂ est presque 4 fois plus élevée que celle émise par H₂O (soit 79 % de l'émission totale du milieu), en raison de la bande très intense du CO₂ observée à 2300 cm^{-1} sur la figure 7.7. À l'opposé, l'émission du CO est négligeable car il n'est pas présent en assez grande quantité dans la chambre, et son coefficient d'absorption est relativement faible. La part d'énergie absorbée P_{milieu}^a représente quant à elle 19 % de la puissance totale émise par le milieu et les frontières pour H₂O, tandis que CO₂ en absorbe 77 %. Cette différence est due à l'amplitude du coefficient d'absorption qui est presque 4 fois plus élevée pour CO₂ que pour H₂O. Ces proportions sont très similaires à celles obtenues par Tessé [7] sur une flamme turbulente de diffusion éthylène/air à pression atmosphérique, très différente de la flamme étudiée ici. En considérant le mélange des 3 espèces, on retrouve la part d'absorption de 68 % déjà discutée en section 7.3.2.1.

7.3.3 Amélioration du calcul des transferts radiatifs dans la chambre TLC avec la méthode de Monte Carlo

On propose dans cette sous-section d'exposer la manière dont la parallélisation du solveur ASTRE a été modifiée dans le but de réduire au maximum le temps de calcul nécessaire à l'évaluation des transferts radiatifs dans la chambre TLC. Les performances du solveur ASTRE conditionnent en effet les possibilités de réalisation de calculs couplés

LES-rayonnement. On présente d'abord la problématique, puis la nouvelle parallélisation utilisée et ses effets sur le calcul.

7.3.3.1 Parallélisation par sous-calculs indépendants.

Jusqu'alors, la parallélisation du solveur ASTRE était réalisée par sous-calculs indépendants : un calcul Monte Carlo était divisé en un certain nombre N_{sc} de sous-calculs de mises en données identiques, mais qui diffèrent par les nombres aléatoires utilisés pour le tirage au sort des caractéristiques des chemins optiques^(b) (point d'émission dans la maille, direction d'émission, nombre d'onde associé). Chaque processus parallèle est affecté à un cœur et réalise un seul sous-calcul indépendant. Les résultats de chaque sous-calcul sont ensuite mis en commun pour obtenir, en tout point du maillage, des grandeurs radiatives moyennes et un écart type associé, ce qui permet de quantifier localement la convergence des résultats (le lecteur peut également se reporter à la section 2.2.1 et à la référence [52]).

L'objectif de cette section étant de déterminer le temps de calcul minimal nécessaire à l'obtention d'un champ de puissance radiative avec une précision raisonnable, il s'agit de réduire le nombre total de tirs $N_{tot} = N_t \times N_{sc}$, produit du nombre de tirs N_t affecté à chaque sous-calcul et du nombre de sous-calculs N_{sc} . Comme le nombre de cœurs des architectures parallèles est en constante augmentation, on ne peut pas diminuer le nombre de cœurs N_{sc} du calcul. On cherche donc à réduire le nombre de tirs N_t affectés à chaque sous-calcul indépendant, avec cependant une limite inférieure, sous peine de fausser le calcul. En effet, pour des valeurs de N_t trop faibles, la procédure déterministe de distribution spatiale des tirs à émettre néglige la puissance émise par certaines mailles, en n'affectant aucun tir à ces mailles. Ce comportement conduit à sous-estimer la puissance émise totale, d'autant plus si le nombre de mailles concernées est élevé. Pour limiter ce comportement, la puissance émise par les mailles de plus faible émission est négligée en priorité.

Avec cette parallélisation par sous-calculs indépendants, le calcul le plus rapide que l'on peut obtenir tout en conservant une bonne précision sur les puissances radiatives réalise 480 sous-calculs de $N_t = 1,6 \cdot 10^6$ tirs chacun, pour une durée de 330 s sur 480 cœurs Westmere, ce qui reste élevé par rapport au coût d'une itération CFD de l'ordre de 2 s. Les résultats obtenus sont comparés sur la figure 7.9 à ceux du calcul de référence de la section 7.3.2. L'écart type passe de 0,1 % à 0,8 % environ dans les zones fortement émettrices, et de 1 % à 6 % environ dans les zones faiblement émettrices, ce qui reste acceptable, d'autant plus que les profils de puissance radiative sont très proches.

Comme la procédure de distribution spatiale est déterministe, elle est identique pour chacun des N_{sc} sous-calculs indépendants. Par conséquent, avec cette parallélisation, une maille émet au minimum, pour le calcul complet, soit aucun tir (lorsque l'émission de la maille est négligée), soit N_{sc} tirs (lorsqu'un seul tir est affecté à la maille dans chaque sous-calcul), ce qui est pénalisant lorsque le nombre de cœurs N_{sc} du calcul est élevé. La valeur minimale de N_t étant limitée par l'erreur faite sur la puissance émise, la réduction du coût du calcul radiatif, proportionnel au nombre de tirs total $N_{tot} = N_t \times N_{sc}$, est en conséquence limitée et insuffisante pour réaliser des calculs couplés LES-rayonnement.

(b). Dans ce qui suit, on désignera par *tirs* les chemins optiques, qui représentent le parcours de photons transportant une certaine quantité d'énergie dans le milieu.

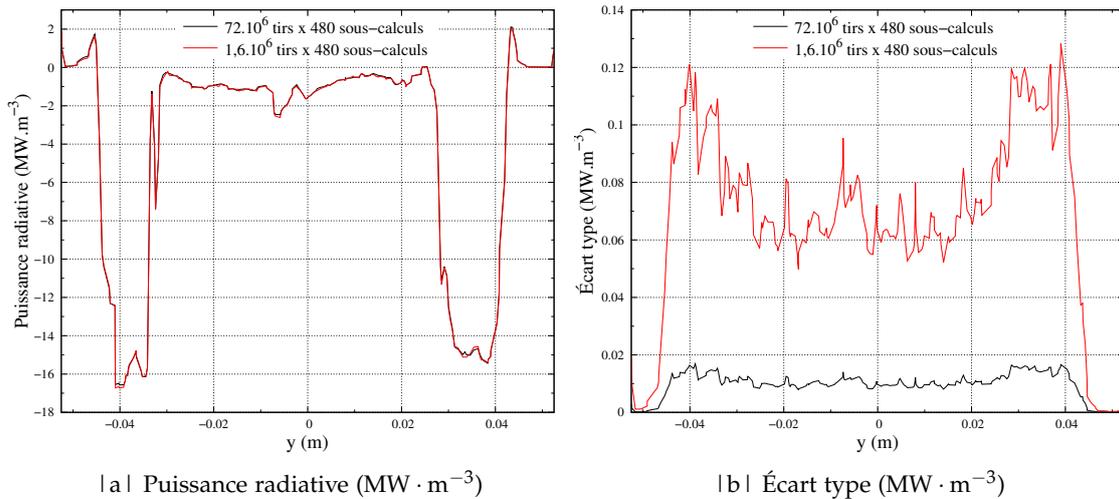


FIG. 7.9 | Comparaison sur le profil $x = 49$ mm des puissances et écarts types du calcul de référence et du calcul réalisé avec 480 sous-calculs de $1,6 \cdot 10^6$ tirs chacun.

7.3.3.2 Développement d'une parallélisation par trajectoires adaptée aux architectures massivement parallèles.

Pour réduire davantage le coût de calcul, une parallélisation par paquets de trajectoires a été mise en place, abandonnant la réalisation de plusieurs sous-calculs indépendants. On utilise la méthode déterministe de distribution spatiale pour répartir l'ensemble des N_{tot} tirs à émettre sur le maillage. Dans ce cas, le nombre de tirs affectés à chaque maille n'est pas un multiple de N_{sc} , comme c'était le cas avec la parallélisation par sous-calculs, ce qui permet de réaliser une bien meilleure répartition lorsque N_{tot} est peu élevé. Chaque processus parallèle traite ensuite la construction des trajectoires d'un paquet de $N_{\text{tot}}/N_{\text{sc}}$ tirs. Les tirs émis à partir d'une même maille sont traités préférentiellement par des processus différents, ce qui permet d'équilibrer au mieux les charges de tous les processus indépendamment de la distribution spatiale. Cependant, cette parallélisation ne permet plus d'obtenir des écarts types associés aux puissances radiatives calculées, puisqu'un seul sous-calcul est réalisé. Comme les écarts types varient $1/\sqrt{N_{\text{tot}}}$, on peut néanmoins estimer les écarts types d'un calcul effectué avec la parallélisation par trajectoires à partir d'un autre effectué avec la parallélisation par sous-calculs.

Cette nouvelle parallélisation permet ainsi de réduire le nombre de tirs de façon importante tout en conservant des puissances radiatives acceptables. Ainsi, au lieu de devoir effectuer 480 sous-calculs répartissant chacun $1,6 \cdot 10^6$ tirs (soit $768 \cdot 10^6$ tirs au total) sur le maillage comptant $2,1 \cdot 10^6$ mailles dans la partie *chambre* (voir section 7.3.3.1), la parallélisation par trajectoires permet d'obtenir des résultats corrects en traitant seulement $110 \cdot 10^6$ tirs. Les écarts types de ce calcul sont estimés en fonction de ceux du calcul parallélisé par sous-calculs : 2 % dans les zones fortement émettrices, et 16 % environ dans les zones faiblement émettrices. Les puissances obtenues sont comparées à la solution de référence sur les quatre profils choisis sur la figure 7.10. Malgré des écarts types élevés, les puissances restent néanmoins relativement proches de la solution de référence, en fluctuant autour de celle-ci. Le gain d'un facteur 7 sur le nombre total de trajectoires construites se traduit par une accélération du calcul ASTRE d'un facteur 5,5, permettant d'obtenir un calcul d'une durée d'environ 60 s sur 480 cœurs.

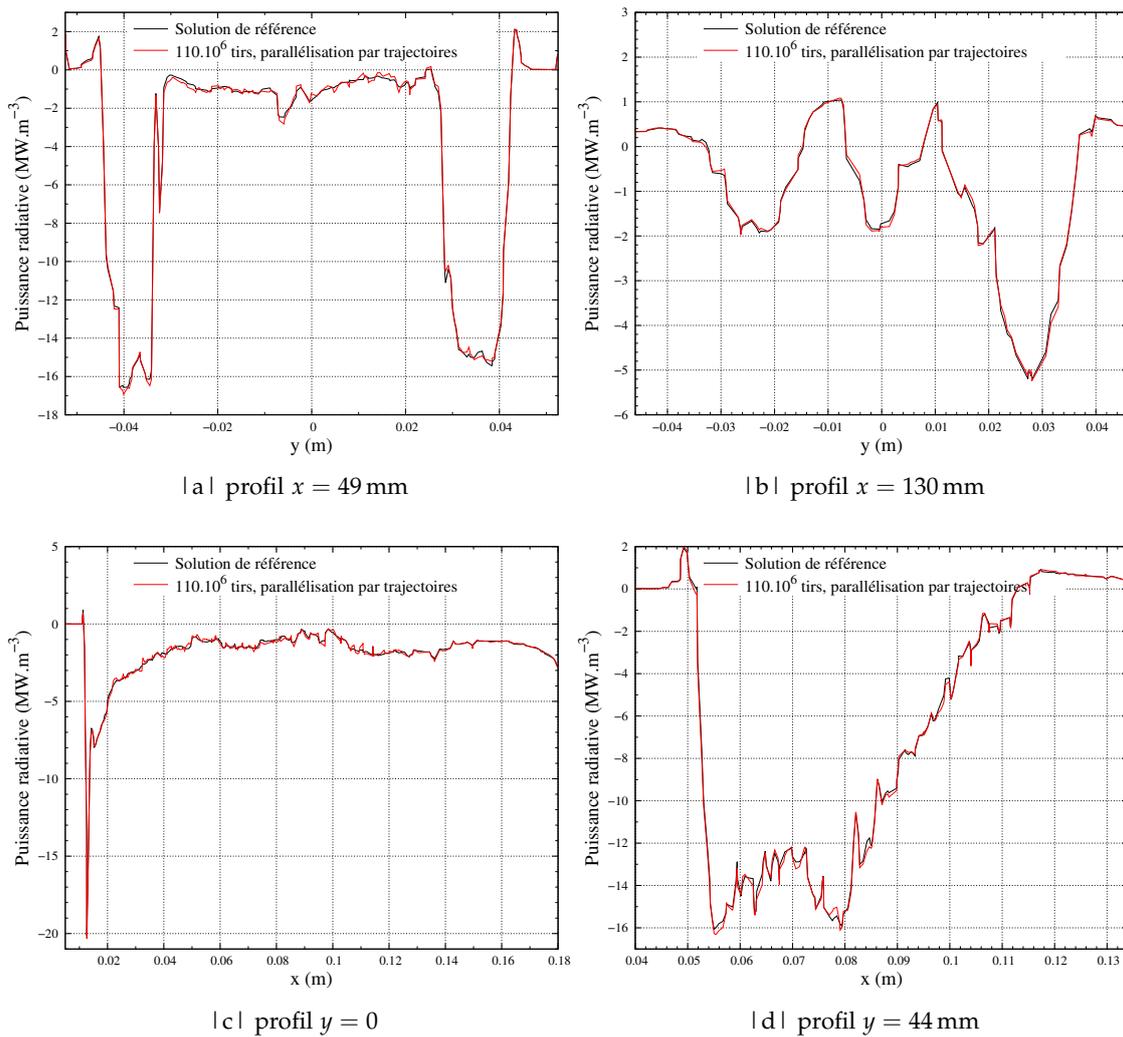


FIG. 7.10 | Puissances obtenues avec la parallélisation par trajectoires par rapport à la solution de référence, sur les 4 profils étudiés.

Pour montrer l'intérêt crucial de cette parallélisation, un calcul avec la parallélisation par sous-calculs indépendants a été réalisé avec 480 sous-calculs et un nombre de tirs total équivalent à celui utilisé pour le calcul parallélisé par trajectoires ($110 \cdot 10^6$ de tirs). On confronte les résultats des calculs sur la figure 7.11. Le constat est sans appel : la parallélisation par sous-calculs indépendants ne permet pas de réaliser un calcul correct avec si peu de tirs ($251 \cdot 10^3$) pour chaque sous-calcul.

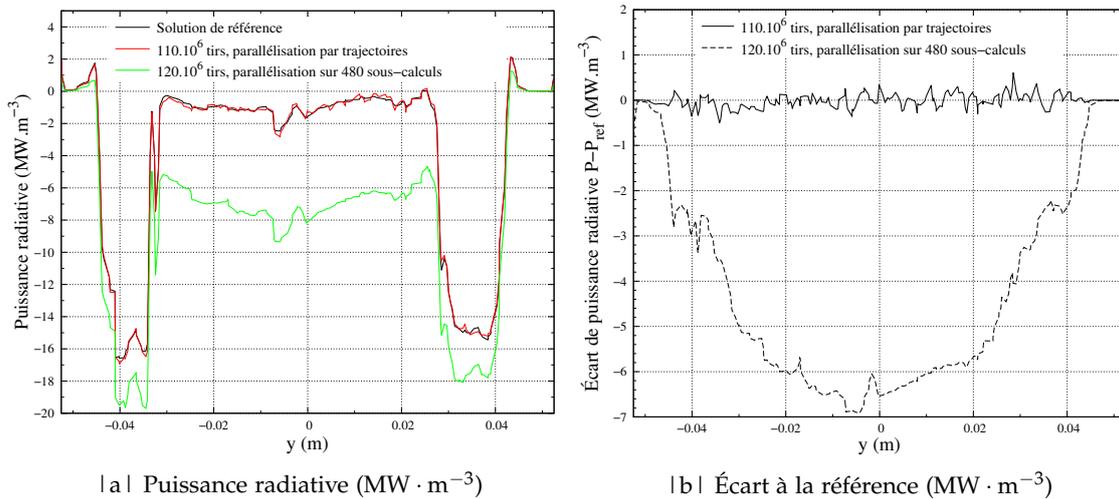


FIG. 7.11 | Comparaison des puissances obtenues pour un nombre de tirs total équivalent, avec les parallélisations par sous-calculs et par trajectoires, sur le profil $x = 49$ mm.

7.3.4 Choix de la distribution spatiale et de la méthode de Monte Carlo

Comme détaillé dans la section 2.2.1 du chapitre 2, on dispose dans ASTRE de deux méthodes de distribution spatiale des tirs à émettre (UD et NUD), ainsi que de quatre méthodes d'évaluation de la puissance radiative dans chaque maille (FM, ERM, ARM et ORM). On propose de tester ces méthodes sur la configuration TLC pour déterminer les plus adéquates dans le cadre des calculs couplés LES-rayonnement, en comparant les 8 combinaisons sur l'état instantané utilisé pour les calculs des sections précédentes.

On compare d'abord les puissances radiatives obtenues pour ces différentes méthodes, tracées sur la figure 7.12 pour le profil en $x = 49$ mm. On constate, à la fois pour UD et NUD, que les puissances issues des méthodes FM, ERM et ORM sont pratiquement confondues, à part dans les zones absorbantes où ERM induit une erreur non négligeable. Quant à la méthode ARM, elle se distingue des autres par une forte erreur dans les zones fortement émettrices, et plus faible dans les zones faiblement émettrices, ce qui la disqualifie par rapport aux autres méthodes.

Pour comparer les méthodes FM, ERM et ORM, ainsi que les répartitions UD et NUD, on trace les écarts types obtenus sur les quatre profils étudiés (voir figure 7.4), sur les figures 7.13 et 7.14. La méthode FM se révèle être la meilleure, présentant les écarts types les plus faibles, même si sur les profils en $x = 130$ mm et $y = 0$, la méthode ARM est parfois meilleure. Notons que l'on observe, dans les zones faiblement émettrices et dans les zones absorbantes, que la méthode ORM produit des écarts types supérieurs à ceux de la méthode ARM, alors qu'ils sont censés être inférieurs à ceux obtenus avec ERM et ARM [54]. Cela vient de l'hypothèse de milieu optiquement mince faite par Dupoirieux *et al.* [54] lors de l'établissement de la formulation de la méthode ORM. On constate ici que cette formulation atteint ses limites dans un milieu qui n'est pas

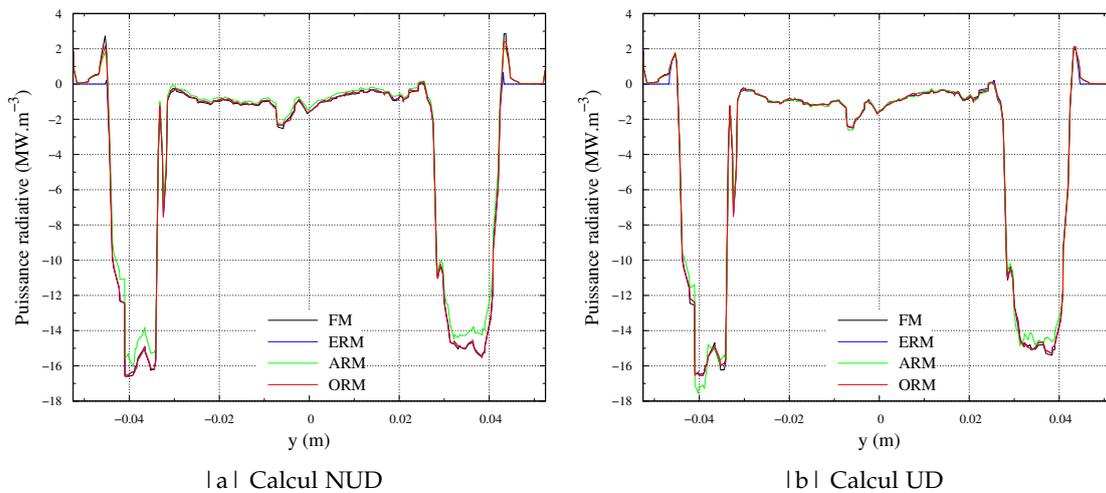


FIG. 7.12 | Comparaison des puissances obtenues avec les distributions non-uniforme (à gauche) et uniforme (à droite), sur le profil $x = 49$ mm.

optiquement mince. Par ailleurs, la distribution non-uniforme (NUD) est globalement meilleure que la distribution uniforme (UD), notamment sur les profils en $x = 130$ mm et $y = 44$ mm. La distribution uniforme n'est meilleure que sur la portion $x < 30$ mm du profil en $y = 0$.

Finalement, on choisit pour la suite de l'étude la combinaison de la méthode FM et de la distribution NUD qui donne partout de bons résultats et minimise les écarts types, ce qui est cohérent avec l'étude de Tessé *et al.* [9] dans une flamme turbulente de diffusion d'épaisseur optique modérée.

7.3.5 Évaluation des performances des méthodes DOM et Monte Carlo

La chaîne CEDRE comporte deux solveurs de rayonnement : le solveur REA qui utilise la méthode des ordonnées discrètes (DOM pour *Discrete Ordinates Method*) pour résoudre l'ETR, et le solveur ASTRE qui calcule les puissances et flux radiatifs de manière stochastique avec la méthode de Monte Carlo. La section 2.2 du chapitre 2 donne quelques précisions sur le principe de ces deux méthodes. On évalue dans cette étude les performances de ces deux solveurs afin de choisir le moins coûteux pour réaliser des calculs couplés LES-rayonnement. Les solveurs sont évalués en l'état actuel du code CEDRE, et comportent des différences de conception : ASTRE est parallélisé par chemins optiques (voir section 7.3.3), tandis que REA l'est par domaines géométriques. On a vu en section 7.2.1 que ASTRE est capable de mobiliser tous les processus du calcul pour ne simuler les transferts radiatifs que sur une partie du domaine de calcul. REA est quant à lui contraint de calculer le rayonnement sur l'ensemble de ce domaine, en l'état actuel du code, ce qui sous-estime potentiellement les performances de REA d'un facteur 2 pour la chambre TLC.

Les transferts radiatifs ont été calculés avec les deux solveurs à partir des champs instantanés présentés en section 7.3.2, avec plusieurs niveaux de convergence, et comparés à une solution Monte Carlo de référence, très convergée. REA possède deux paramètres d'entrée : le choix de la quadrature S_n qui fait varier le nombre de directions calculées en $n(n + 2)$, et le critère de convergence qui limite le nombre d'itérations réalisées pour prendre en compte les réflexions des rayons sur les parois.

On procède en deux temps pour comparer les performances des solveurs : on réalise

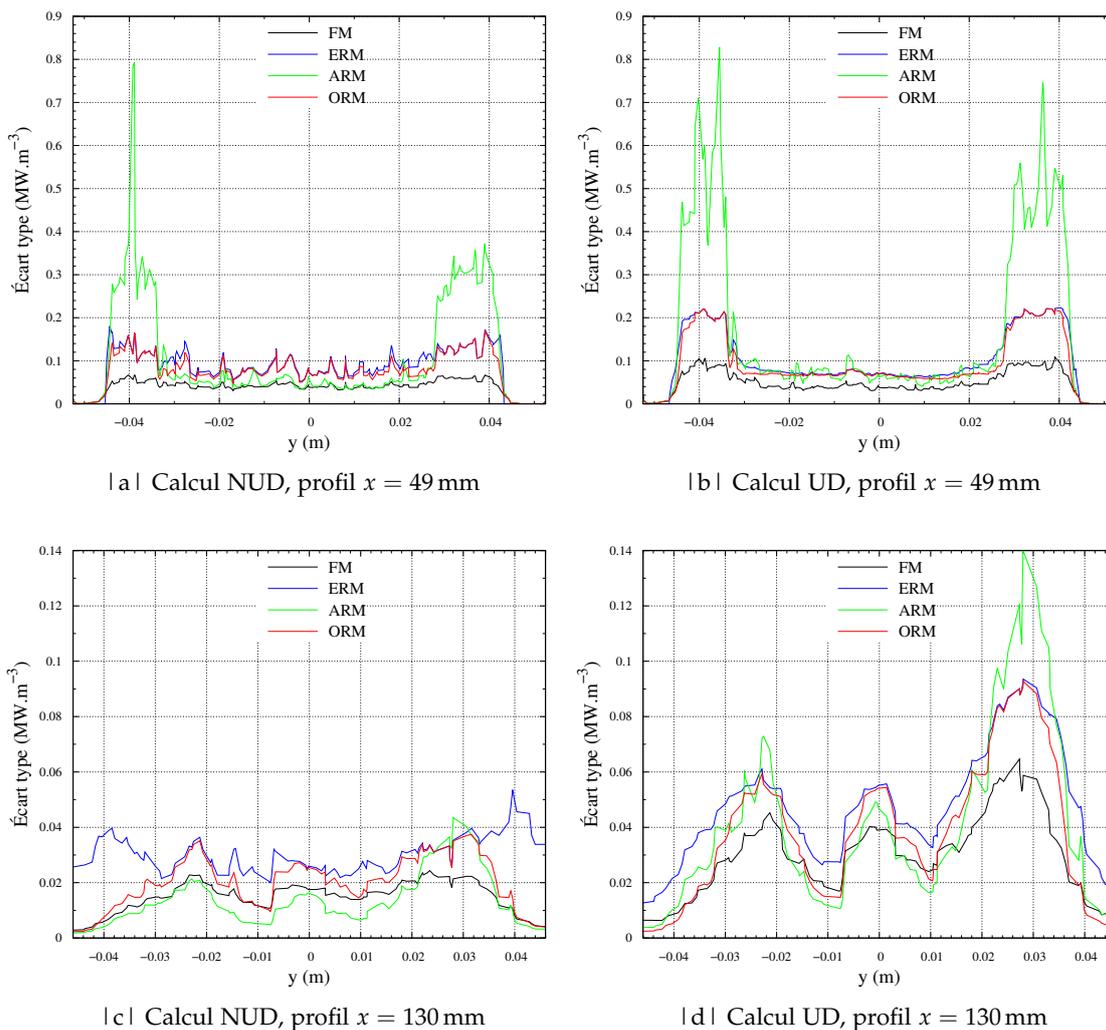


FIG. 7.13 | Comparaison des écarts types obtenus avec les distributions non-uniforme (à gauche) et uniforme (à droite) et les méthodes directe et réciproques, sur les profils $x = 49$ mm (haut) et $x = 130$ mm (bas).

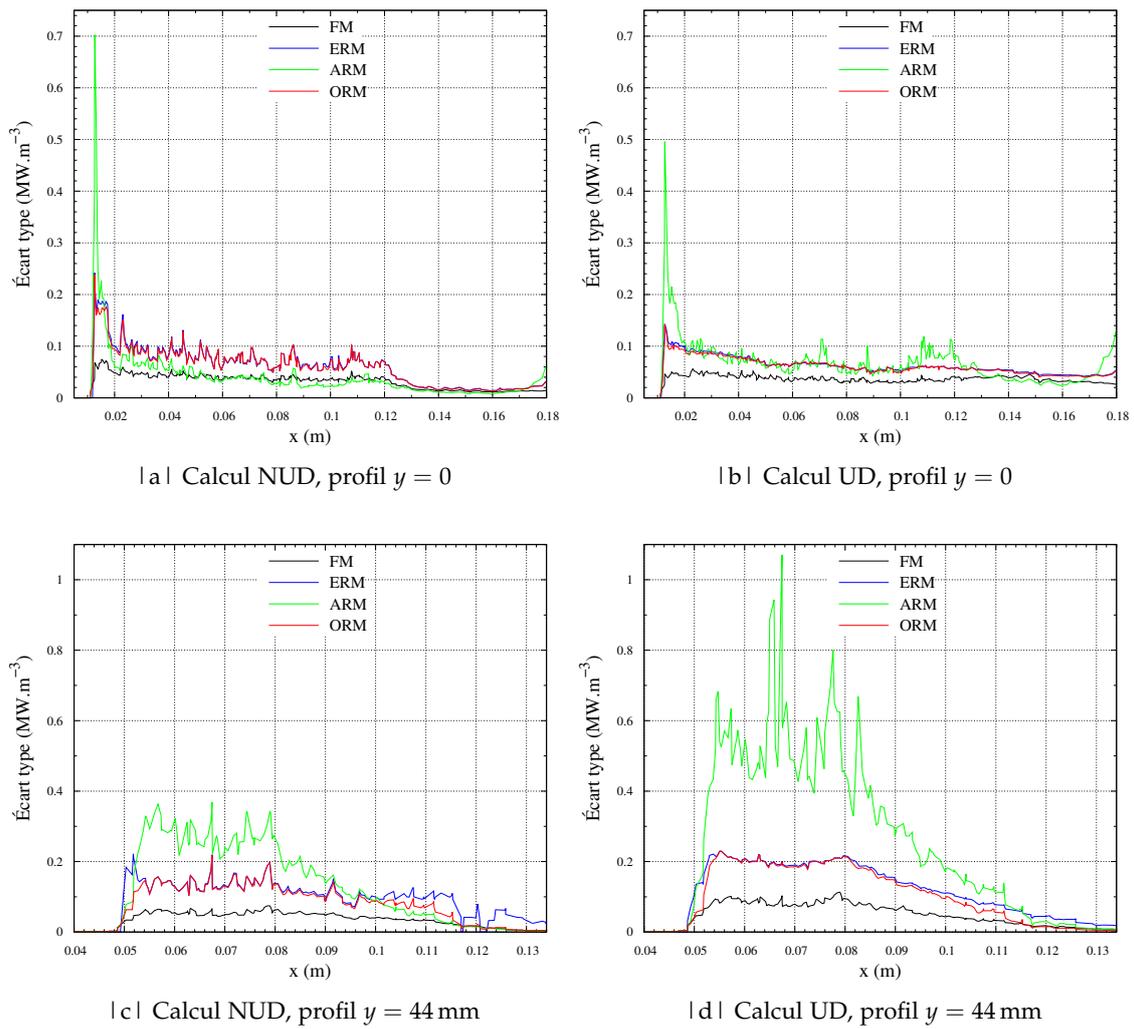


FIG. 7.14 | Comparaison des écarts types obtenus avec les distributions non-uniforme (à gauche) et uniforme (à droite) et les méthodes directe et réciproques, sur les profils $y = 0$ (haut) et $y = 44$ mm (bas).

d'abord un calcul bien convergé, présentant un écart faible avec la solution de référence, afin de comparer les temps CPU des deux solveurs nécessaires pour obtenir des solutions comparables. Le calcul DOM est réalisé en quadrature S_4 , niveau de quadrature minimal pour obtenir des résultats corrects, et avec un critère de convergence de 10^{-4} et le calcul Monte Carlo suit quant à lui $2,15 \cdot 10^9$ chemins optiques. Les champs de puissance obtenus sont quasiment identiques, avec des écarts de l'ordre de 2 % dans les zones faiblement émettrices, et de l'ordre de 0,3 % dans les zones fortement émettrices, à la fois avec DOM et Monte Carlo. Néanmoins, les deux méthodes se distinguent par le temps de calcul obtenu sur 480 cœurs : 336 s pour DOM contre 1269 s pour Monte Carlo, soit un coût 3,8 fois plus élevé pour Monte Carlo, à convergence équivalente. On sait en effet que la méthode Monte Carlo converge en $1/\sqrt{N}$, où N est le nombre de chemins optiques indépendants suivis au cours du calcul, ce qui se traduit par une convergence assez lente lorsque N croît. La méthode DOM converge, elle, en fonction des propriétés de réflexion des parois. La chambre TLC est un cas favorable pour DOM puisque la plupart des frontières du domaine de calcul ne réfléchissent que 20 % de la luminance incidente ($\varepsilon = 0,8$).

La seconde étape de comparaison des deux méthodes consiste à réaliser un calcul de rayonnement assez rapide pour rendre accessible la réalisation du couplage avec la LES sur quelques centaines de cœurs. On confronte ici ASTRE au solveur REA en fixant le temps CPU sur 480 cœurs à environ 70 s. Les écarts relativement à la solution de référence sont relevés en valeur absolue dans le tableau 7.4, pour des temps de calcul très similaires. On constate que l'écart relatif est 3 à 5 fois plus élevé avec la méthode

	Temps CPU sur 480 cœurs (s)	Écart à la référence (%)	
		zones fortement émettrices	zones faiblement émettrices
DOM	67	5	25 – 50
Monte Carlo	76	1	6 – 17

TAB. 7.4 | Écarts à la solution de référence observés pour les méthodes DOM et Monte Carlo pour des calculs rapides.

DOM, pour laquelle il atteint un maximum de 50 %. La méthode Monte Carlo donne des écarts tout à fait convenables pour le temps de calcul obtenu, allant de 1 % dans les zones de fortes puissances, et ne dépassant pas 17 % dans les zones de puissances plus faibles. Pour compléter cette analyse globale, les valeurs de puissance radiative ont été tracées pour les deux méthodes sur les figures 7.15 – 7.18, suivant les 4 profils définis sur la figure 7.4. On observe que la puissance radiative est largement surestimée en valeur absolue par la méthode DOM sur tous les profils, alors que les profils obtenus par Monte Carlo sont plus fluctuants mais s'écartent beaucoup moins de la référence.

Pour quantifier ces observations, l'écart $P - P_{\text{ref}}$ a été tracé pour le profil en $x = 49$ mm pour les deux méthodes, sur les figures 7.15c et 7.15d. On remarque là encore la différence de comportement entre les deux méthodes : la méthode DOM admet un écart en valeur absolue compris entre 0,3 et 0,9 $\text{MW} \cdot \text{m}^{-3}$, dont la valeur moyenne est environ 0,5 $\text{MW} \cdot \text{m}^{-3}$, tandis que la méthode de Monte Carlo produit un écart moins élevé en amplitude (0,6 $\text{MW} \cdot \text{m}^{-3}$ au maximum) et de valeur moyenne nulle. Pour rejoindre le niveau d'écart de Monte Carlo, la convergence de la méthode DOM doit être améliorée, ce qui coûte alors 175 s, soit plus du double du calcul Monte Carlo. Notons cependant que, comme précisé en début de section, REA calcule les transferts radiatifs sur l'ensemble du domaine de calcul, tandis que ASTRE mobilise les 480 cœurs pour

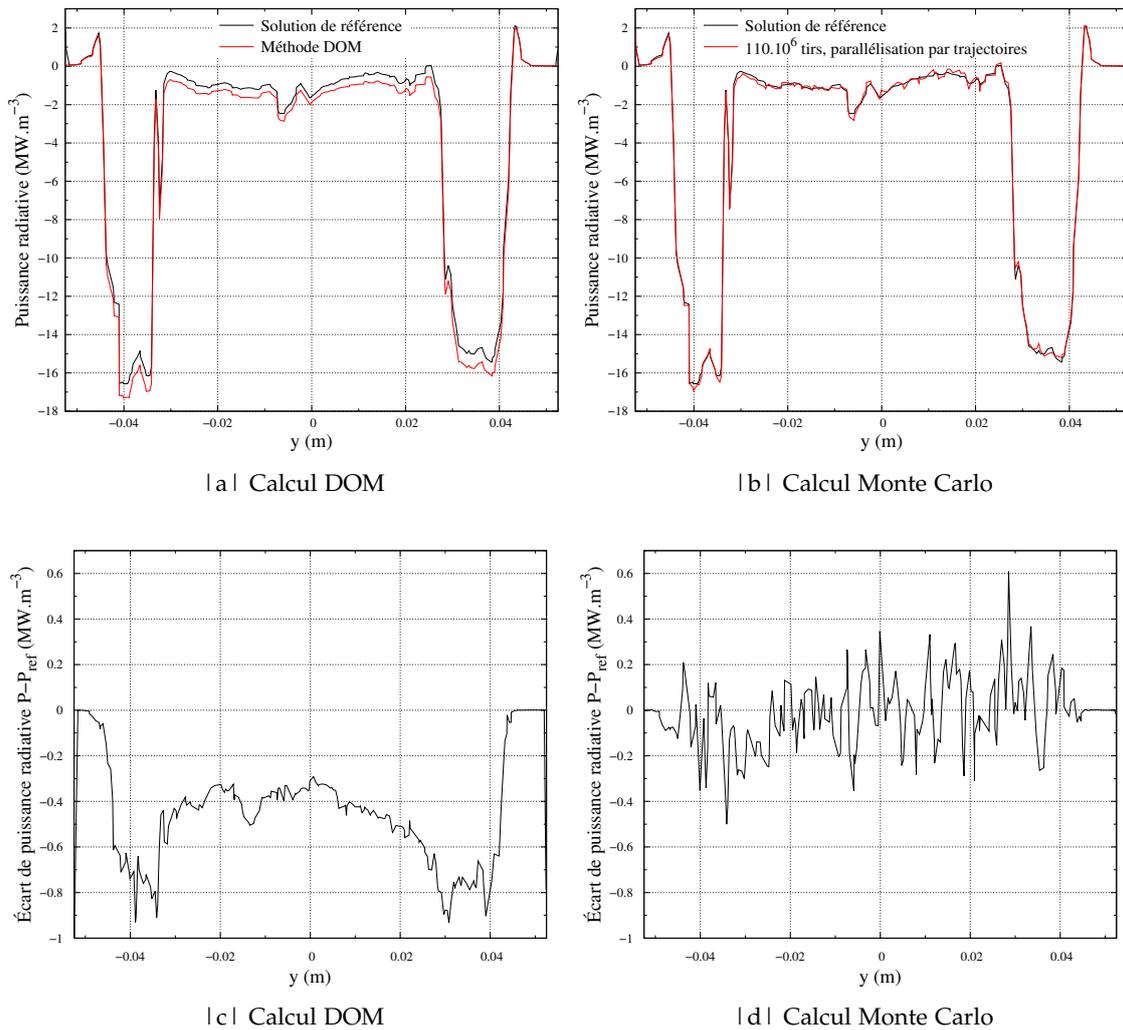


FIG. 7.15 | Comparaison des puissances obtenues avec les méthodes DOM et Monte Carlo par rapport à la solution de référence, sur le profil $x = 49 \text{ mm}$: profils de puissance radiative (haut), écart à la référence $P - P_{\text{ref}}$ (bas).

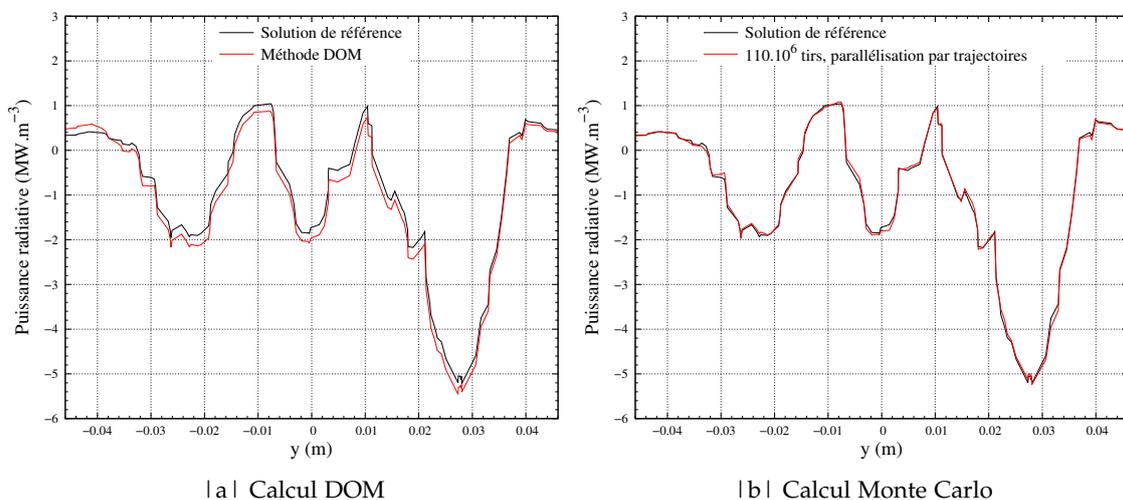


FIG. 7.16 | Comparaison des puissances obtenues avec les méthodes DOM et Monte Carlo par rapport à la solution de référence, sur le profil $x = 130 \text{ mm}$.

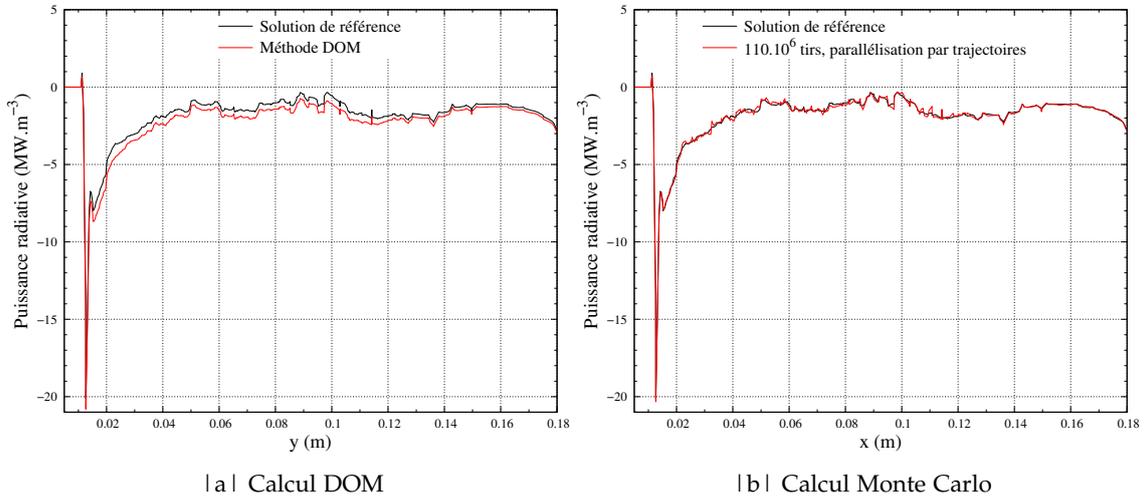


FIG. 7.17 | Comparaison des puissances obtenues avec les méthodes DOM et Monte Carlo par rapport à la solution de référence, sur le profil $y = 0$ mm.

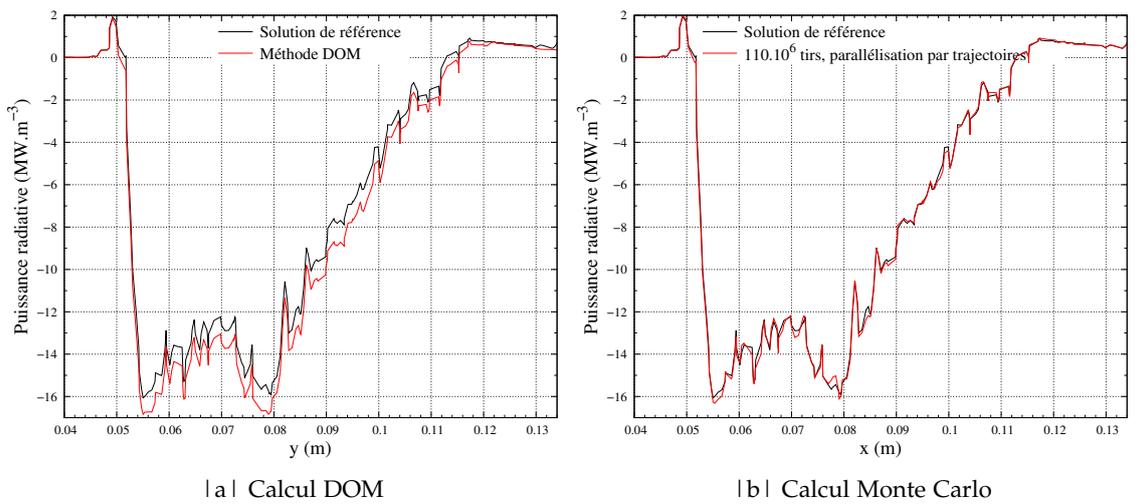


FIG. 7.18 | Comparaison des puissances obtenues avec les méthodes DOM et Monte Carlo par rapport à la solution de référence, sur le profil $y = 44$ mm.

calculer uniquement le volume réduit de la chambre (voir section 7.2.1). De plus REA n'utilise pas de schéma de réordonnement des cellules, qui peut contribuer à réduire significativement le temps de calcul pour des domaines contenant un grand nombre de cellules. Compte tenu de ces remarques, le solveur REA a un potentiel d'optimisation pouvant permettre la réduction de son coût d'un facteur 2.

En conclusion, la méthode DOM a montré son intérêt pour des niveaux de convergence élevés pour lesquels elle est presque 4 fois plus rapide que Monte Carlo. Néanmoins, la méthode DOM induit un coût minimal élevé si l'on souhaite obtenir un niveau d'erreur acceptable. Au contraire, la méthode de Monte Carlo permet d'obtenir des résultats fluctuants mais proches des résultats de référence pour un faible niveau de convergence et un coût très faible. Pour le couplage LES-rayonnement, ce type de résultat est intéressant puisque les fluctuations de puissance radiative ne sont pas déterminantes dans un tel calcul où la turbulence peut induire des fluctuations de puissance d'amplitude plus élevée.

7.3.6 Influence du modèle de propriétés radiatives des gaz

On dispose dans le code ASTRE de deux modèles de propriétés radiatives pour les espèces CO_2 , CO et H_2O adaptés aux pressions supérieures à 5 atm : le modèle KBAR développé par Duval [59, 202], un *box model* qui discrétise les propriétés radiatives en 43 bandes spectrales, et le modèle HPBM de Pierrot [58], également un *box model*, décliné en une version utilisant 367 bandes spectrales (HPBM₃₆₇), et une version optimisée utilisant 26 bandes (HPBM₂₆). La section 2.3.1 du chapitre 2 donne quelques détails sur la construction de ce type de modèle. Les paramètres de ces trois modèles ont été générés à partir de la base de données spectroscopiques HTGR du laboratoire EM2C [203].

Afin de choisir un modèle précis et rapide, ces trois modèles ont été confrontés sur le calcul présenté en section 7.3.2, avec un nombre de tirs total de $2,16 \cdot 10^9$. On obtient des temps de calcul sensiblement identiques, de l'ordre de 20 min sur 480 cœurs. La figure 7.19 compare les profils de puissance obtenus avec le modèle KBAR et les deux versions du modèle HPBM. L'écart entre le modèle HPBM₃₆₇ d'une part, les modèles KBAR et HPBM₂₆ d'autre part atteint 4 % environ dans les zones fortement émettrices. Le modèle HPBM₂₆ se démarque du modèle KBAR dans les zones absorbantes où l'écart entre le HPBM₂₆ et les deux autres (visible sur les parties latérales du profil en $x = 49$ mm et sur la partie aval du profil en $y = 44$ mm) est de l'ordre de $1 \text{ MW} \cdot \text{m}^{-3}$ en valeur absolue mais de 40 % en valeur relative du fait de la faible valeur de la puissance radiative dans ces zones. Par ailleurs, la figure 7.20 compare les profils d'écart type sur les puissances calculées obtenus avec ces mêmes modèles. Le modèle HPBM₃₆₇ conduit à des écarts types environ 10 % supérieurs à ceux des autres modèles, cela en raison du nombre plus élevé de bandes spectrales. À écarts types égaux, le modèle HPBM₃₆₇ est donc 21 % plus cher que les modèles KBAR et HPBM₂₆.

Finalement, les modèles optimisés KBAR et HPBM₂₆ sont attractifs pour le couplage LES-rayonnement en raison de leur convergence plus rapide donc moins coûteuse en comparaison avec le modèle HPBM₃₆₇. Par ailleurs, le modèle HPBM₂₆ est moins précis que le modèle KBAR dans les zones absorbantes, ce qui conduit à choisir finalement le modèle KBAR pour mener les calculs présentés par la suite.

7.3.7 Influence de la condition limite aval

On propose dans cette section d'évaluer l'influence de l'émissivité de la condition limite aval modélisant l'émission des gaz brûlés situés au delà de cette limite. Pour cela,

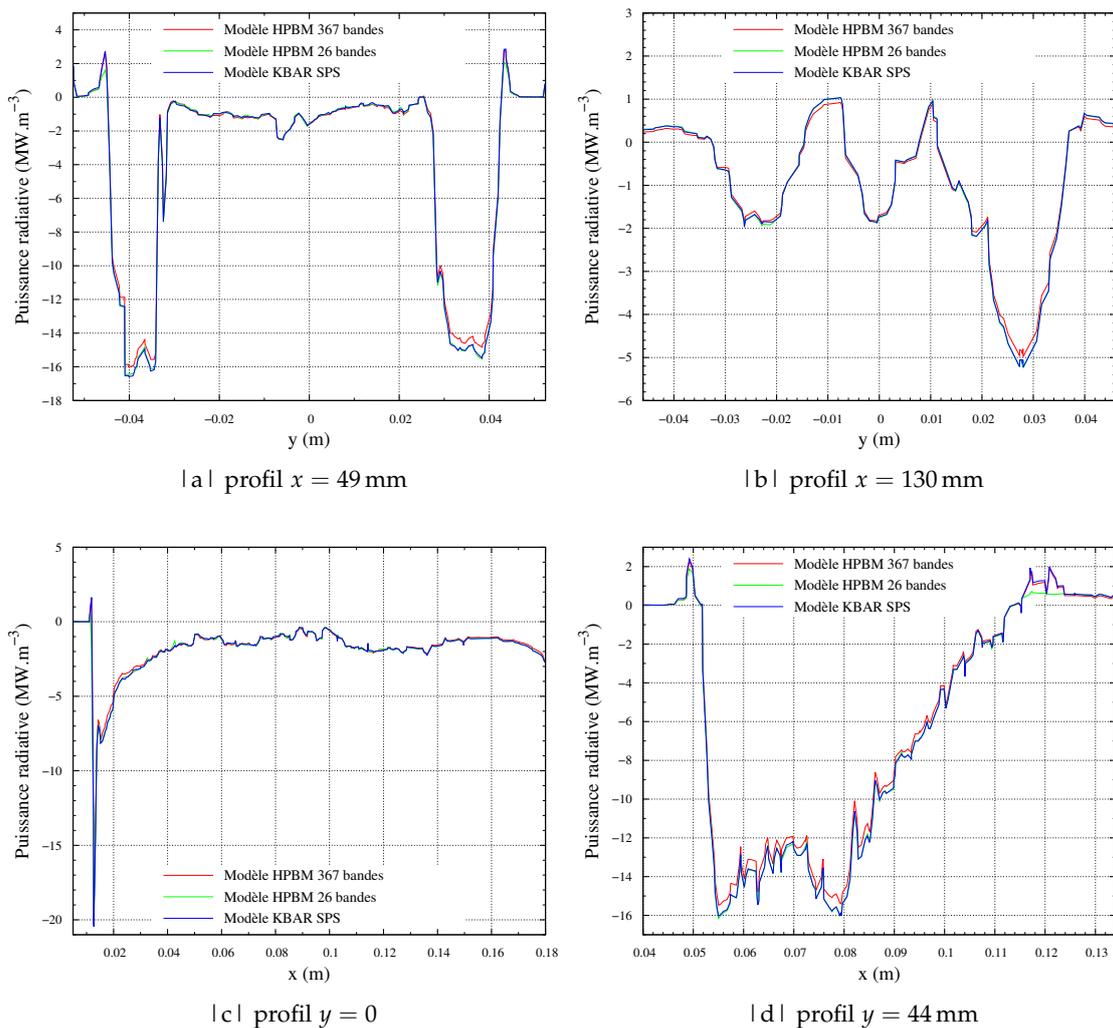


FIG. 7.19 | Comparaison des puissances obtenues avec les modèles HPBM (26 et 367 bandes spectrales) et KBAR.

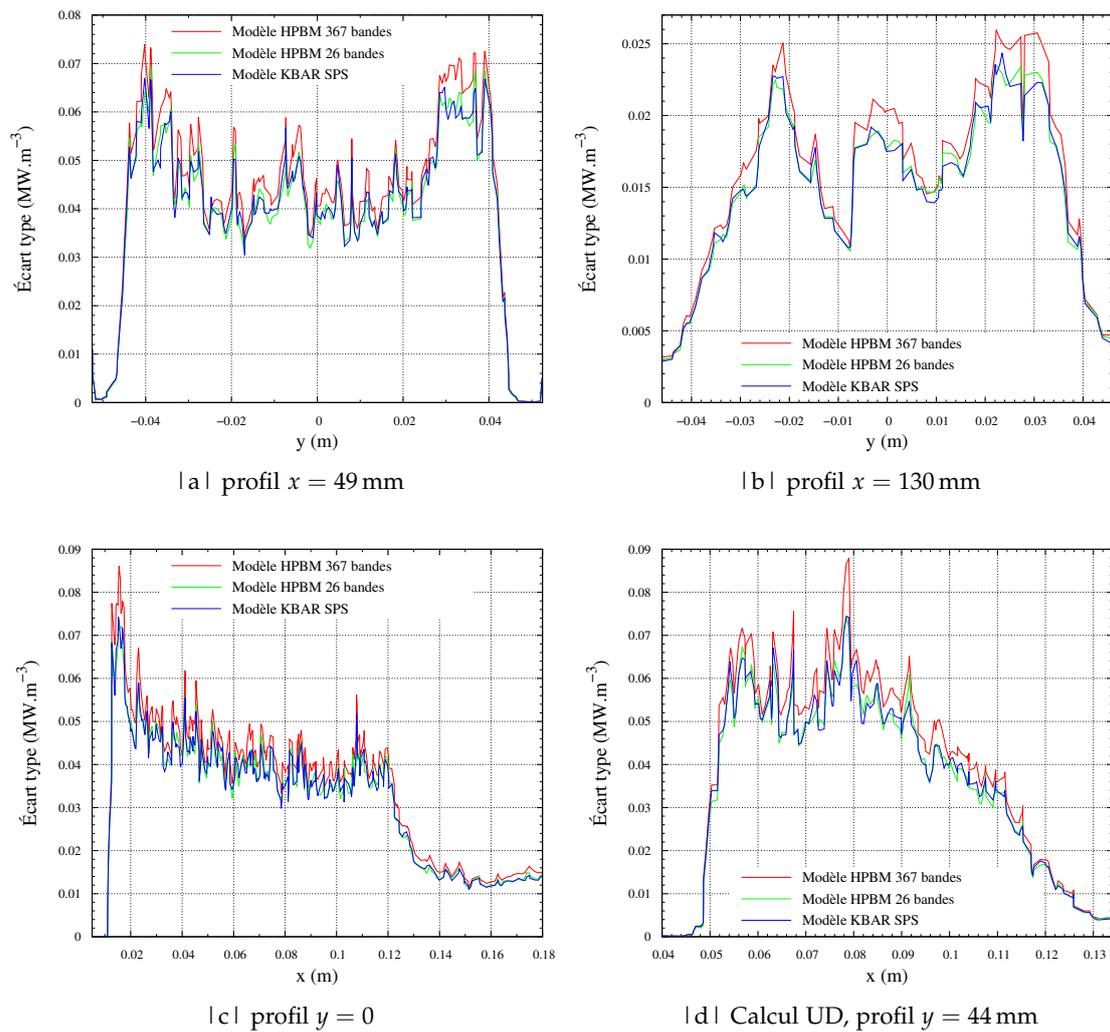


FIG. 7.20 | Comparaison des écarts types obtenus avec les modèles HPBM (26 et 367 bandes spectrales) et KBAR.

on teste différentes valeurs de cette émissivité, en comparant les résultats à ceux obtenus avec $\varepsilon = 0,1$, valeur évaluée à partir de corrélations en section 7.3.1.

La figure 7.21 présente les profils de puissance correspondants le long de l'axe longitudinal, en $y = 0$ et $z = 0$. On constate que l'effet de ε est localisé sur une épaisseur de 5 cm à proximité de la limite, sur laquelle l'écart de puissance peut être important : jusqu'à 34 % pour $\varepsilon = 0,8$ par rapport à $\varepsilon = 0,1$. Néanmoins cet effet reste très localisé,

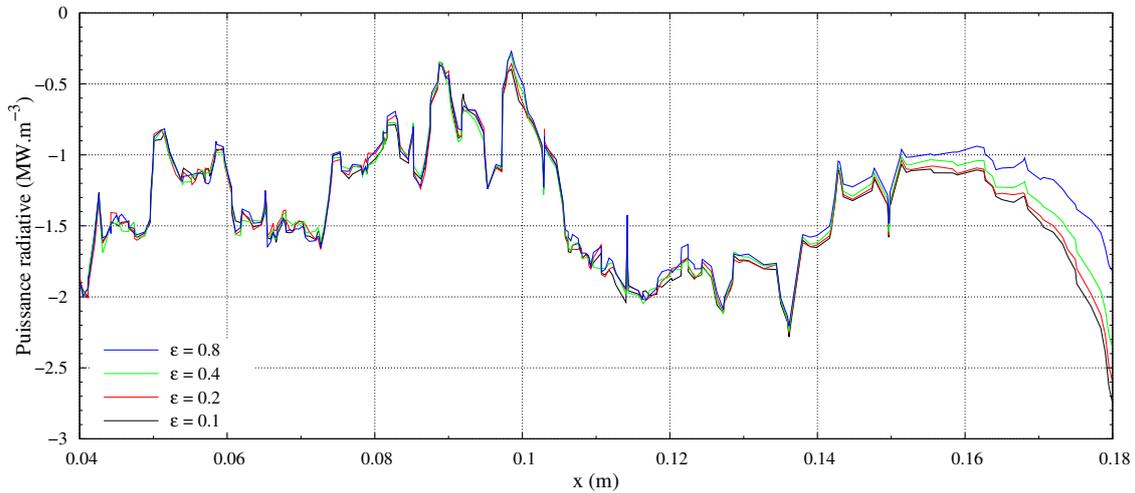


FIG. 7.21 | Puissances radiatives obtenues suivant plusieurs valeurs d'émissivité pour la condition limite aval, sur la partie aval du profil $y = 0$.

et son effet sur le champ de puissance dans l'ensemble de la chambre est quantifié sur la figure 7.22 qui met en évidence les écarts de puissance $\Delta P(\varepsilon) = P(\varepsilon) - P(\varepsilon = 0,1)$ par rapport au cas $\varepsilon = 0,1$. On constate que le surplus de puissance émis par la limite aval, représenté par la hauteur totale des barres, est rétrocedé majoritairement aux frontières du domaine de calcul. La puissance absorbée par le milieu n'augmente que de 0,73 % pour $\varepsilon = 0,8$, soit une diminution de 2,1 % de l'énergie totale perdue par rayonnement dans la chambre. Cette répartition s'explique de la façon suivante : pour qu'un rayon issu

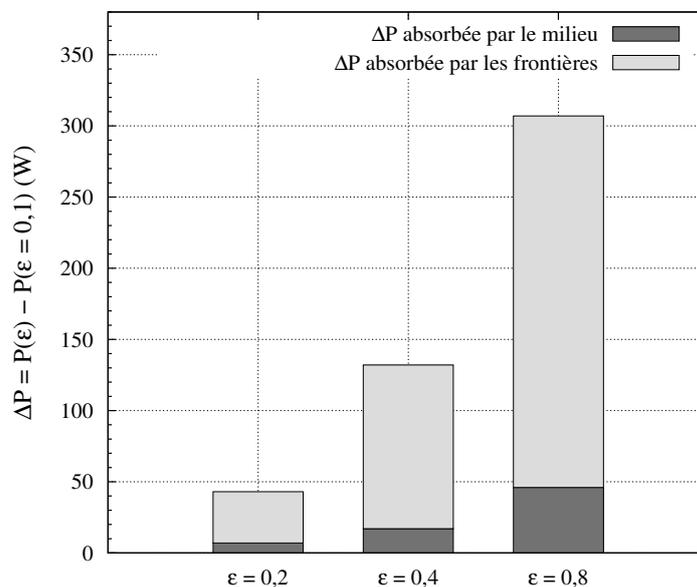


FIG. 7.22 | Écarts de puissance intégrée sur l'ensemble de la chambre, par rapport au cas $\varepsilon = 0,1$.

de la limite aval puisse être absorbé par le milieu, la bande spectrale qui lui est associée doit correspondre à une bande d'absorption des gaz. Or l'émission de la limite ne prend pas en compte la dynamique spectrale réelle de l'émission des gaz brûlés situés derrière elle : son émissivité est uniforme sur tout le spectre, ce qui induit une probabilité faible pour qu'une bande d'absorption des gaz soit affectée aux rayons monochromatiques partants. C'est pourquoi de nombreux rayons peuvent traverser la chambre sans être absorbés, jusqu'à atteindre les limites qui absorbent de manière uniforme sur le spectre. De plus, les rayons partant de la limite aval ne doivent pas avoir une direction initiale trop rasante, sous peine d'être directement absorbés par les parois adjacentes.

Finalement, l'influence de l'émissivité de la condition limite aval sur la perte radiative globale du milieu est estimée à quelques pourcents, avec un effet localisé sur une couche de 5 cm d'épaisseur située au voisinage de la sortie de la chambre. Cette partie de la chambre est d'un faible intérêt pour l'étude du couplage LES-rayonnement, puisque l'écoulement y est plutôt homogène, sa composition quasiment à l'équilibre, et la puissance radiative faible. La valeur issue des corrélations $\varepsilon = 0,1$, conservée dans le cadre de cette étude, n'est donc pas décisive pour les résultats des calculs ultérieurs.

7.3.8 Conclusion

Le calcul des transferts radiatifs dans la chambre TLC a été mis au point et optimisé sur la base de champs instantanés LES. L'obtention de résultats de référence a d'abord permis de mettre en évidence le rôle important de la dilution sur la puissance émise par rayonnement dans ce type de chambre. Une parallélisation par trajectoires a ensuite été mise en place, ce qui a permis de réduire d'un facteur 5,5 le temps d'un calcul ASTRE, pour faciliter la réalisation de calculs couplés LES-rayonnement dans la chambre TLC.

Dans ce but, différents choix ont ensuite été effectués. L'association de la méthode de Monte Carlo conventionnelle (FM) à la distribution spatiale non-uniforme (NUD) des tirs à émettre a été retenue pour le calcul des puissances radiatives. La comparaison de deux méthodes de calcul des transferts radiatifs, DOM et Monte Carlo, a montré que la méthode DOM est bien adaptée lorsqu'on exige une convergence poussée du calcul de rayonnement, tandis que la méthode de Monte Carlo a clairement l'avantage pour réaliser des calculs rapides et moins convergés, mais tout de même suffisamment précis pour fournir le bon niveau de puissance radiative au solveur CFD. Enfin, Le modèle de propriétés radiatives KBAR a été identifié comme permettant un bon compromis entre précision et rapidité, et il a été vérifié que l'émissivité de la condition limite aval influait peu sur la perte radiative globale du milieu.

7.4 APPLICATION DU COUPLAGE COMBUSTION-RAYONNEMENT AU FOYER TLC

7.4.1 Détermination des paramètres de couplage

La période de couplage N_c introduite en section 7.2.2.2 conditionne à la fois la précision du calcul couplé et son coût. Les transferts radiatifs doivent théoriquement être recalculés dès que l'état local de l'écoulement est significativement modifié, compte tenu de la dépendance linéaire du rayonnement vis-à-vis des fractions molaires des espèces X_k et de la fraction volumique de suie f_v , et de sa dépendance intégrée sur le spectre en T^4 . Pour quantifier le temps caractéristique d'évolution du champ de puissance radiative, on utilise le temps convectif du gaz qui s'exprime de la façon

suivante :

$$\Delta t_{\text{conv}} = \frac{D}{\|V\|}, \quad (7.4)$$

où D est un « diamètre » caractéristique de la maille, et V la vitesse de l'écoulement dans cette maille. Poitou *et al.* [175, 189] et Gonçalves dos Santos *et al.* [17, 187] ont évalué ce temps convectif de manière globale, en déterminant une vitesse représentative de la convection des gaz chauds dans la chambre et une taille de maille représentative. On préfère évaluer dans la chambre TLC le temps convectif de manière locale, car les gaz chauds y sont convectés avec des vitesses très différentes, ce qui rend difficile la détermination d'une vitesse représentative.

En rapportant ce temps convectif au pas de temps utilisé pour l'intégration temporelle des équations de la LES $\Delta t_{\text{LES}} = 5 \cdot 10^{-7}$ s, on obtient l'expression de la période de couplage théorique N_c :

$$N_c = \frac{D}{\Delta t_{\text{LES}} \|V\|}. \quad (7.5)$$

L'évolution du champ de puissance radiative est donc sensible à cette période de couplage, mais uniquement dans les zones de l'écoulement où il existe des fluctuations des grandeurs (T, X_k, f_v) . On peut alors isoler ces zones sur le champ de N_c tracé sur la figure 7.23. Du fait de la dépendance non linéaire du rayonnement en T^4 , il est nécessaire de prendre en compte la plus large gamme de fluctuations de température, et en priorité celles de forte amplitude qui peuvent par exemple être délimitées par une isoligne de T_{rms} sur la figure 7.23a. Cette isoligne a été reportée sur les champs de N_c (figures 7.23b et 7.23c) qui diffèrent seulement par leur échelle $N_{c,\text{max}}$: les zones saturées en bleu identifient les endroits où les fluctuations sont correctement captées par le couplage LES-rayonnement à $N_c = N_{c,\text{max}}$. On constate sur la figure 7.23b que pour $N_c = 150$, on ne capte qu'une partie des zones de fortes fluctuations (situées entre la zone très chaude et la recirculation centrale), tandis que la figure 7.23c montre que l'on peut capter l'ensemble des zones de fluctuations de température non négligeables (délimitées par l'isoligne rouge) en choisissant $N_c = 12$. Néanmoins, pour des raisons de coût, le choix $N_c = 16$ apparaît plus raisonnable tout en permettant de suivre la majeure partie des zones de fluctuations de température. À cette période, seules les zones qui sont à $N_c < 16$ sur la figure 7.23c, situées à proximité des parois latérales de la chambre, ne sont pas suivies par le couplage.

En conséquence, un calcul couplé LES-rayonnement de référence a été réalisé avec $N_c = 16$, puis un second calcul avec $N_c = 150$ avec pour objectif d'identifier les conséquences d'une telle variation de la période de couplage sur les résultats obtenus. Afin d'obtenir un bon niveau de convergence de l'état moyen, 310 000 itérations ont été réalisées pour des coûts de calcul de 19 et 7,6 jours respectivement pour $N_c = 16$ et $N_c = 150$, sur 480 cœurs Intel Westmere cadencés à 3,06 GHz.

7.4.2 Effet des transferts radiatifs sur la combustion en régime d'approche

On détaille dans cette section les principaux résultats du calcul couplé de référence ($N_c = 16$) en les comparant au même calcul réalisé sans couplage avec le rayonnement, puis on s'intéresse aux différences apportées par le calcul couplé à une période pratiquement 10 fois plus grande ($N_c = 150$).

7.4.2.1 Résultats du calcul couplé de référence.

Pour évaluer l'effet du rayonnement sur l'aérothermochimie dans la chambre, le calcul couplé à la période $N_c = 16$ itérations est comparé au calcul non couplé réalisé à

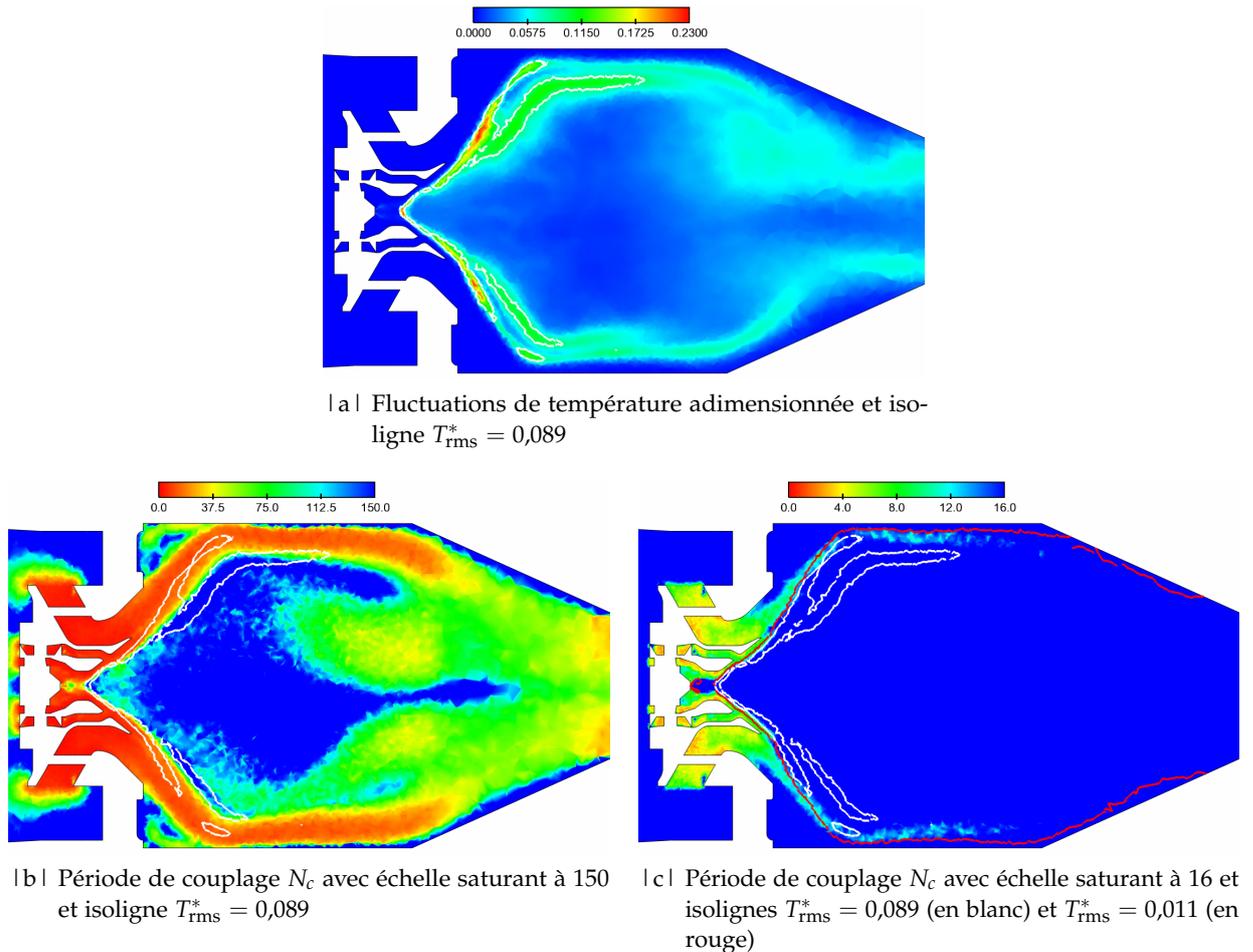


FIG. 7.23 | Champs dans le plan médian permettant le choix de la période de couplage en fonction des fluctuations de température.

partir du même instant de départ et avec le même nombre d'itérations. Le calcul couplé donne des résultats assez similaires à ceux du calcul non couplé, avec des champs moyens des grandeurs de l'écoulement très proches. On réalise une comparaison fine sur les profils définis sur la figure 7.4, ce qui permet de quantifier les différences entre les deux calculs.

On trace sur les figures 7.24 et 7.25 les profils des grandeurs telles que la température, la différence ΔT_c^+ entre la température moyenne du calcul couplé et celle du calcul non couplé et rapportée à cette dernière, les fluctuations de température T_{rms}^* et le dégagement de chaleur moyen $\dot{\omega}_T$. La différence des températures moyennes ΔT_c^+ renseigne sur l'effet du couplage avec le rayonnement : on relève une diminution de la température d'au plus 8 % à proximité de la flamme, sur le profil en $x = 49$ mm, tandis qu'elle est d'environ 1,5 % dans la recirculation centrale (profils en $x = 49$ mm et $y = 0$). En aval de la recirculation, l'effet du rayonnement est plus réduit puisque le milieu est pratiquement isotherme et n'est pas optiquement mince (profils en $x = 130$ mm et $y = 0$). On distingue par ailleurs des zones absorbantes, situées à proximité des zones très chaudes, où l'on constate une élévation de température de 1 à 2 %, sur le profil en $y = 44$ mm (en $x = 50$ et 120 mm). On note que les valeurs élevées de $|\Delta T_c^+|$, entre 3 et 8 %, sont dues en majeure partie à un déplacement de la flamme, difficilement visible sur les profils de dégagement de chaleur en $x = 49$ mm. Ce déplacement étant très lié au maillage dont la finesse ne permet pas de discrétiser suffisamment le front de flamme, on ne peut pas poursuivre cette analyse en détails. Les fluctuations de température sont

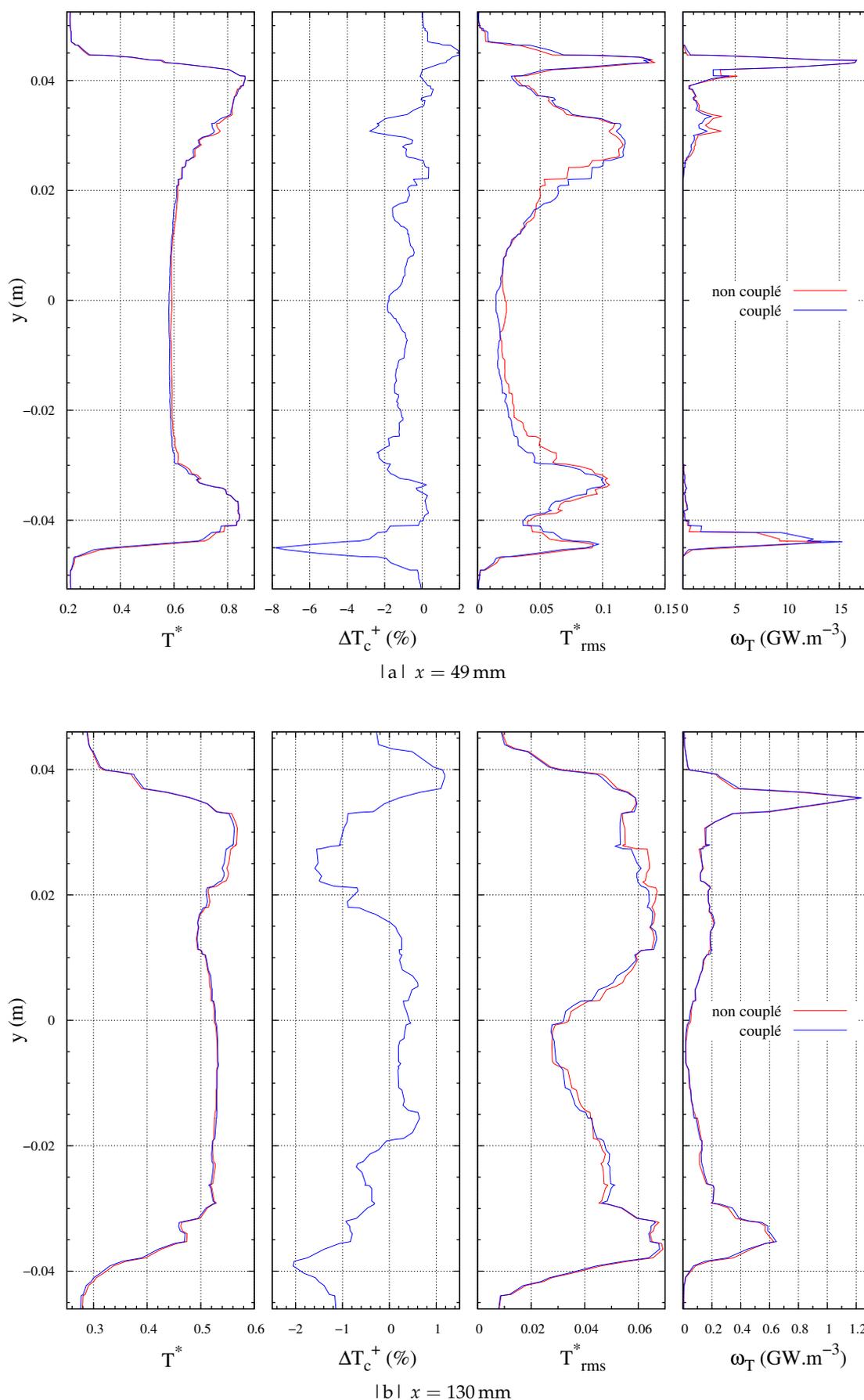


FIG. 7.24 | Comparaison des profils de T^* , ΔT_c^+ , T_{rms}^* et ω_T avec ou sans couplage avec le rayonnement, sur deux profils transversaux.

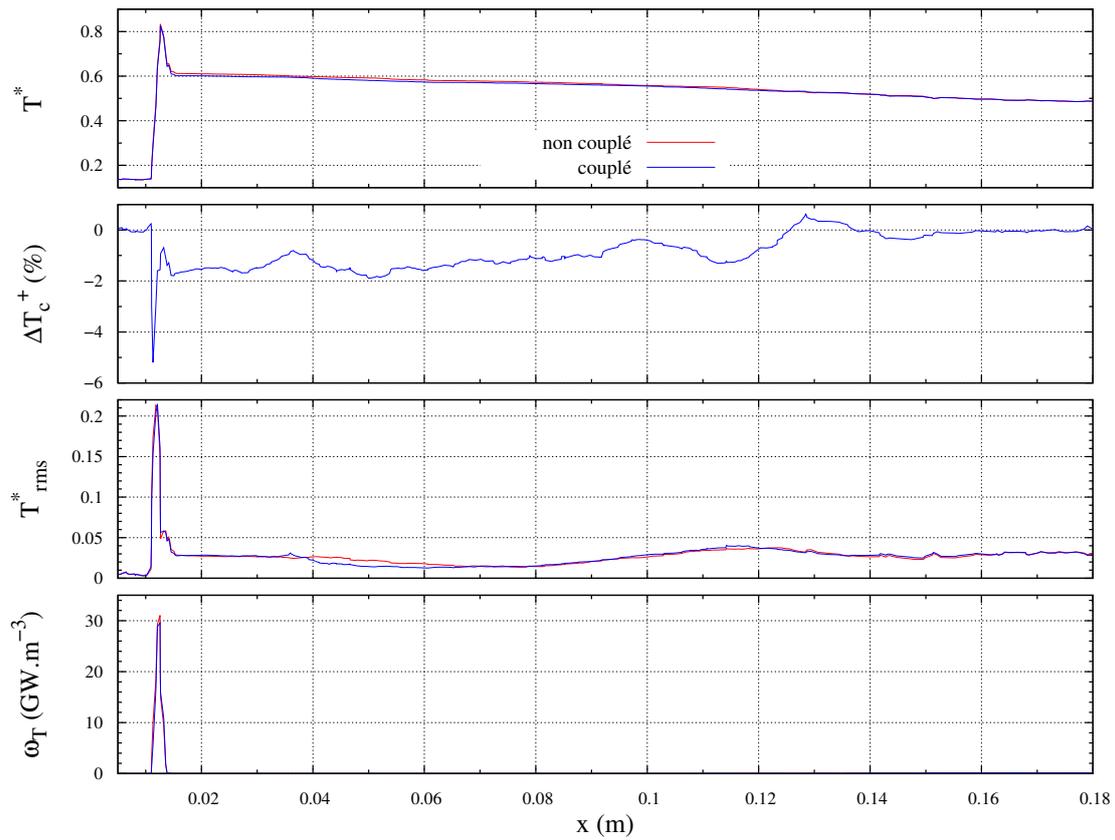
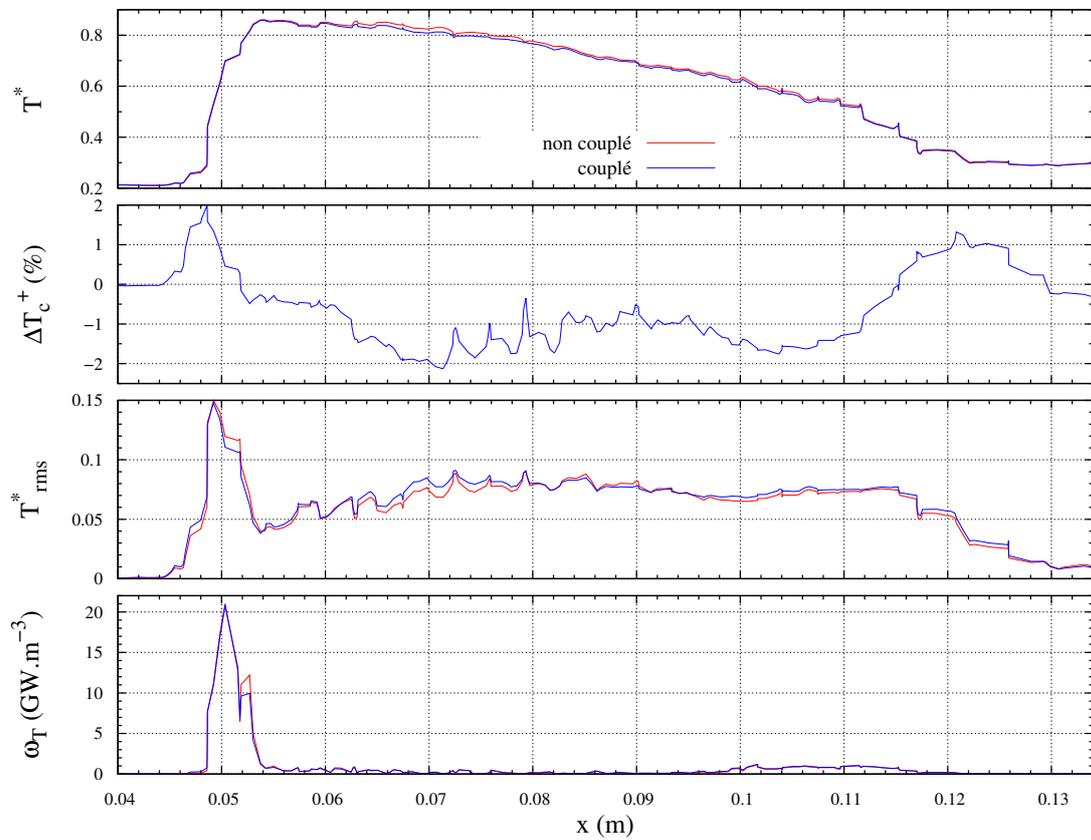
| a | $y = 0$ | b | $y = 44 \text{ mm}$

FIG. 7.25 | Comparaison des profils de T^* , ΔT_c^+ , T_{rms}^* et $\dot{\omega}_T$ avec ou sans couplage avec le rayonnement, sur deux profils axiaux.

également perturbées à hauteur de 25 % tout au plus. Les fractions massiques d'espèces ainsi que la norme de la vitesse de l'écoulement sont peu modifiées par le couplage avec le rayonnement (voir figures D.5, D.6 et D.7 en annexe D). On relève une diminution de la fraction massique moyenne de CO sur l'ensemble de la chambre de 1,79 %, qui doit être due au léger déplacement de la flamme modifiant les conditions de formation du CO à proximité de la flamme. Les fractions massiques de CO₂ et H₂O ne sont pas affectées quant à elles de plus de 0,3 % (voir tableau D.1 en annexe D).

Le calcul couplé permet également d'obtenir les champs moyens des puissances émises, absorbées et nettes tracés sur la figure 7.26, que l'on peut comparer à ceux de la figure 7.6 obtenus sur l'état instantané étudié en section 7.3. Les observations sont

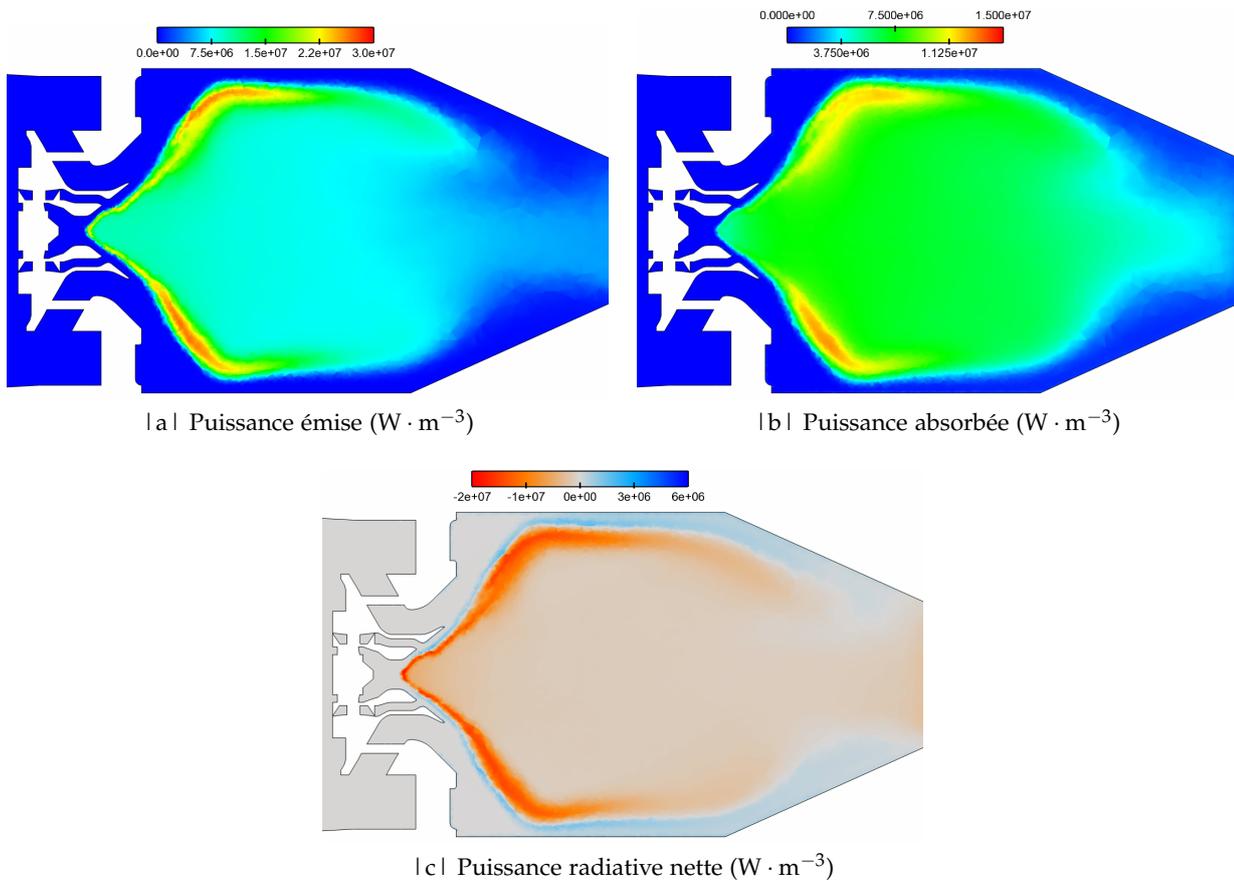


FIG. 7.26 | Champs moyens des puissances émises, absorbées et nettes obtenus avec le calcul couplé de référence.

identiques à celles faites en section 7.3.2.1 puisque les champs instantanés et moyens sont très ressemblants, mise à part l'intensité des puissances émises et absorbées plus forte sur les champs instantanés que sur les champs moyens. On compare ce champ moyen de puissance radiative, pris en valeur absolue, au dégagement de chaleur sur les 4 profils d'étude, sur la figure 7.27. En $x = 49$ mm, on constate que la puissance radiative est inférieure de 2 à 3 ordres de grandeur à $\dot{\omega}_T$ dans la zone de flamme, tandis que l'on observe le comportement inverse au centre de l'ARZ^(c), sur les profils en $x = 49$ mm et $y = 0$, pour $x \in [15; 95]$ mm]. À son entrée dans l'ARZ, pour $x \in [95; 125]$ mm], le mélange de gaz est encore réactif, comme on l'observe sur le profil en $y = 0$, et il atteint progressivement l'équilibre. En aval du point de bifurcation, pour $x > 125$ mm, le mélange reste réactif en raison de la présence de combustible résiduel, piégé dans les

(c). Les détails sur la topologie de l'écoulement sont donnés en section 6.1.1 du chapitre 6.

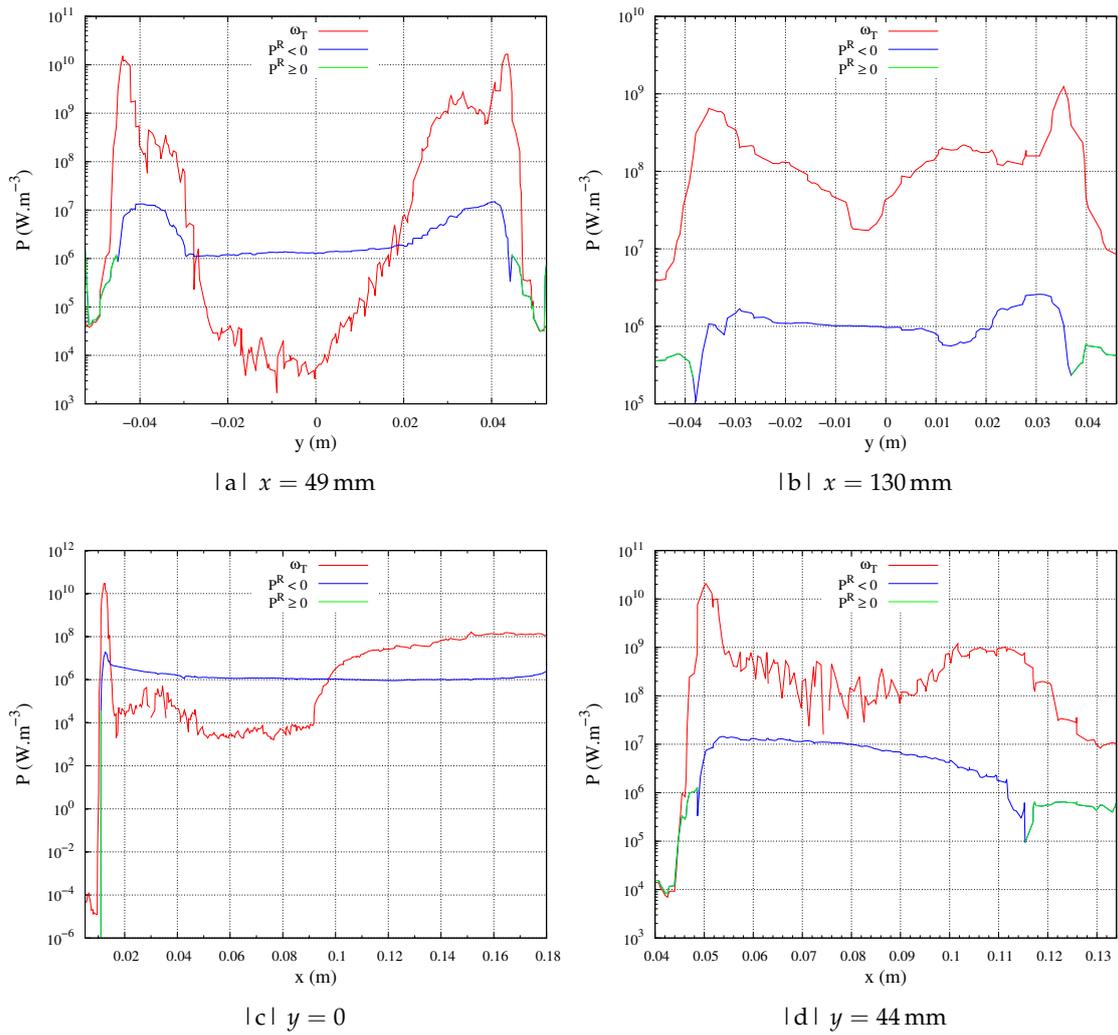


FIG. 7.27 | Comparaison du dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ et de la valeur absolue de la puissance radiative $|P^R|$, sur les 4 profils étudiés. En bleu : partie du profil de $|P^R|$ telle que $P^R < 0$, en vert : partie du profil de $|P^R|$ telle que $P^R \geq 0$.

films de refroidissement, qui se mélange et brûle progressivement. La puissance radiative est alors inférieure de 2 ordres de grandeur au dégagement de chaleur (profils en $y = 0$ et $x = 130$ mm). Enfin, dans la zone très chaude traversée par le profil en $y = 44$ mm, la puissance radiative est maximale et n'est inférieure que d'un ordre de grandeur au dégagement de chaleur. Ces observations sont confirmées par les grandeurs intégrées, similaires à celles obtenues sur l'instantané étudié en section 7.3.2 : la puissance radiative moyenne perdue par le milieu s'élève à 2166 W, soit 0,4 % de la puissance chimique théorique dégagée.

7.4.2.2 Effet de la période de couplage

Un second calcul couplé a été réalisé à la période $N_c = 150$, pour évaluer l'impact de la période de couplage sur les résultats décrits dans la section précédente. On a vu sur la figure 7.23b que cette valeur de la période de couplage ne permet pas de reproduire l'effet de l'ensemble des fluctuations temporelles de température sur les transferts radiatifs dans les zones où l'écoulement est le plus rapide.

On compare en particulier la différence de température ΔT_c^+ induite par le couplage, pour les 2 périodes testées, sur la figure 7.28. Sur l'axe central de la chambre (profil en $y = 0$), on constate que le couplage à $N_c = 150$ conduit à une sous-estimation de $|\Delta T_c^+|$ de 50 à 80 % sur toute la longueur de l'ARZ, alors que les calculs de rayonnement sont effectués à une période inférieure au temps convectif dans cette zone, d'après la figure 7.23b. Cela peut être un effet indirect des erreurs faites dans les zones de l'écoulement où la période de couplage de 150 itérations est supérieure au temps convectif : on observe sur les profils en $x = 130$ mm et $y = 44$ mm des ΔT_c^+ de signes opposés selon la période de couplage. En particulier, en $y = 44$ mm, le profil de ΔT_c^+ pour $N_c = 16$ est cohérent : la zone chaude centrale qui émet du rayonnement se refroidit, et les zones absorbantes situées de part et d'autre se réchauffent, alors que pour $N_c = 150$ le comportement est opposé et donc incohérent.

On peut schématiser le comportement du couplage à $N_c = 150$ de la façon suivante : dans les zones rapides de l'écoulement, une maille initialement remplie de gaz chauds émet du rayonnement. Si cette maille se remplit de gaz moins chauds, elle va continuer à émettre par erreur du rayonnement plutôt que d'en absorber, tant que le champ radiatif n'est pas réactualisé. Cette incohérence a d'autant plus d'effet que la dépendance du rayonnement en fonction de la température est fortement non-linéaire.

En conclusion, il apparaît nécessaire dans le cas de la chambre TLC d'utiliser une période de couplage assez faible pour suivre l'ensemble des fluctuations de température d'amplitude élevée, si on veut estimer correctement l'effet des transferts radiatifs.

7.4.2.3 Évaluation des flux convectifs et radiatifs aux parois

Afin de compléter l'analyse de l'effet du rayonnement sur l'aérothermochimie dans la chambre TLC, on cherche à évaluer l'effet des flux radiatifs par rapport aux flux convectifs sur les parois de la chambre. Ces flux conditionnent la température des parois et par là même la durée de vie des chambres de combustion.

Pour des raisons déjà évoquées d'occupation mémoire et de coût de calcul, le maillage utilisé pour les calculs présentés précédemment est insuffisamment raffiné pour simuler correctement les flux pariétaux, même en utilisant un modèle de paroi. On utilise donc des corrélations de convection interne pour estimer les flux convectifs en cinq endroits distincts schématisés sur la figure 7.29 :

- (i) sur le bol pilote en sortie du 1^{er} étage de vrilles axiales ;

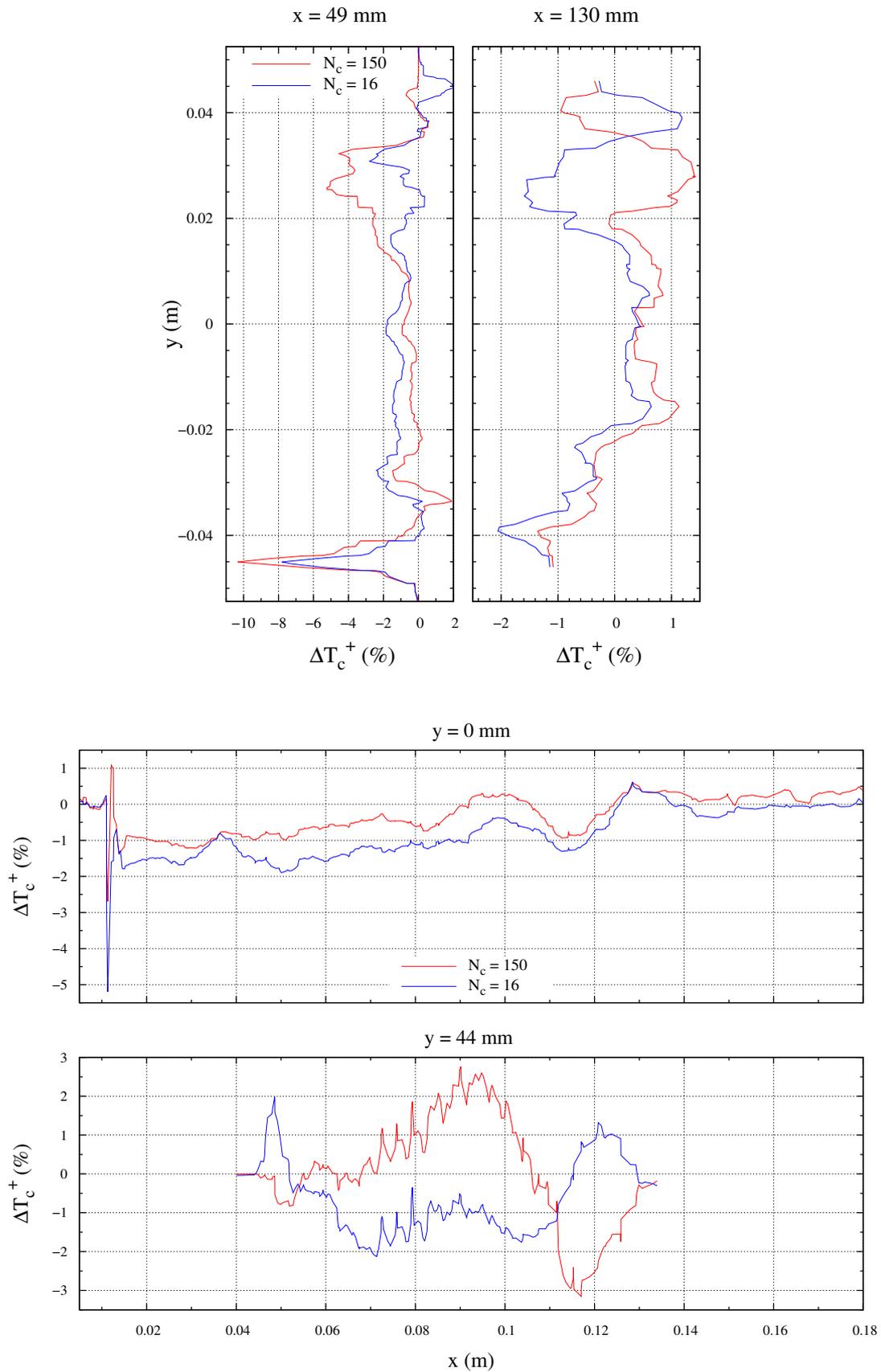


FIG. 7.28 | Profils de ΔT_c^+ pour les calculs couplés aux périodes de 16 et 150 itérations, sur les 4 profils d'étude.

- (ii) sur le bol pilote en sortie du 2^e étage de vrilles axiales ;
- (iii) sur le bol externe en sortie des vrilles radiales, en amont du décollement de la couche limite ;
- (iv) sur le bol externe en sortie des vrilles radiales, avant le changement brusque de section ;
- (v) sur le fond de chambre.

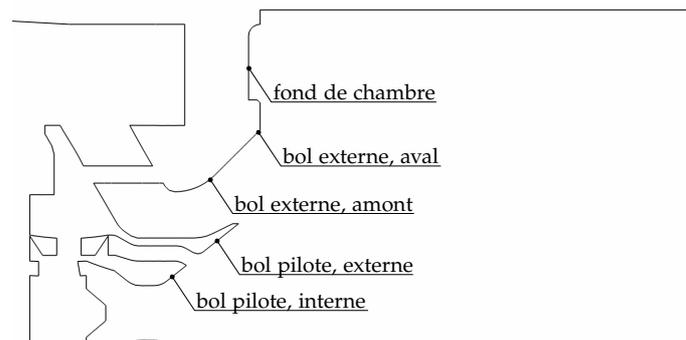


FIG. 7.29 | Schéma localisant les points d'évaluation des flux convectifs.

On peut calculer le coefficient d'échange h_c à la paroi pour un écoulement turbulent établi avec la corrélation de Dittus et Boelter [204] qui exprime le nombre de Nusselt $Nu = h_c d_h / k_g$ d'un écoulement dans un tube circulaire :

$$Nu = 0,023 Re^{0,8} Pr^{0,4}, \quad (7.6)$$

où k_g est la conductivité du gaz dans l'écoulement principal et d_h le diamètre hydraulique de la section de passage de l'écoulement considérée. Le nombre de Reynolds correspondant à cette section s'écrit $Re = \rho_g V_g d_h / \mu_g$, où ρ_g est la masse volumique du gaz, V_g sa vitesse et μ_g sa viscosité dynamique. Enfin, le nombre de Prandtl s'écrit $Pr = \mu_g c_{p,g} / k_g$, où $c_{p,g}$ est la capacité calorifique massique du gaz. Cette corrélation est valable pour

$$\begin{aligned} 0,7 &\lesssim Pr \lesssim 120 \\ 10^4 &\lesssim Re \end{aligned}$$

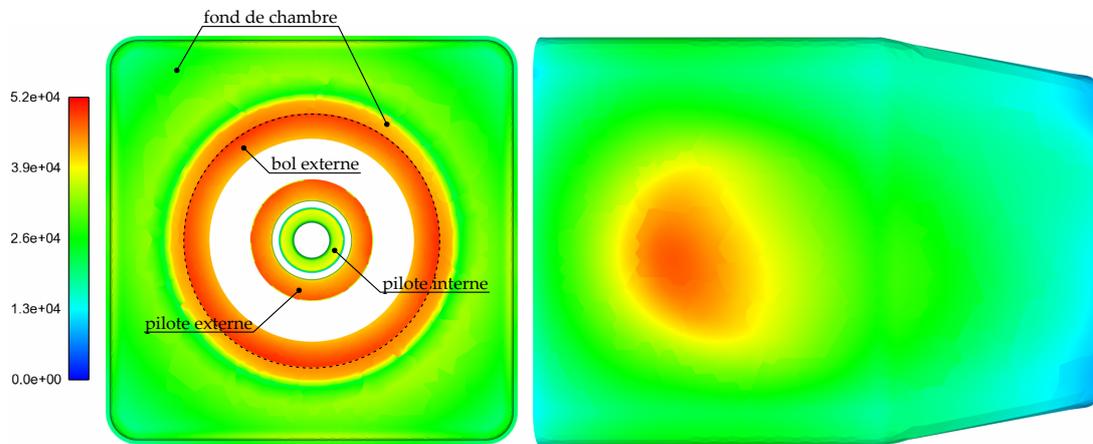
Le tableau 7.5 synthétise les valeurs numériques utilisées et donne les valeurs obtenues pour le coefficient d'échange pour les 5 régions considérées.

Par ailleurs, les calculs couplés LES-rayonnement réalisés n'ont pas été prévus pour le calcul des flux radiatifs moyens. On peut cependant les estimer par un calcul de transfert radiatif réalisé sur les champs moyens des calculs couplés. La figure 7.30 présente les champs des flux radiatifs sur les bols externe et pilote, le fond de chambre et les parois latérales. On ne visualise sur la figure 7.30a qu'une partie du bol externe, car sa partie la plus en amont n'est pas prise en compte dans le calcul des transferts radiatifs (voir section 7.2.1 et la figure 7.1). Notons que pour évaluer correctement les flux radiatifs, il est important de prendre en compte l'absorption du milieu, qui s'élève à 68 % de la puissance émise totale (voir section 7.3.2.1). L'approximation d'un milieu optiquement mince n'est donc pas valable dans ce cas.

Pour évaluer l'effet des flux radiatifs sur la température des parois, il est nécessaire de faire une hypothèse puisque les flux par conduction à travers les parois sont inconnus. On peut supposer les parois adiabatiques (flux conductif nul), ou imposer une

	bol pilote		bol externe		fond
	interne	externe	amont	aval	
T_g^*	0,209	0,211	0,210	0,211	0,212
V_g (m · s ⁻¹)	75	65	90	40	6
k_g (W · m ⁻¹ · K ⁻¹)	$4,60 \cdot 10^{-2}$	$4,61 \cdot 10^{-2}$	$4,60 \cdot 10^{-2}$	$4,60 \cdot 10^{-2}$	$4,63 \cdot 10^{-2}$
μ_g (kg · m ⁻¹ · s ⁻¹)	$3,20 \cdot 10^{-5}$	$3,22 \cdot 10^{-5}$	$3,21 \cdot 10^{-5}$	$3,22 \cdot 10^{-5}$	$3,23 \cdot 10^{-5}$
ρ_g (kg · m ⁻³)	5,34	5,27	5,23	5,27	5,26
$c_{p,g}$ (J · kg ⁻¹ · K ⁻¹)	1063	1059	1058	1058	1060
d_h (m)	$2,5 \cdot 10^{-3}$	$3,3 \cdot 10^{-3}$	$1,97 \cdot 10^{-2}$	$1,24 \cdot 10^{-2}$	$2,46 \cdot 10^{-2}$
h_c (W · m ⁻² · K ⁻¹)	1482	1236	1111	641	123

TAB. 7.5 | Table des valeurs numériques servant à l'évaluation du coefficient d'échange (partie supérieure), et des résultats obtenus (partie inférieure).



| a | Flux radiatifs sur le bol et le fond de la chambre. | b | Flux radiatifs sur les parois latérales de la chambre.

FIG. 7.30 | Champs de flux de chaleur dus aux transferts radiatifs obtenus à partir d'un calcul de rayonnement sur les champs moyens du calcul couplé à $N_c = 16$.

température de paroi (flux conductif non nul). On choisit ici la première hypothèse, qui équivaut à résoudre l'équation d'égalité des flux radiatifs et convectifs :

$$h_c(T_p - T_g) = \varphi^R(T_p), \quad (7.7)$$

où T_g est la température du gaz et T_p celle de la paroi, et $\varphi^R(T_p)$ est le flux radiatif qui s'exprime en fonction de la valeur de flux radiatif obtenue par la simulation pour une température de paroi $T_{p,c}$ donnée par le tableau 7.2 :

$$\varphi^R(T_p) = \varphi^R(T_{p,c}) + \varepsilon\sigma(T_{p,c}^4 - T_p^4), \quad (7.8)$$

où ε est l'émissivité grise de la paroi. Avec les valeurs du coefficient d'échange h_c calculées dans le tableau 7.5, la résolution de l'équation (7.7) permet d'obtenir la valeur de la température de paroi pour laquelle les flux radiatifs et convectifs se compensent. L'écart de température relatif à la température de paroi obtenue sans prendre en compte les flux radiatifs est reporté dans le tableau 7.6. Ce raisonnement permet de hiérarchiser les écarts de température, sans néanmoins obtenir des valeurs réalistes car les parois réelles ne sont pas adiabatiques. En prenant en compte la conduction dans les parois, les écarts de température calculés seraient plus faibles.

bol pilote interne	3 %
bol pilote externe	6 %
bol externe amont	5 %
bol externe aval	12 %
fond de chambre	27 %

TAB. 7.6 | Augmentation de la température de paroi due à la prise en compte des flux radiatifs.

À la vue de ces résultats, on constate que le rôle du coefficient d'échange convectif est prépondérant : étant faible sur la partie aval du bol externe et sur le fond de chambre, les flux radiatifs provoquent une hausse de température importante. À l'inverse, sur les parties plus fortement refroidies par convection comme le bol interne, la hausse de température due aux transferts radiatifs est limitée.

Enfin, le raisonnement utilisé ici n'a pas été appliqué pour évaluer les flux sur les parois latérales de la chambre pour plusieurs raisons. D'une part, le maillage n'étant pas adapté pour résoudre la couche limite thermique, la température des gaz juste en-dehors de la couche limite est inconnue, et difficile à estimer car les gradients de température sont élevés à cet endroit de la chambre. D'autre part, dans les systèmes réels, on utilise des parois multi-perforées afin de limiter au maximum l'échauffement des parois latérales, en augmentant fortement les échanges convectifs avec de l'air frais. Les flux radiatifs deviennent alors la principale cause d'échauffement de ces parois, ce qui implique de devoir les simuler le plus précisément possible.

Même si la portée de ces résultats est limitée par les hypothèses faites pour leur obtention, ils montrent que le rayonnement peut avoir un effet non négligeable sur la tenue thermique des parois. La prise en compte de la conduction thermique dans les parois est un aspect de la modélisation qui mériterait d'être développé dans une étude future.

7.5 CONCLUSION

Ce chapitre décrit la mise en place du calcul des transferts radiatifs dans la chambre TLC et son couplage avec l'écoulement instationnaire turbulent diphasique réactif. Pour calculer les transferts radiatifs, la méthode de Monte Carlo a été retenue après son évaluation par rapport à la méthode DOM. La méthode DOM apparaît moins coûteuse pour des calculs à fort niveau de convergence, mais elle induit du fait de sa construction un coût minimal nécessaire pour conserver une erreur convenable. La méthode de Monte Carlo permet d'obtenir des niveaux d'erreur plus faibles pour un coût sensiblement inférieur, avec des résultats fluctuant autour du résultat de référence. Cela rend les calculs couplés LES-rayonnement abordables en terme de temps de calcul, dans le cadre de travaux de recherche. La parallélisation du code Monte Carlo a été modifiée pour l'adapter aux calculs qui suivent un nombre restreint de photons tout en étant parallélisés sur un grand nombre de cœurs, avec l'objectif de réduire au maximum le temps de calcul. Un modèle de propriétés radiatives à haute pression à 43 bandes spectrales a été retenu après sa comparaison à deux autres modèles à 26 et 367 bandes. Certains paramètres spécifiques à la méthode de Monte Carlo ont également été testés, ainsi que l'influence sur les transferts radiatifs de la condition limite aval. Un premier calcul de transfert radiatif réalisé en post-traitement d'un champ instantané LES a révélé que la puissance émise sous forme de rayonnement est faible par rapport à la puissance chimique dégagée par la combustion, tandis que le milieu absorbe environ deux tiers de

cette puissance émise. Le rayonnement n'a donc pas un rôle dominant dans le volume de la chambre, mais l'absorption du milieu étant non négligeable, sa prise en compte apparaît décisive pour l'évaluation des flux radiatifs sur les parois de la chambre.

Le couplage du code Monte Carlo avec les solveurs dédiés à la simulation du transport des phases gazeuse réactive et liquide de l'écoulement a été mis en place, en utilisant une stratégie de partitionnement permettant de réduire la consommation de mémoire des codes de calcul, et un ordonnancement sous-cyclé. Cette démarche a abouti à la réalisation de calculs couplés LES-rayonnement dans le foyer TLC, à deux périodes de couplage différentes. Les résultats ont montré que le rayonnement a un impact réduit sur la thermique de l'écoulement, ce qui est cohérent avec le niveau de perte radiative relativement faible en comparaison de la puissance chimique dégagée par la combustion. La puissance radiative est en effet inférieure de 1 à 3 ordres de grandeur au dégagement de chaleur dû à la combustion dans les zones réactives, et supérieure de 2 ordres de grandeur dans la recirculation centrale. La comparaison des calculs réalisés avec deux périodes de couplage a montré l'intérêt d'utiliser une période de couplage permettant de capter les fluctuations temporelles de température dans l'ensemble des zones de fortes fluctuations, sans quoi les résultats obtenus n'apparaissent plus cohérents avec les phénomènes physiques mis en jeu. Enfin, une évaluation de l'effet des flux radiatifs sur la température de paroi a montré l'importance de la prise en compte du rayonnement pour évaluer la tenue thermique des parois. Dans les chambres dotées d'injecteurs de nouvelle génération comme celui de la chambre TLC, il semble finalement important de se préoccuper davantage des transferts thermiques en paroi que des transferts radiatifs dans l'écoulement.

Conclusion et perspectives

L'objectif de ces travaux de thèse était de mettre en place une méthodologie de calcul capable de traiter la simulation instationnaire de la combustion turbulente diphasique, couplée à la formation des suies et au rayonnement dans une chambre de combustion. Cet objectif s'inscrit dans le contexte de la conception de nouvelles chambres de combustion aéronautiques à l'aide de la simulation numérique, qui doit permettre l'estimation des charges thermiques pariétales et des émissions polluantes. Pour cela, la démarche s'est orientée autour de trois axes : la modélisation de la formation des suies, la simulation instationnaire de l'écoulement turbulent réactif diphasique dans le foyer TLC, et leur couplage avec le calcul des transferts radiatifs. Pour ces trois axes, les avancées et les limites des travaux réalisés sont analysées et les perspectives envisageables à la suite de ces travaux sont discutées.

Modélisation de la formation des suies

L'état de l'art détaillé sur la formation des particules de suie, qui fait l'objet du chapitre 3, a mis en évidence la difficulté de caractériser les suies, à la fois théoriquement, expérimentalement et numériquement. Les phénomènes physiques mis en jeu sont encore mal compris, les méthodes de mesures induisent des niveaux d'incertitude élevés, et les modèles peuvent être très coûteux et peu prédictifs. Le niveau de détail de la modélisation croît avec celui des techniques de mesure, mais les applications à des écoulements complexes comme ceux présents dans les chambres de combustion industrielles sont très rares car très coûteuses.

En fonction de ces aspects, un modèle de formation des suies empirique, simple et robuste, a été choisi parmi les modèles de la littérature répertoriés dans le chapitre 3. Il a été adapté et appliqué à une flamme 1D laminaire prémélangée dans le chapitre 4, ce qui a confirmé son caractère non prédictif sur les niveaux de fraction volumique de suies. Il convient néanmoins au cadre de la simulation instationnaire d'écoulements complexes, puisqu'une cinétique globale ou réduite est suffisante pour l'utiliser. Ce n'est pas le cas des modèles semi-empiriques, certes plus prédictifs, mais qui reposent sur la concentration d'espèces précurseurs comme l'acétylène, et nécessitent dans ce cas l'utilisation d'une cinétique détaillée, beaucoup plus coûteuse. Un modèle de ce type a par ailleurs été évalué [205] dans les mêmes conditions à l'aide d'une méthode de tabulation de cinétique détaillée. Cette méthode n'est néanmoins pas encore développée pour son application aux flammes partiellement prémélangées rencontrées dans les foyers aéronautiques actuels.

Pour améliorer ces travaux, il serait nécessaire d'approfondir la mise au point et la validation de ce modèle sur des flammes documentées partiellement prémélangées, laminaires et turbulentes, parce qu'elles sont plus proches des conditions rencontrées dans les chambres de combustion. On pourrait envisager de relier le comportement du modèle de formation des suies à la richesse locale du mélange, par des relations

empiriques qui pourraient améliorer son caractère prédictif. Par ailleurs, des travaux de thèse sont en cours afin de proposer une méthode de tabulation de la cinétique adaptée à tous les régimes de flamme. Dans ce cas, l'utilisation de modèles semi-empiriques, reposant sur la concentration de précurseurs, serait envisageable à moindre coût et permettrait une amélioration certaine du caractère prédictif de la modélisation.

Simulation instationnaire de l'écoulement turbulent réactif diphasique dans le foyer TLC

Le foyer TLC, décrit dans le chapitre 5 et choisi parce qu'il est à la fois bien documenté expérimentalement et doté d'un prototype d'injecteur déjà impliqué dans la conception des futures chambres de combustion, a permis d'évaluer la précision de la simulation sur deux régimes de fonctionnement, dans le chapitre 6. La comparaison des niveaux de température avec les mesures a révélé des écarts de l'ordre de 30 à 40 % pour le régime d'approche et de 10 % pour le régime de montée, liés principalement au mélange des gaz dans la chambre et au rendement de combustion. Le mélange des films de refroidissement avec l'écoulement principal peut en effet être mal reproduit par la modélisation, et la répartition des débits entre les films et l'injecteur, utilisée comme condition limite, peut être erronée. Les phénomènes d'interaction combustion-turbulence et de piégeage du kérosène dans l'air frais sont également des phénomènes difficiles à modéliser et qui influent sur le rendement de combustion. Par ailleurs, la comparaison qualitative des résultats numériques du régime d'approche avec les champs de concentration de kérosène en phase gazeuse et de radical OH a montré que la topologie de la flamme est bien reproduite. Des écarts ont néanmoins été constatés au niveau de l'étage pilote de l'injecteur, et sont dus aux limitations de la modélisation et des conditions aux limites employées à cet endroit.

Les écarts de température constatés ne permettent pas de réaliser la simulation de la formation des suies et du couplage avec le rayonnement dans des conditions réalistes. La répartition des débits imposée comme condition limite a alors été modifiée artificiellement, ce qui a permis de réduire ces écarts sans modifier significativement la topologie de l'écoulement. Dans ces nouvelles conditions, la capacité du modèle de formation des suies à reproduire la topologie du champ de fraction volumique de suie dans la chambre a été démontrée par comparaison avec les mesures. On a finalement réalisé un calcul instationnaire d'aérothermochimie prenant en compte la formation des suies dans une chambre semi-industrielle prédisant des conditions de température réalistes. Ce calcul constitue une bonne base pour la mise au point de la méthodologie de couplage LES – formation des suies – rayonnement.

Plusieurs aspects de ces travaux peuvent être améliorés. Il sera nécessaire à l'avenir de s'affranchir de la modification des conditions aux limites mise en place afin d'améliorer le caractère prédictif de la simulation. Pour cela, la géométrie de la chambre incluant les canaux de passage des films de refroidissement doit être utilisée plutôt qu'une géométrie simplifiée, pour s'affranchir de la répartition de débits imposée comme condition limite. D'autre part, le maillage doit être raffiné notamment dans l'injecteur afin de garantir la bonne estimation des pertes de charge. Cela apporte néanmoins d'autres difficultés : les canaux de refroidissement ayant une géométrie complexe, la taille du maillage sera bien plus importante, et la perte de charge à travers ces canaux devra être correctement reproduite. Par ailleurs, il serait nécessaire d'évaluer l'effet d'un modèle d'interaction combustion-turbulence, et d'améliorer la modélisation de l'injection liquide en modélisant l'atomisation primaire du jet et la formation de film

liquide par impact des gouttes sur les parois de l'injecteur.

Couplage LES – formation des suies – rayonnement

La faisabilité du couplage LES – formation des suies – rayonnement dans une chambre semi-industrielle a été démontrée dans le chapitre 7 : deux calculs couplant la simulation instationnaire diphasique réactive à la méthode de Monte Carlo ont été réalisés. La méthode de Monte Carlo s'est avérée plus pertinente que la méthode DOM pour le calcul des transferts radiatifs car elle permet d'obtenir des calculs très rapides tout en gardant un niveau de précision acceptable.

Dans la flamme partiellement prémélangée pauvre du foyer TLC, on a constaté que la puissance radiative émise représente moins de 2% de la puissance chimique théorique. En conséquence, l'effet des transferts radiatifs sur l'écoulement dans la chambre est faible, avec une diminution locale de la température de 1,5 à 8%, les valeurs les plus élevées étant majoritairement liées au déplacement de la flamme. Par ailleurs, on a montré qu'il était nécessaire d'utiliser dans le cas de la chambre TLC une période de couplage assez faible pour que le calcul de transfert radiatif puisse suivre l'ensemble des fluctuations de température d'amplitude élevée, et estimer correctement l'effet du rayonnement sur l'écoulement. Bien que les transferts radiatifs aient une influence limitée sur l'écoulement, on a montré qu'ils avaient un impact assez important sur la température des parois. Il est donc important de les prendre en compte pour prédire la charge thermique pariétale.

Pour compléter ces travaux, un critère de couplage pourra être développé afin de faciliter le choix *a priori* de la période de couplage, en fonction du temps convectif local et des fluctuations de température. Comme les perspectives évoquées dans la section précédente requièrent un maillage plus fin, il faudra également veiller à diminuer l'occupation mémoire du code Monte Carlo utilisé, par exemple en le parallélisant par domaines géométriques. Il faudra dans ce cas résoudre le problème du très grand nombre de communications parallèles entre les processus. Enfin, il sera nécessaire de développer une modélisation de la conduction dans les parois, couplée à la convection et au rayonnement, afin de pouvoir estimer précisément les flux thermiques pariétaux. La modélisation des flux thermiques à travers des parois de chambre multiperforées est également nécessaire pour se rapprocher des systèmes réels.

**Études expérimentales sur la
formation des suies dans les
flammes**

A

Cette section propose, par l'intermédiaire du tableau A.2, des informations sur une trentaine d'études expérimentales concernant les suies. Ces informations portent, entre autres, sur le type de flamme analysée, les méthodes de mesure mises en œuvre et les grandeurs mesurées. Le tableau A.1 répertorie les acronymes nécessaires à la compréhension du tableau A.2.

Les études présentées dans le tableau A.2 sont regroupées par régime de combustion : on distingue les flammes laminaires prémélangées, les flammes laminaires de diffusion (LD), les flammes laminaires partiellement prémélangées et les flammes turbulentes de diffusion (TD). Au sein de ces catégories, les études sont regroupées préférentiellement par configuration de référence lorsqu'une même configuration fait l'objet de plusieurs études.

Acronyme ou symbole	Définition
CARS	Coherent Anti-Stokes Raman Spectroscopy
DMA	Differential Mobility Analysis (voir section 3.2.1)
FIAS	Fast Infrared Array Spectrometer
LE _{ldv}	Light Extinction sur ligne de vue (voir section 3.2.1)
LE _s	Light Extinction par sonde optique (voir section 3.2.1)
LS	Light Scattering (voir section 3.2.1)
Li/LiOH AAT	Li/LiOH Atomic Absorption Technique
LIF	Laser Induced Fluorescence (voir section 3.2.1)
LII	Laser Induced Incandescence (voir section 3.2.1)
LOSA	Line-Of-Sight Attenuation technique
PSDF	Particle Size Distribution Function
SM	Spectrométrie de Masse
SSE	Spectral Soot Emission Diagnostic
TPD	Thermocouple Particle Densitometry
TS-TEM	Thermophoretic Sampling - Transmission Electron Microscopy
VL	Vélocimétrie Laser
X [A]	profil axial de la grandeur X mesuré
X [Rn]	n profils radiaux de la grandeur X mesurés
X [An]	grandeur X mesurée en n positions le long de l'axe de la flamme
X [FMn]	n profils de la grandeur X en fonction de la fraction de mélange
X _{rms}	Mesures des fluctuations de la grandeur X
FM	Fraction de Mélange
Rg	Rayon de giration
Df, kf	Dimensions fractales des agrégats
\overline{N}_{pa}	Nombre moyen de particules primaires par agrégat
N _p	Nombre de particules primaires par unité de volume
N _s	Nombre d'agrégats de suie par unité de volume

TAB. A.1 | Acronymes et symboles utilisés dans le tableau A.2

	Références	Combustible	Configuration	Méthodes de mesure	Principaux résultats	Particularités
laminaire prémélangée	Xu <i>et al.</i> [72], (1997)	C ₂ H ₄	flamme à 1 atm stabilisée sur brûleur poreux	LE _{ldv} , mesure gravimétrique de f_v , TS-TEM, luminances spectrales, chromatographie, VL	Profils axiaux pour 3 richesses : T , V , f_v , d_p , $X_{C_2H_4}$, $X_{C_2H_2}$, X_{CH_4} , X_{CO_2} , X_{CO} , X_{H_2O} , \dot{S} , N_s , w_n , w_g	Observation de l'effet de vieillissement des particules, et mise en relation avec le mécanisme HACA. Autorégulation de la croissance en surface.
	Zhao <i>et al.</i> [133], (2003)	C ₂ H ₄	flamme à 1 atm stabilisée sur brûleur poreux [206]	thermocouples, DMA (sonde tubulaire)	T [A], PSDF [A7], f_v [A], N_s [A], d_p [A]	Mise en évidence et élimination des artefacts d'extraction des particules. PSDF unimodale dans la zone de nucléation et bimodale dans la zone de croissance.
	Zhao <i>et al.</i> [67], (2005)	C ₂ H ₄	similaire à [133, 206], 6 flammes à différentes T_{max}	thermocouples, DMA (sonde tubulaire)	Pour les 6 flammes : T [A], PSDF [A6]	Mise en évidence de la grande sensibilité de la PSDF à T . La nucléation persiste dans la zone de croissance à faible température, mais disparaît pour une élévation de T de seulement 100 K.
	Öktem <i>et al.</i> [144], (2005)	C ₂ H ₄ /O ₂ /Ar	[206]	thermocouples, TPD, DMA (sonde tubulaire), spectroscopie de masse spécifique	T [A], f_v [A], PSDF [A8], spectres d'espèces aromatiques et aliphatiques	Détermination de la composition chimique dans la zone de présence des suies. Rôle inattendu des composés aliphatiques dans la croissance des suies.
	Abid <i>et al.</i> [135], (2009)	C ₂ H ₄	[133, 206]	thermocouples, DMA (sonde plane)	T et PSDF [A] pour 6 positions de sonde, f_v [A], N_s [A]	Nouvelle sonde de prélèvement : impact de la flamme sur une plaque plane à température imposée. Permet une meilleure caractérisation des conditions aux limites et facilite les comparaisons expérience-numérique.
LD	Santoro <i>et al.</i> [136], (1983)	C ₂ H ₄ (3 débits) C ₂ H ₆ (1 débit)	axisym. coflow confinée 1 atm	LE _{ldv} , LS, LIF, dépolarisation	f_v , d_p , N_s [R3], Intégrale radiale de f_v	Identification de la présence de PAH par fluorescence dans une zone de nucléation et d'agglomération simultanées des suies.
	Santoro <i>et al.</i> [149], (1987)	C ₂ H ₄ , CH ₄ , C ₂ H ₄ /N ₂	[136]	VL, thermocouples, LE _{ldv} , LS	Vitesse axiale et radiale [R7], T [R5], $\int f_v$ [A], contours 2D de f_v	Reconstruction de l'évolution des particules le long de lignes de courant.

	Références	Combustible	Configuration	Méthodes de mesure	Principaux résultats	Particularités	
laminaire de diffusion (LD)	Iyer <i>et al.</i> [150], (2007)	C ₂ H ₄	[136]	LE _{ldv} , LS	d_p [A], N_p [A], $\overline{N_{pa}}$ [A] et la PDF associée [A5]	Méthode moins empirique pour tenir compte de la diffusion des particules (sans choisir une valeur de d_p). Mesures de d_p validées sur des mesures TS-TEM.	
	Puri <i>et al.</i> [151], (1993)	C ₂ H ₄	[136]	VL, LE _{ldv} , LS	évolutions temporelles de f_v , d_p , N_p , N_s , $\overline{N_{pa}}$, taux de croissance et d'oxydation	Caractérisation fine des agrégats. Mise en évidence de 4 zones différentes le long de l'axe de la flamme.	
	Yazicioglu <i>et al.</i> [207], (2001)	C ₂ H ₄ CH ₄	[136, 208]	TS-TEM	d_p , Rg moyens, intervalle de valeurs de N_s , kf, Df	Df peut être considéré comme quasi-universel. kf est dépendant du combustible et des conditions de la flamme.	
	McEnally <i>et al.</i> [137], (1998)	C ₂ H ₄	axisym. coflow 1 atm	LS, LII, thermocouples, TS, spectrométrie de masse	T (2D et [R5]), $Y_{C_6H_6}$ (2D), f_v (2D et [R3])	Comparaison de différentes méthodes de mesures pour T et f_v . Mise en évidence de l'effet du rayonnement sur T .	
	Smooke <i>et al.</i> [143], (2004)	C ₂ H ₄ dilué par N ₂		[137]	Thermocouples, spectrométrie de masse, LII, TPD (calibration LII)	T (2D et [A]), $Y_{C_2H_2}$ [A], $Y_{C_6H_6}$ [A], f_v (2D)	Démonstration de l'importance de la ré-absorption du rayonnement par la flamme.
	Smooke <i>et al.</i> [209], (2005)	C ₂ H ₄ dilué par N ₂		[137]	LE _{ldv} (calibration LII), LII	f_v (2D)	Amélioration de la précision des mesures LII par rapport à [143].
	Snelling <i>et al.</i> [138], (1999)	C ₂ H ₄	axisym. coflow 1 atm	CARS, LE _{ldv} 2D	T [R3], f_v [R8] et 3D	Mesures de haute précision à très faible bruit. Réduction de l'effet sur les mesures de la déviation des rayons par variation d'indice de réfraction.	
	Tian <i>et al.</i> [210], (2004)	C ₂ H ₄		[138]	TS-TEM	PDF de d_p [A1] et $\overline{N_{pa}}$ [A1]	Caractérisation des agrégats pour la calibration des méthodes optiques.
	Tian <i>et al.</i> [87], (2006)	C ₂ H ₄		[138]	TS-TEM	PDF de $\overline{N_{pa}}$ [A1], valeurs de kf et Df	Développement d'une méthode non-empirique d'analyse d'images TEM, qui tient compte de la nature 3D des agrégats.
	Liu <i>et al.</i> [74], (2006)	CH ₄	axisym. coflow 5 – 40 atm [211]	SSE et LOSA [211]	f_v (2D) et $\int f_v$ [A]	Influence de la pression sur la flamme et les suies.	

	Références	Combustible	Configuration	Méthodes de mesure	Principaux résultats	Particularités
LD	Ayranci <i>et al.</i> [212], (2007)	C ₂ H ₄	axisym. coflow 1 atm [213]	spectrométrie d'émission	T et f_v des suies	Méthode à indice de réfraction des suies variable, afin de réduire le caractère empirique de l'analyse des mesures.
	D'Anna <i>et al.</i> [214], (2009)	C ₂ H ₄	diffusion à contre-courant à 1 atm	thermocouples, LIF, LII, LS	Pour 3 débits d'oxydants : T [A], concentrations de PAH, nanoparticules et particules [A]	Résultats qualitatifs sur la formation des PAH et des suies dans les flammes à contre-courant.
LD et partiellement prémélangée	Kim <i>et al.</i> [139], (2008)	C ₂ H ₄ -He/O ₂ -He	axisym. coflow, confinée 1 – 8 atm	VL, mesures de luminance rayonnée, chromatographie, LE _{ldv} , TS-TEM, Li/LiOH AAT	Profils axiaux pour 4 pressions : V , T , f_v , d_p , $X_{C_2H_4}$, $X_{C_2H_2}$, X_{CH_4} , X_{CO_2} , X_{CO} , X_{H_2O} , X_{H_2} , X_{O_2} , X_H , X_{OH} , X_O , X_{He}	Vérification du mécanisme HACA [65] jusqu'à 8 atm. Oxydation par OH dominante sur O ₂ .
	Arana <i>et al.</i> [140], (2004)	C ₂ H ₄	[136], 7 richesses de prémélange	LE _{ldv} 2D, thermocouples	f_v [R6] et $\int f_v$ [A] pour 5 ϕ , T [A] pour 6 richesses	Variation non-monotone de f_v et de la hauteur de flamme avec la richesse du prémélange.
	McEnally et Pfefferle [141], (2000)	C ₂ H ₄	[136], 6 richesses de prémélange	thermocouples, TPD, spectrométrie de masse, LIF, LII	pour les 6 ϕ : T [A], fractions molaires de nombreuses espèces [A], f_v [A]	Effet du prémélange partiel sur la formation d'espèces carbonées gazeuses et solides.
TD	Hu <i>et al.</i> [88], (2003)	C ₂ H ₄	flamme sans coflow 1 atm	LE _s , LE _{ldv} , TS-TEM	f_v [A,R2], d_p [A], Rg [A], $\overline{N_{pa}}$ [A], kf et Df	Comparaison des deux méthodes LE _{ldv} et LE _s . Détermination de la surface de suies sans hypothèse de sphéricité. Universalité des coefficients kf et Df.
	Yang et Koylu [126], (2005)	C ₂ H ₄	[88]	LE _s , LE _{ldv} , LS	f_v , d_p et Rg [A,R4], Df	Mesures de particules naissantes transparentes dans le visible. Distinction entre les caractéristiques des particules primaires et celles des agrégats.
	Yang <i>et al.</i> [125], (2005)	C ₂ H ₄ C ₂ H ₂	[88]	thermocouples, LE _s , LE _{ldv} , TS-TEM	f_v [A,R1], T [A]	Comparaison des 3 méthodes de mesure. TS-TEM permet d'identifier les particules naissantes. Mesures dans une flamme optiquement épaisse (C ₂ H ₂)

turbulent de diffusion (TD)	Références	Combustible	Configuration	Méthodes de mesure	Principaux résultats	Particularités
	Yang et Koylu [127], (2005)	C ₂ H ₂	[215, 216]	thermocouples, LE _s , LE _{ldv} , LS	f_v, d_p, Rg, T [A]	Caractérisation des suies dans une flamme optiquement épaisse. Distinction entre les caractéristiques des particules primaires et celles des agrégats.
	Brookes et Moss [142], (1999)	CH ₄	coflow 1 et 3 atm	prélèvement et SM, thermocouples, LE _{ldv} (2 méthodes de déconvolution), monochromateurs	FM [A,R6] @1 atm, T [A,R6] @1 atm, T [R4] @3 atm, f_v [R3] @1 atm, f_v [R5] @3 atm, L_λ (2 hauteurs), PDF de L_λ à 4 λ	Mesures de luminance spectrale. Quantification de l'effet de la pression sur les grandeurs mesurées.
	Coppalle et Joyeux [128], (1994)	C ₂ H ₄	sans coflow, 3 régimes distincts 1 atm	LE _{ldv} , LE _s , thermocouples et pyrométrie	f_v [A,R2], $f_{v,rms}$ [A,R2], $\int f_v$ [A], T [A], T _{rms} [A]	Comparaisons entre plusieurs méthodes et entre flammes de différents régimes.
	Kent et Honnery [153], (1987)	C ₂ H ₄	sans coflow, 3 régimes 1 atm	LE _{ldv} , thermocouples	Flamme 1 : T [A,R3,FM3], f_v [R4,FM4]. Flammes 2-3 : f_v [FM4]	f_v ne peut être modélisée comme une fonction de la seule fraction de mélange.
	Commodo <i>et al.</i> [68], (2007)	C ₂ H ₄	basée sur [153]	LII, LIF, LS	f_v suies [A,R3], f_v NOC [A,R3]	Caractérisation de la zone de formation et d'existence des NOC.
	Zheng et Gore [217], (2005)	C ₂ H ₄	sans coflow 1 atm	FIAS	L_λ [R1], $L_{\lambda,rms}$ [R1], f_v et $f_{v,rms}$ [R1], T et T _{rms} [R1], FM et FM _{rms} [R1]	Méthode développée pour déduire f_v, T et FM de mesures de luminances spectrales.

Tab. A.2 | Études expérimentales sur les suies

Simulation de la formation des suies avec chimie tabulée et modèle de suie semi-empirique

B

Table des matières

B.1	Introduction	255
B.2	Methods and models	257
B.2.1	Reacting gas flow	257
B.2.2	Soot model	258
B.2.2.1	Nucleation	259
B.2.2.2	Surface growth	259
B.2.2.3	Oxidation	260
B.2.2.4	Agglomeration	260
B.2.2.5	Synthesis	260
B.2.3	Radiative transfer	261
B.3	Simulated test cases	261
B.3.1	Experimental conditions	261
B.3.2	Numerical conditions	262
B.3.2.1	Table construction	262
B.3.2.2	CFD calculation	262
B.3.2.3	Radiative transfer	263
B.4	Results and discussion	263
B.4.1	Gas phase chemistry	263
B.4.2	Soot results	265
B.4.2.1	Model parameter optimization	265
B.4.2.2	Soot surface growth modeling	266
B.4.2.3	Soot volume fraction results	266
B.4.3	Flame radiation	269
B.5	Conclusion	270

Dans cette annexe, on présente une méthodologie permettant d'évaluer numériquement le niveau de concentration de suie à moindre coût pour son application future à la simulation instationnaire diphasique d'une flamme turbulente couplée avec le calcul des transferts radiatifs. Elle est composée du modèle semi-empirique de Leung (voir section 3.1.2.1 du chapitre 3) et de la méthode FPI pour la prédiction du précurseur de suies C_2H_2 . Pour permettre sa validation et son évaluation, elle est appliquée au cas simple d'une flamme 1D laminaire prémélangée. Comme expliqué dans ce qui suit, le profil de température est imposé pour le calcul de cette flamme. La méthode utilisée est décrite dans l'annexe C. Cette étude inclut également une brève étude du rayonnement induit par les gaz et les suies dans une flamme 1D laminaire prémélangée. Celle-ci a pour but de mettre en évidence le rôle non-négligeable des suies dans les transferts radiatifs.

Ces travaux ont été publiés en tant que Compte Rendu à l'Académie des Sciences dans la section Mécanique [205]. Le contenu de l'article est restitué ici avec la mise en forme du mémoire.

B.1 INTRODUCTION

To conform to more and more stringent pollutant emission rules, regarding in particular nitrogen oxides (NO_x) and soot levels, new combustion chambers have to be designed. Soot particles influence combustion and thermal conditions inside gas turbine combustion chambers, because they may strongly enhance the radiative transfer, that reduces the maximum gas temperature and consequently affect the temperature-dependent NO_x formation. Radiative transfer also increases the wall heat load, which tends to decrease the wall material lifetime. Therefore, soot are undesired products and the modeling of their formation and radiation has to be taken into account in simulations of industrial combustors. Very recent studies [5, 6] highlight the need for accurate and affordable soot and radiation models in industrial CFD (Computational Fluid Dynamics) codes, *i.e.* which are able to treat unstructured meshes and turbulent compressible reactive flows. Moreover, simulations of gas turbine chambers have demonstrated in the past few years that Large Eddy Simulation (LES) provides more accurate results than those given by the RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) approach (see *e.g.* Boudier *et al.* [13]), and well captures combustion instabilities and ignition process [11, 14]. Consequently, the aim of the study presented in this paper is to develop a methodology which is able to compute unsteady combustion with soot formation coupled with radiative transfer in practical combustion devices.

Soot formation modeling is a difficult and challenging task. Involved processes differ from those implicated in the formation of chemical species, because they include longer characteristic time and heterogeneous phase reactions. The need for predictive models in various conditions of combustion, at different levels of pressure and using different fuels has driven the work on soot modeling during the last fifty years (see for example the recent paper of Wang [218]). Although some sooting phenomena are still not explained, numerous models with different levels of complexity have been elaborated and presented below.

Detailed complex kinetic schemes [110, 111] have been developed in order to investigate soot kinetic processes in laminar flames. They describe detailed chemical phenomena such as fuel pyrolysis and oxidation, and formation of soot precursors: acetylene, benzene and PAHs (Polycyclic Aromatic Hydrocarbons). To that end, they involve about a hundred species and hundreds of reactions. Such detailed schemes were combined with a detailed sectional dynamics model and a PAH-based soot model to describe the soot Particle-Size Distribution Function (PSDF) in flames, as realized by

D'Anna *et al.* [112] in the laminar diffusion flame of Santoro *et al.* [149]. Recently, this approach allowed Zhang *et al.* [89] to investigate in the same flame soot particle dynamics in details, focusing on the role of aggregate coagulation efficiency, and exploring still not well understood phenomena such as the particle coalescence process. However, these detailed models are restricted to simple laboratory flame simulations, because of their high computation costs induced by the treatment of one hundred of species and up to 35 sections.

Some modeling efforts have been made on soot particle dynamics and soot kinetics modeling to decrease their costs. To treat soot particle dynamics, discrete sectional methods [137, 219] or the method of moments [109, 115, 220] have been developed to perform simulations of laminar and turbulent diffusion flames with a reduced number of sections or moments (up to 9 sections or 6 moments).

To describe the formation of soot precursors, various levels of modeling were investigated. Sectional methods gave satisfaction to describe PAH chemistry. Zamuner et Dupoirieux [8] and recently Di Domenico *et al.* [5] used one along with a PAH-based soot formation model to compute laminar flames [5] and a turbulent one [8], with the aim of applying this approach to gas turbine simulation. However, the PAH formation route remains computationally expensive to describe, except in dedicated codes as the incompressible one of Di Domenico *et al.* [5].

For that reason, semi-empirical models assume that soot formation is only based on light precursors, such as acetylene, in order to reduce the number of considered species. Many 2D or 3D sooting turbulent flame computations were carried out with the well-known two-equation model of Leung and Lindstedt [107, 108], see for example papers [109, 117, 152, 157], or with the one of Moss and co-workers [104, 106], see for example papers [105, 158]. Several reduction methods are available to describe acetylene formation in an affordable way. Simplification methods are able to produce comprehensive and accurate simplified reaction mechanisms from detailed ones [221]. However, the species number cannot be sufficiently reduced without losing accuracy on acetylene levels. Another type of reduction method consists in tabulating chemistry and coupling it to the CFD software. It is attractive since it results in a strong decrease of the computational cost. Gicquel *et al.* [37] proposed the FPI (Flame Prolongation of ILDM) technique, derived from the ILDM (Intrinsic Low Dimensional Manifolds) method [36]. It indexes the structure of a 1D laminar premixed flame to only one parameter, the progress variable. This method was recently coupled to LES of turbulent premixed combustion [222, 223], with the resolved flame structure reconstructed from 1D filtered laminar premixed flames.

Empirical soot models based on global gas-phase kinetics were also developed to obtain a strong decrease of calculation cost. They are based on correlations resulting from experimental measurements. They only depend on mixture fraction [77, 92] or fuel concentration [93, 100] and some of them use an intermediate species to model the role of soot precursors *i.e.* to decorrelate soot formation and fuel oxidation [96, 100]. Their low computational cost is attractive but they are inherently not predictive and their conditions of use are limited.

In the context of unsteady simulation of soot formation and radiation in practical combustion devices, the description of detailed chemistry as well as soot and PAH dynamics are not affordable in industrial codes. Semi-empirical soot models coupled with a tabulation method appear to be a good compromise between cost and accuracy of predictions. For these reasons, the strategy proposed in this study involves in a CFD code the FPI tabulation method to describe the gas-phase chemistry, coupled with an improved version of the semi-empirical soot model of Leung *et al.* [107]. To the author's

knowledge, it is the first study about coupling between tabulated gas-phase chemistry and a soot model. This paper describes the first validation step of the strategy, applied to laminar premixed ethylene flames to assess the ability of the strategy to predict soot levels. Radiative transfer was also post-processed in such flames with a Monte Carlo method, in order to emphasize the radiative behavior of soot particles compared to gas-phase species. Coupling between radiation and tabulated chemistry is not treated in this study and will be investigated in future work.

B.2 METHODS AND MODELS

B.2.1 Reacting gas flow

Laminar premixed flames have been simulated with the ONERA aerothermochemistry solver, CEDRE [224]. This code is based on a cell-centered unstructured finite-volume method that solves the three-dimensional compressible reacting Navier-Stokes equations. This code is able to compute reacting flows in industrial devices with explicit or implicit time-advance numerical schemes and mesh cells with any geometry. Equations of conservation are solved for momentum, mass fractions of chemical species and total energy:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} - p \mathbf{I}) , \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_k + \dot{\omega}_k , \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_t \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \left(\mathbf{q} + \sum_{k=1}^{n_e} h_k \mathbf{J}_k \right) + \nabla \cdot [(\boldsymbol{\tau} - p \mathbf{I}) \mathbf{v}] + S_{e_t} . \quad (\text{B.3})$$

where ρ is the density, \mathbf{v} the velocity vector, p the pressure, $\boldsymbol{\tau}$ the viscous tensor and \mathbf{I} the identity matrix. The mass fraction, the diffusive flux and the chemical source rate of species k are denoted respectively Y_k , \mathbf{J}_k and $\dot{\omega}_k$. The specific total energy is denoted e_t , the heat flux \mathbf{q} , the chemical species number n_e and the specific enthalpy of species k h_k . Moreover, in calculations presented in this study, a source term S_{e_t} is added to the energy equation in order to impose the experimental temperature profile, for reasons explained in section B.3.2. These equations of conservation are closed by a perfect gas state law and relations for transport and thermodynamic properties, including Newton, Fick and Fourier laws for diffusion of momentum, species and heat. Transport of density is not necessary here because it results from summing up all the species balance equations written under conservative form (B.2).

As the semi-empirical soot model described in section B.2.2 considers acetylene as soot precursor, reacting gas-phase chemistry must contain enough species and reactions to accurately describe acetylene formation. A computationally affordable method consists in tabulating the chemistry as a function of a reduced set of variables. In particular, the FPI method was investigated by Galpin *et al.* [225] and Savre *et al.* [40] for combustion in industrial devices. For this method, a one-dimensional laminar premixed flame is pre-processed with the PREMIX code [30] involving complex detailed chemistry and detailed transport. Resulting species mass fractions and source rates are tabulated as functions of a unique and monotonic progress variable c , defined by Eqn. (B.4), which depends on mass fractions of transported species [39]:

$$c = \frac{Y_{\text{CO}_2} + Y_{\text{CO}}}{Y_{\text{CO}_2}^{eq} + Y_{\text{CO}}^{eq}} , \quad (\text{B.4})$$

where Y_i^{eq} are constant mass fractions evaluated at the burnt gas outlet boundary of the tabulated flame. The chemical database is coupled to the Navier-Stokes equations solved in CEDRE through the transport equations (B.2) for the main species. Chemical source terms $\dot{\omega}_k$ for these species are extracted from the FPI database knowing the value of the progress variable c , evaluated at each grid cell from transported species CO_2 and CO mass fractions with Eqn. (B.4). It is worth noting that the use of a tabulation method allows to accurately estimate concentrations of only species well correlated with the progress variable. As PAHs and soot have strongly different formation characteristic time scales than those of chemical species on which the progress variable is based, they are decorrelated from these species. Then they cannot be tabulated along with the same progress variable. Consequently, an acetylene-based soot model was preferred to PAH-based soot models or soot tabulation. Actual correlation between acetylene and the progress variable defined by Eqn. (B.4) will be verified in the section B.4.1.

B.2.2 Soot model

The soot model is derived from the semi-empirical model of Leung *et al.* [107]. It was largely used and adapted to different flames and fuels (see for example papers [119, 152, 156, 157, 160]). It includes integration of two additional transport equations for the soot mass fraction Y_s and the particle number per mass unit of mixing N . These equations can be written for an unsteady flow as

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_s \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_s + \dot{\omega}_s, \quad (\text{B.5})$$

$$\frac{\partial \rho N}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho N \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_N + \dot{\omega}_N. \quad (\text{B.6})$$

where $\mathbf{J}_s = -\mu \nabla Y_s$ and $\mathbf{J}_N = -\mu \nabla N$ are diffusive fluxes, with μ the mixture dynamic viscosity. Differential diffusion of soot and thermophoresis transport were not considered in this study.

Nucleation, surface growth, oxidation and agglomeration steps of soot formation are taken into account as source terms in equations (B.5) and (B.6). The transport equation for N is only necessary to evaluate the total soot surface area needed for growth and oxidation steps of the model. The model is closed by simplifying assumptions of a spherical particle shape and a monodisperse size distribution. Moreover soot is considered to be entirely carbon with a density ρ_s of $2000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$. With these assumptions, an equivalent particle diameter can be defined from Y_s and N as

$$d_p = \left(\frac{6Y_s}{\pi \rho_s N} \right)^{1/3}. \quad (\text{B.7})$$

The total soot surface area S ($\text{m}^2 \cdot \text{m}_{\text{mixture}}^{-3}$) can be formulated as

$$S = \pi d_p^2 \rho N. \quad (\text{B.8})$$

This original simple model was improved according to Lindstedt's findings [108] and adapted to premixed combustion, as described below. Subsections B.2.2.1 to B.2.2.4 describe each model step with their contribution to source terms of soot mass fraction and particle number, involving Arrhenius rate constants $\mathcal{K}_r(T)$. Reaction rates \dot{W}_r are expressed in ($\text{mol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$) units.

B.2.2.1 Nucleation

This step models incipient soot particle formation. It gives rise to an increase of soot mass fraction and particle number. Acetylene is assumed to be the only incipient species for soot nucleation. Chemical reaction is written



The reaction rate is formulated with the assumption of a first-order dependence on acetylene concentration, as Eqn. (B.10), where index n denotes the nucleation step:

$$\dot{W}_n = \mathcal{K}_n(T) [\text{C}_2\text{H}_2]. \quad (\text{B.10})$$

Lindstedt [108] suggested that nucleation step represents both formation of incipient soot particles and initial soot mass growth. In this way, created particles are assumed to contain a minimum number of carbon atoms C_{\min} , chosen as Leung *et al.* [107] equal to 100. Nucleation part of the particle number source term (in particles $\cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$) may be written as the Eqn. (B.11) [107, 108], where \mathcal{N}_A is Avogadro's number.

$$\dot{\omega}_{N,n} = \frac{2}{C_{\min}} \mathcal{N}_A \dot{W}_n. \quad (\text{B.11})$$

B.2.2.2 Surface growth

The main part of the mass growth is obtained by chemical reaction taking place at the surface of the particles. This mechanism is known as surface growth. According to the well-known surface-HACA (H-Abstraction-C₂H₂-Addition) mechanism proposed by Frenklach et Wang [65] and experimental observations of Harris et Weiner [226], surface growth is assumed to be dominated by acetylene addition on soot surface. The corresponding chemical reduced equation is similar to Eqn. (B.9) for nucleation [107]:



Its reaction rate is written:

$$\dot{W}_g = \mathcal{K}_g(T) f(S) [\text{C}_2\text{H}_2], \quad (\text{B.13})$$

where index g denotes the surface growth step. A function of the available total soot surface $f(S)$ was originally introduced to take effects of surface chemistry into account. The early proposed function $f(S) = S^{1/2}$ [107] gave good results, in agreement with other studies [74, 156, 185, 227]. However, for a given particle size, the soot surface growth is proportional to the soot particle number if interactions between particles are negligible. This implies that $f(S)$ must be proportional to the total soot surface area S and not to the square root of S . Xu *et al.* [72] have observed the decrease of the surface growth rate with the increase of residence time in premixed laminar ethylene/air flames. They suggested that this decrease may be due to the lack of hydrogen atoms in the downstream colder zone of the flame, which prevents active sites from being created according to the HACA mechanism. As the surface of primary particles strictly increases towards downstream in rich premixed flames, a simple way to model the decrease of the active site number in such flames is to use the function $f(S) = S_1^\alpha \rho N$, where $S_1 = \pi d_p^2$ is the surface of one soot particle and α is an arbitrary coefficient. Several values from 0 to 1 for α were investigated and corresponding results will be presented in section B.4.2.2.

B.2.2.3 Oxidation

According to Kronenburg *et al.* [157], Yunardi *et al.* [152] and comments of Leung *et al.* [107], oxidation by OH was added to the original oxidation step by O₂, in order to describe with more accuracy soot oxidation in premixed flames. Chemical reactions of O₂ and OH oxidation steps are written as:



Corresponding reaction rates are formulated:

$$\dot{W}_{ox}^{O_2} = \mathcal{K}_{ox}^{O_2}(T)S [O_2], \quad (B.16)$$

$$\dot{W}_{ox}^{OH} = \mathcal{K}_{ox}^{OH}(T)S [OH]. \quad (B.17)$$

However, in 1D laminar premixed flame cases described in section B.3, soot oxidation by OH was observed to have no effect on soot predictions. Therefore it has been neglected in order to avoid the calculation of the concentration of H and OH species.

B.2.2.4 Agglomeration

Leung *et al.* [107] suggested modeling soot particle agglomeration by the simple reaction (B.18) which induces a source term for the particle number transport equation:



This considers that particles agglomerate into bigger particles of spherical shape, far from the real fractal-like shape of the agglomerates observed in diffusion and partially premixed flames (see for example Arana *et al.* [140]). These agglomerates are actually made up of chains of identifiable primary particles. As argued by Ezekoye et Zhang [228] and Liu *et al.* [227], it appears more appropriate to estimate the total soot surface area from unagglomerated primary particles than from big spherical agglomerates. That is why the original agglomeration step (B.18) is not considered here. Finally, it amounts to neglect the finite area contact joints between primary particles inside nonspherical agglomerates. The number N of soot particles per mass unit of mixing hence becomes the number of primary soot particles per mass unit of mixing, regardless of whether or not they be agglomerated.

Moreover, the soot particles produced in flames similar to the ones simulated in this paper were analyzed by Abid *et al.* [84] and Öktem *et al.* [144] using TEM (Transmission Electron Microscopy). Almost only nearly spherical particles were observed, meaning that agglomeration process did not occur in the investigated flames.

B.2.2.5 Synthesis

Finally, considering all the modeling of sections B.2.2.1 to B.2.2.4, soot mass fraction and particle number source terms, respectively in (kg · m⁻³ · s⁻¹) and in (particles · m⁻³ · s⁻¹), are written:

$$\dot{\omega}_s = \underbrace{2\mathcal{M}_{C_s}\dot{W}_n}_{\dot{\omega}_{s,n}} + \underbrace{2\mathcal{M}_{C_s}\dot{W}_g}_{\dot{\omega}_{s,g}} - \underbrace{\mathcal{M}_{C_s}\dot{W}_{ox}^{O_2}}_{\dot{\omega}_{s,oxO_2}} - \underbrace{\mathcal{M}_{C_s}\dot{W}_{ox}^{OH}}_{\dot{\omega}_{s,oxOH}}, \quad (B.19)$$

$$\dot{\omega}_N = \dot{\omega}_{N,n}, \quad (B.20)$$

with \mathcal{M}_{C_s} the molar mass of soot carbon, and $\dot{\omega}_{s,k}$ the contribution of the soot formation step k to the soot mass source rate $\dot{\omega}_s$.

B.2.3 Radiative transfer

Radiative transfer computations were performed with a Monte Carlo method. Its principle is to replace multiple integrals by finite sums on a large number of stochastically-generated optical paths. Forward and reciprocal formulations detailed in the paper of Tessé *et al.* [53] were tested on the premixed flames described in section B.3.

Concerning the gas phase, only H₂O and CO₂ were taken into account. Their radiative properties were treated in a correlated manner by the CK model used by Tessé *et al.* [9, 53]. Effects of scattering by soot particles have been shown negligible by Eymet *et al.* [229]. Therefore, only emission and absorption have to be taken into account, and the spectral soot absorption coefficient can be deduced from the soot volume fraction f_v by the relation $\kappa_{\nu,s} = 550\nu f_v$, where ν is the wavenumber (in cm⁻¹).

B.3 SIMULATED TEST CASES

B.3.1 Experimental conditions

Two laminar premixed ethylene flames were simulated in this study. The first is a fuel-rich ethylene-air flame experimentally investigated by Xu *et al.* [72]. This flame was studied numerically by Appel *et al.* [111] and more recently by Mehta *et al.* [114]. A water-cooled porous-plate burner was used to stabilize a laminar premixed flat-flame at atmospheric pressure. A coflow of nitrogen surrounded the fuel-rich ethylene-air mixture to prevent it from burning with ambient air. A flat plate with a hole was placed above the flame to ensure its stabilization. Temperature, concentrations of major gas species, soot volume fraction and soot primary particle diameter were measured for three different fuel equivalence ratios. These three sets of conditions are designated as flames XSF2.33, XSF2.64 and XSF2.93 in this paper, according to a nomenclature constructed from the initials of the corresponding authors followed by the fuel-equivalence ratio. More details on experimental conditions and measurement methods are given by Xu *et al.* [72].

The second flame ZYW2.07 is a laminar premixed ethylene-oxygen-argon flame at equivalence ratio $\phi = 2.07$, studied experimentally by Zhao *et al.* [133] and numerically in a companion paper [134] and also by Mehta *et al.* [114]. A water-cooled porous plug burner was used, with an argon coflow shroud. Temperature, PSDF (Particle Size Distribution Function) and soot volume fraction were reported by experimental measurements. Table B.1 gives inlet conditions for the four different flame cases.

	Flame designation / Reference			
	XSF2.33 / [72]	XSF2.64 / [72]	XSF2.93 / [72]	ZYW2.07 / [133]
[C]/[O]	0.78	0.88	0.98	0.69
Fuel-equivalence ratio ϕ	2.33	2.64	2.93	2.07
Dilution ratio	3.31	3.30	3.30	4.37
Reactant mixture	C ₂ H ₄ /O ₂ /N ₂	C ₂ H ₄ /O ₂ /N ₂	C ₂ H ₄ /O ₂ /N ₂	C ₂ H ₄ /O ₂ /Ar
Reactant flow rate (kg · m ⁻² · s ⁻¹)	7.961×10^{-2}	7.958×10^{-2}	6.168×10^{-2}	1.266×10^{-1}

TAB. B.1 | Summary of flame conditions.

B.3.2 Numerical conditions

B.3.2.1 Table construction

For each flame case in Tab. B.1, the experimental flame was simulated in one dimension, without modeling nitrogen or argon coflows. Such a coflow has a shielding effect on the flame, which prevents from reaction with ambient air. But the coflow also generates heat exchanges which may affect the flame temperature. Therefore in our 1D calculations, the experimental temperature profile was imposed on the whole domain to take into account this coflow thermal effect as well as thermal effects of the stabilization flat plate and radiation. In a first step, to generate the FPI table, the stationary flame was computed without soot model with the PREMIX code [30], with the experimental mixture flow rate prescribed as inlet boundary condition. The detailed chemical mechanism of Qin *et al.* [155] involving 70 species up to C_6H_6 and 463 reactions was used to describe ethylene chemistry.

B.3.2.2 CFD calculation

In a second step, the generated FPI table was used with the coupling technique described in section B.2.1 to compute the unsteady one-dimensional flame with CEDRE involving the previously described soot model to evaluate soot volume fraction levels. In rich ethylene flames, most important species in terms of mass and energy are C_2H_4 , O_2 , H_2O , CO_2 , CO , C_2H_2 , C_4H_2 , H_2 and N_2 (or Ar, see Tab. B.1). These nine species were transported, in addition with soot C_s needed by soot modeling.

Because of their small size, soot particles move with the gaseous flow. Moreover, the soot volume fraction is usually very low in flames (mostly less than 10^{-5}). For these reasons, soot is treated in the same way as other gaseous species, *i.e.* with the same state and mixing laws.

Soot particles also interact with other gas-phase species through production and consumption terms added to chemical sources extracted from the FPI table. Consequently a two-way coupling between soot precursors and soot particles is taken into account although the tabulated chemistry is not directly influenced by the soot model. For energy considerations, soot thermodynamic properties are assumed to be those of solid carbon.

Numerical domain was 41 mm long and non-uniformly discretized in 163 cells, with about 20 cells in the flame front. The Fig. B.1 shows the refined zone which contains the flame front. The inlet boundary conditions are given in Tab. B.1. A characteristic non-reflecting condition [230] was fixed on the outlet boundary in order to evacuate pressure waves occurring at first iterations. The initial chemical state was given by flame calculation achieved with the PREMIX code. The energy balance was corrected to impose the experimental temperature profile in CEDRE, for the same reasons as in PREMIX. Flame propagation was computed during 160 ms from initial state. This duration was necessary to obtain stabilized soot levels on the whole computed domain. It was possible to use a one-step Euler implicit method for time marching because acoustics do not affect final results. Used with a time step based on chemical species time scales (about 3×10^{-6} s), it led to a speed-up factor of 20 to 30 on CPU time compared to a two-order explicit Runge-Kutta method with time step limited by the CFL condition (about 3×10^{-8} s). It is worth noting that results obtained with the implicit method have been successfully validated against those obtained with the explicit method. The CEDRE calculation took 40 minutes on a single 2.8 GHz core of a quad-core Intel Nehalem processor.

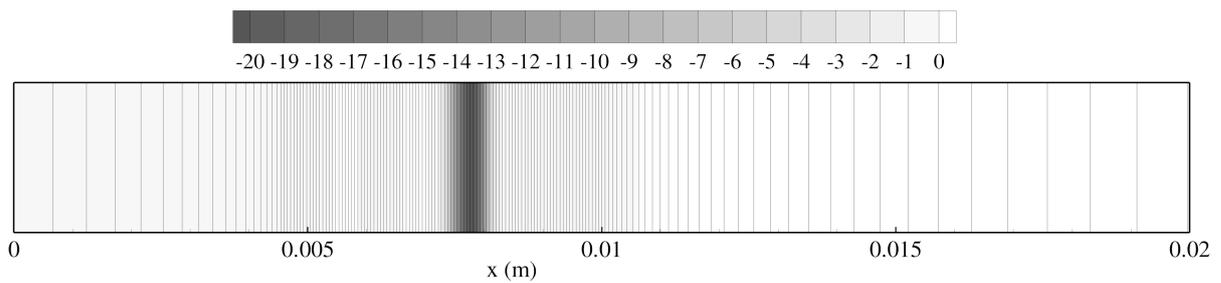


FIG. B.1 | Detail of the mesh used for the 1D flame calculations, colored by the ethylene reaction rate ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$)

B.3.2.3 Radiative transfer

Radiative transfer was computed in a post-processing step because imposed temperature profile in flame calculation already takes radiation effects into account along with other heat losses. The aim of such a calculation is to evaluate separate roles of gas-phase species and soot particles in radiative transfer and to qualify their respective influence at different wavelengths. A 3D mesh was extruded from the one used for aerothermochemistry calculation, but without discretizing transverse dimensions of the 1D test case. The canal section is equal to the burner exit area, to simulate radiation in the estimated whole flame volume. Lateral faces and flow inlet and outlet faces were considered as non-emitting radiative outlets. Incoming radiation emitted by the outside was neglected, except downstream for calculations shown in Fig. B.10.

B.4 RESULTS AND DISCUSSION

B.4.1 Gas phase chemistry

Mole fractions of major gas-phase species have been compared to experimental measurements reported in the paper of Xu *et al.* [72]. Temperature and mole fraction profiles were plotted for flames XSF2.33, XSF2.64 and XSF2.93 on Fig. B.2a, B.2b and B.3a respectively.

For these flames, the temperature profile has to be estimated in the soot-free region near the burner surface, because of the lack of measurement. Compared to previous numerical studies [72, 111, 114], assumption of a stiff temperature profile was preferred to linearly interpolation between the assumed burner surface temperature and the first measurement point located in the flame front. That is the reason why measured mole fractions at upstream measurement points ($x \leq 0.008$ m) are not numerically correctly reproduced (see *e.g.* Fig. B.2a). Computed mole fraction profiles appeared to be slightly translated downstream compared to similar profiles obtained by Appel *et al.* [111] in the flame XSF2.64 with a linearly interpolated temperature profile upstream the first measurement point. The real temperature profile probably lies between a linear profile and the stiff profile used here.

Except for ethylene, numerical predictions show a good agreement with the experiment for flames XSF2.33, XSF2.64 and XSF2.93. Plotted error bars are maximal uncertainties estimated by Xu *et al.* to be 15% for mole fractions greater than 5×10^{-3} . For ethylene mole fraction, significant discrepancies are observed but uncertainties are known to be greater than 15% [72]. Appel *et al.* [111] also observed discrepancies for ethylene mole fractions on the same flame with a more detailed chemical scheme based on the 99-species mechanism of Wang et Frenklach [110].

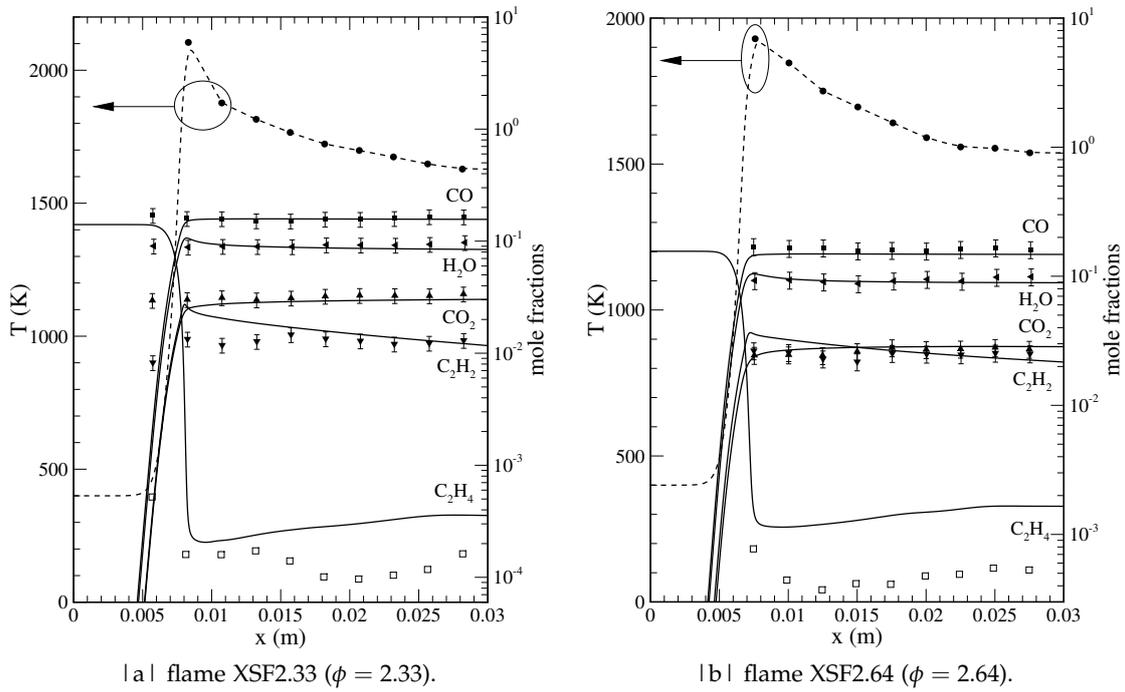


FIG. B.2 | Temperature and main species mole fractions in flames XSF2.33 and XSF2.64. Experimental measurements (symbols) and model predictions (lines).

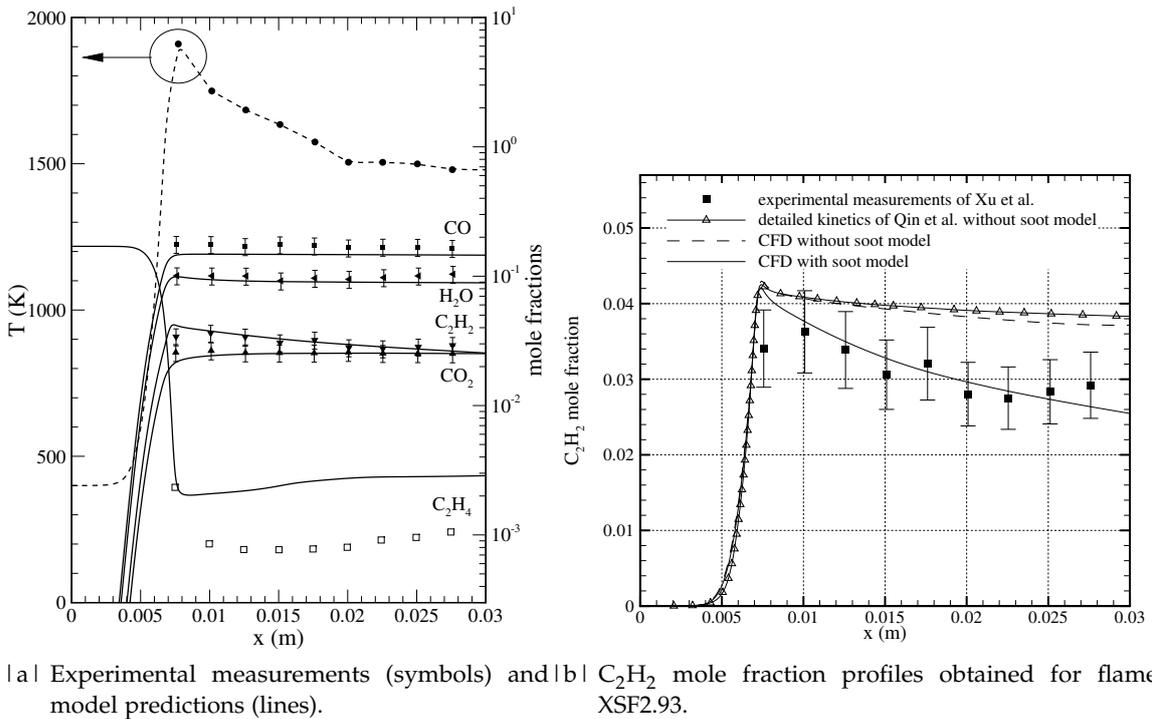


FIG. B.3 | Temperature and main species mole fractions in flame XSF2.93 ($\phi = 2.93$).

On Fig. B.3b, mole fraction of the soot precursor species, acetylene, is plotted along the height above the burner for flame XSF2.93. The 1D code PREMIX involving the detailed chemical scheme of Qin *et al.* [155] and the CFD code CEDRE involving the tabulation method give very similar results when soot is not taken into account. When the soot model is added, acetylene mole fractions obtained in our calculation become closer to those given by the experiment and are found in the range of experimental uncertainties. This effect of coupling between gas-phase and soot chemistry will also contribute to improve soot predictions. However, the accuracy of C_2H_2 predictions decreases near the flame front with decreasing fuel equivalence ratio, whereas it remains satisfactory downstream (see Fig. B.2). Several reasons are suspected, including temperature profile assumption upstream the first measurement point, and the kinetic scheme used, since Appel *et al.* [111] obtained more precise C_2H_2 predictions at $\phi = 2.64$. The tabulation method coupled with the soot model is nevertheless able to reproduce acetylene levels in such rich flame. Being based on acetylene and coupled to the gas-phase chemistry, the semi-empirical soot model is physically limited by its acetylene consumption. It is not the case of empirical soot models, *e.g.* the Tesner-Magnussen model [98, 100], which have to introduce empirical limitations instead.

B.4.2 Soot results

B.4.2.1 Model parameter optimization

The soot model described in section B.2.2 has been used to simulate laminar premixed flames, while Leung and Lindstedt [107, 108] developed it for laminar counterflow flames. As emphasized by Lautenberger *et al.* [77], soot formation is not controlled by the same parameters in premixed combustion as in diffusion flames. In premixed combustion, heterogeneous reactions (nucleation, surface growth and oxidation) are rate-limiting steps and the soot surface area is the most important parameter controlling them, whereas in diffusion flames, soot formation is mainly controlled by gas-phase reactions outside the flame front.

Because of these differences and due to the empirical nature of the soot model, its constants were optimized for ethylene premixed combustion. Soot model parameters were modified to fit soot volume fraction and particle number to experimental results of flame XSF2.64. For the soot surface growth sub-model, soot surface area function was assumed to be $f(S) = \rho N$, *i.e.* $\alpha = 0$ in the expression of $f(S)$ introduced in section B.2.2.2. The low influence of α on the soot volume fraction will be shown in section B.4.2.2. As described in Fig. B.7 and in the paper of Mehta *et al.* [114], surface growth was found to be the dominant step for soot mass change, whereas nucleation step controls the increase of particle number. Therefore, optimization of model parameters consisted in adjusting surface growth pre-exponential factor to the measured soot volume fractions, and nucleation pre-exponential factor to the primary particle number per volume unit of mixing $n_p = \rho N$ calculated by Xu *et al.* [72] from measured primary soot particle diameter. In this study, the particle number per mass unit of mixing N given by the model can be directly compared to n_p because agglomeration is not considered in the soot model.

Resulting constants are summarized in Tab. B.2, where A , β and T_a are respectively pre-exponential factor, temperature exponent and activation energy of Arrhenius rate constants defined as in Eqn. (B.21):

$$\mathcal{K}(T) = AT^\beta \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right). \quad (\text{B.21})$$

Only pre-exponential factors for nucleation and surface growth were modified from

	A	β	T_a	References
Nucleation	7.7×10^4	0	21 100	A : adjusted, β and T_a : [107]
Surface growth	3.0×10^{-10}	0	12 100	A : adjusted, β and T_a : [107]
O ₂ oxidation	7.15×10^6	0.5	19 800	[107, 231]
OH oxidation	3.6×10^2	0.5	0	[157, 232]

TAB. B.2 | Summary of model constants. Units are mol, m, s, K.

the original model. To compute flames XSF2.33, XSF2.93 and ZYW2.07, the same soot model parameters as for XSF2.64 flame were used.

B.4.2.2 Soot surface growth modeling

Dealing with the soot surface area function $f(S) = S_1^\alpha \rho N$, several values from 0 to 1 for α were investigated on the computed flame XSF2.64. Obtained soot volume fraction profiles are compared with the experimental profile in Fig. B.4. Model parameters used in these calculations are those obtained after optimization for $\alpha = 0$ *i.e.* $f(S) = \rho N$ (see Tab. B.2). However, the surface growth pre-exponential factor A_g was adjusted depending on the value of α because it induces a change of the unit of $f(S)$. The low influence of the parameter α on the shape of the soot volume fraction profile is demonstrated in Fig. B.4.

Results presented in the next sections were obtained with the retained function $f(S) = \rho N$ ($\alpha = 0$), which means that big soot particles have a lower surface reactivity than small particles, for a fixed mass of soot. This result is in agreement with findings of Lindstedt [108].

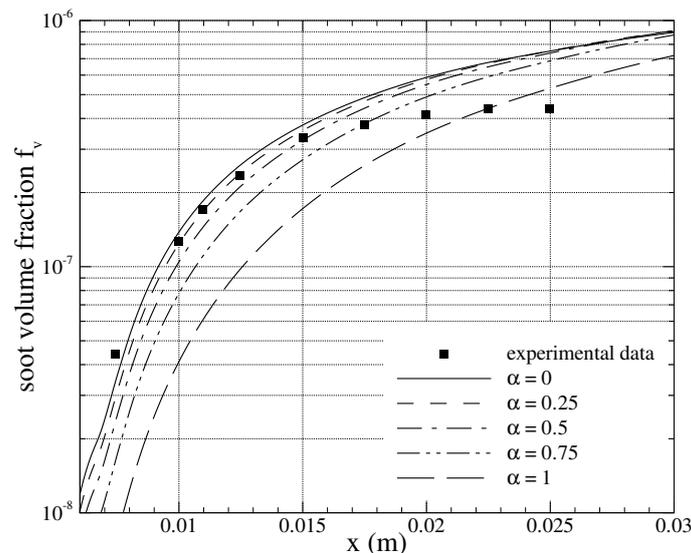


FIG. B.4 | Soot volume fractions obtained in flame XSF2.64 for different types of soot surface area functions.

B.4.2.3 Soot volume fraction results

Soot volume fraction profiles, deduced from soot mass fraction Y_s through the relation $f_v = Y_s \rho / \rho_s$, are presented in Fig. B.5 for the four flames investigated and

compared to experimental data. These data were obtained with an optical method (laser extinction) by Xu *et al.* [72] for $\phi = 2.33$, $\phi = 2.64$ and $\phi = 2.93$, whereas for $\phi = 2.07$ Zhao *et al.* [133] used *in situ* probe sampling with online analysis using a nano scanning mobility particle sizer. Numerical results were obtained with an imposed

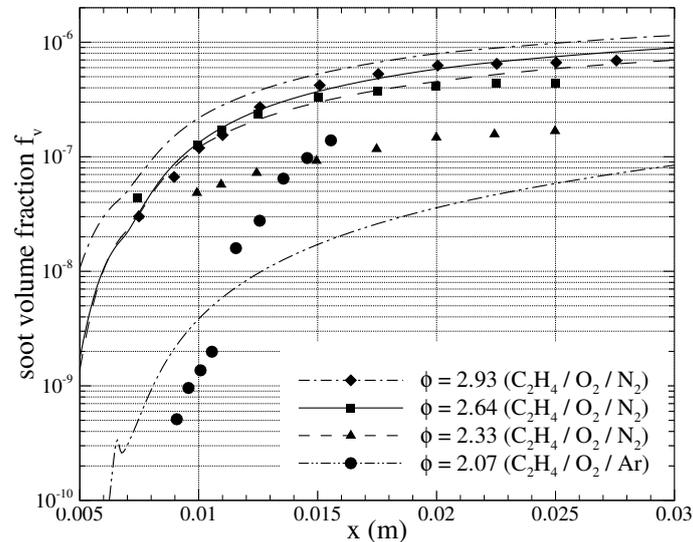


FIG. B.5 | Soot volume fraction profiles along the flame axis in flames XSF2.33, XSF2.64, XSF2.93 and ZYW2.07. Experimental measurements [72, 133] (symbols) and model predictions (lines).

experimental temperature profile measured with a non-intrusive technique. Therefore they cannot be directly compared to probe sampling measurements. To account for the probe disturbances on the flow field and on temperature and concentration profiles, experimental measurements of Zhao *et al.* [133] have been shifted by 3 mm upstream towards the burner, as supported in previous investigations [85, 114, 134, 233, 234]. Profile-shifting has been recognized as a standard method to compare profiles measured with intrusive and non-intrusive techniques although it has no theoretical basis [235].

Soot volume fractions increase with the flame height, downstream the flame front located around 8 mm above the burner. For flames of Xu *et al.* [72], f_v is predicted within a factor of 3 from experimental data. Appel *et al.* [111] found the same discrepancies between experimental data and predictions of their detailed soot model, when using the same set of parameters to compute all flames. The larger discrepancies concerning f_v observed at $\phi = 2.33$ can be explained by the quality of the C_2H_2 prediction which has been discussed in section B.4.1. At $\phi = 2.07$, the model is compared with an intrusive technique of measurement. It overestimates soot volume fraction up to 1.2 cm above the burner and underestimates it downstream by a maximum factor of 7. However, it is worth noting that experimental measurements at $\phi = 2.07$ cross those at $\phi = 2.33$ around $x = 1.5 \times 10^{-2}$ m, whereas the ZYW2.07 flame is cooler (~ 1600 K) than the XSF2.33 flame (~ 1750 K) and its equivalence ratio (2.07) is lower than other investigated flames. Consequently, experimental soot volume fraction at $\phi = 2.07$ are expected to be lower than at $\phi = 2.33$.

At two representative heights above the burner, experimental and numerical soot volume fractions were plotted against the equivalence ratio in Fig. B.6. As expected, soot volume fraction rises when equivalence ratio increases, due to increasing acetylene concentration with the equivalence ratio. Compared to experimental data, the general trend is correctly reproduced, whereas discrepancies are acceptable. Mehta *et al.* [114] found similar differences in the same flames with more detailed modeling of soot

formation.

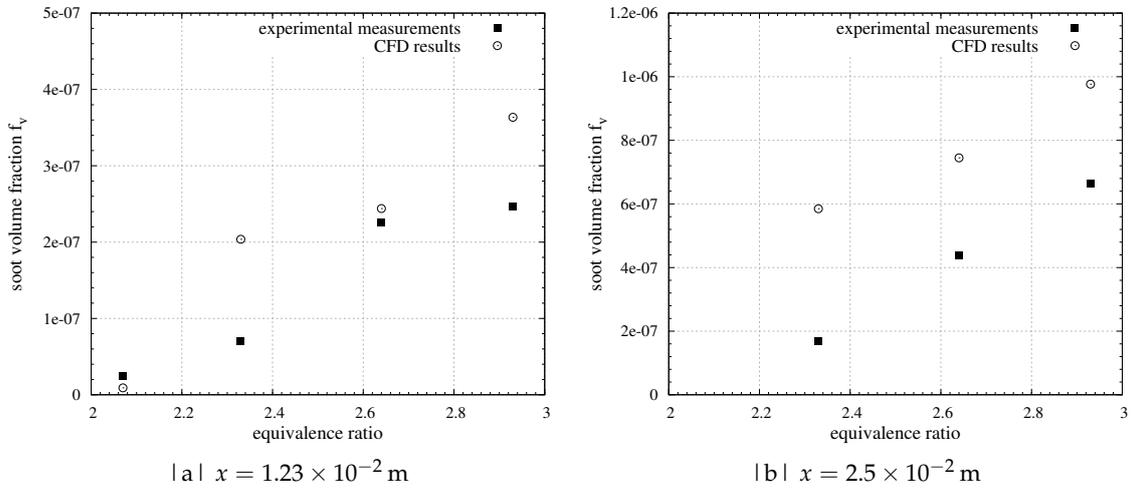


FIG. B.6 | Experimental and computed soot volume fractions according to the equivalence ratio at two axial locations.

To have a deeper insight on the model behavior, contributions of the soot model steps to the soot mass source rate, defined in Eqn. (B.19) as $\dot{\omega}_{s,n}$, $\dot{\omega}_{s,g}$ and $\dot{\omega}_{s,oxO_2}$, are plotted in Fig. B.7 for flame XSF2.93. The nucleation rate is three order lower than surface growth and oxidation rates. It mainly contributes to the production of soot particles just after the flame front, and decreases downstream with the temperature and acetylene concentration. Surface growth is the dominant step of the model, approximately fifteen times higher than O_2 oxidation as expected in such a fuel-rich flame. Surface growth rate increases with soot surface area and decreases downstream with temperature and acetylene concentration. Correlated with the O_2 concentration, oxidation is only significant near the flame front.

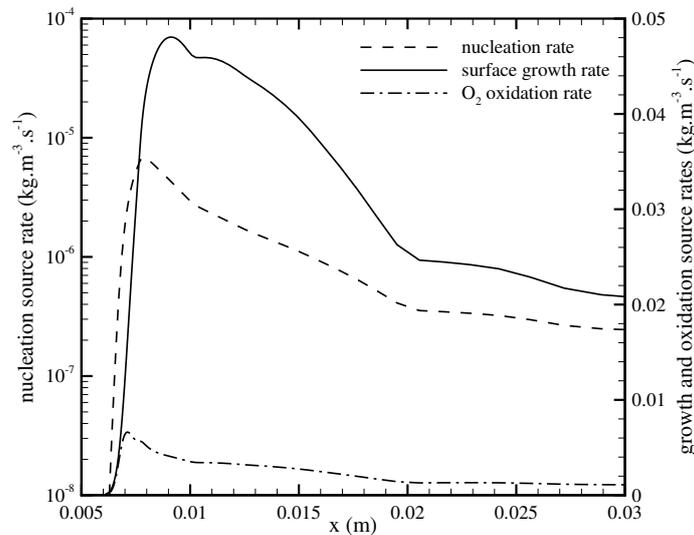


FIG. B.7 | Soot formation step source rates obtained in the laminar premixed ethylene-air flame XSF2.93 ($kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$).

B.4.3 Flame radiation

Radiative transfer was computed in a post-processing step from results reported above. Flame XSF2.64 was chosen to detail spatial and spectral distributions of the radiative power in such a rich premixed flame. The conventional Forward Method (FM) converges more rapidly than other methods in this configuration, as observed by Tessé *et al.* in an optically thin medium of gas mixture (case 6 of [53]). In Fig. B.8 total radiative powers are plotted for H₂O, CO₂ and soot considered separately, and for the mixture of these components. Spectral radiative powers at $x = 0.03$ m are plotted in Fig. B.9. Radiative energy loss of the flame appears to be mainly due to soot particles (about 80 % of total radiative power).

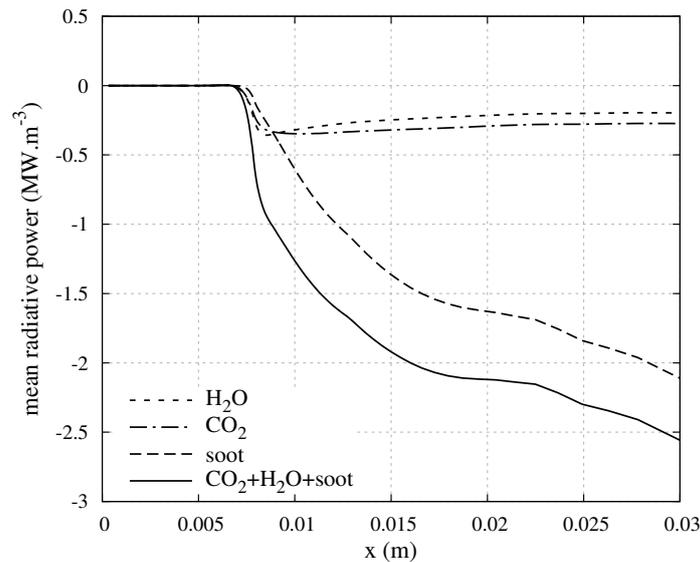


FIG. B.8 | Gas and soot contributions to the radiative power in flame XSF2.64.

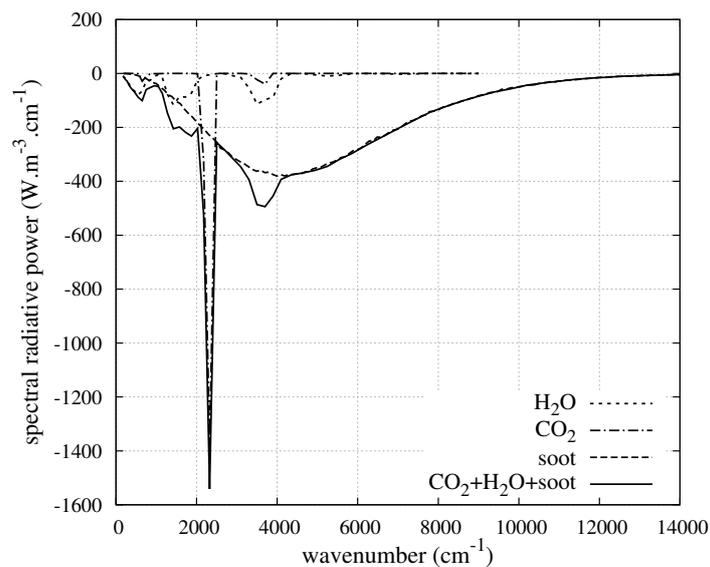


FIG. B.9 | Gas and soot contributions to the spectral radiative power at $x = 0.03$ m in flame XSF2.64.

The main uncertainty of radiative transfer modeling with the 1D approximation in this flame lies in estimating roles of the stabilization plate and the hot burnt gases

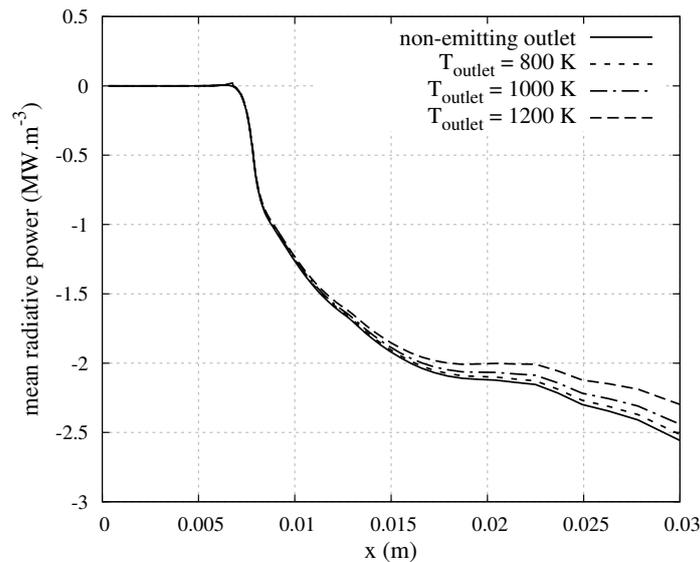


FIG. B.10 | Total radiative powers in flame XSF2.64 obtained with different downstream radiative boundary conditions.

downstream the flame. To evaluate the influence of the downstream radiative boundary condition, incoming radiation from the outside was taken into account with an emitting black wall at various temperatures. Total radiative powers are compared in Fig. B.10 to the previous one obtained with a non-emitting radiative outlet, for the $\text{H}_2\text{O}+\text{CO}_2+\text{soot}$ mixture. Outside emission can reduce the absolute value of radiative power loss of less than 10%. It is worth noting that 1D approximation is valuable for combustion and soot formation calculation but not for radiative transfer modeling which depends on the 3D experimental conditions.

B.5 CONCLUSION

Laminar premixed 1D ethylene rich flames were computed with a CFD compressible code, involving a tabulation FPI method for detailed gas-phase chemistry and a semi-empirical soot model. In addition, radiative transfer was post-processed with a Monte Carlo method for gas and soot radiation. Major chemical species were well described by the FPI tabulation method, compared to measurements. In particular, prediction of soot precursor species such as acetylene was improved when the soot formation is modeled. The surface growth dependence on total soot surface area was investigated. A dependence on the particle number instead of on the soot surface area was found to give soot volume fractions closer to experimental data. The soot model parameters were adjusted for one equivalence ratio, and applied without further modifications to other equivalence ratios. The evolution of soot volume fraction with the equivalence ratio is similar to predictions of more detailed models involved in other studies [111, 114]. Finally, the innovative methodology based on the FPI tabulation method coupled with a semi-empirical soot model was successful to predict soot precursors and soot particles levels in rich premixed laminar flames. Moreover, soot particles were shown to dominate radiative transfer in such a sooting flame, compared to H_2O and CO_2 species. Therefore soot radiation cannot be neglected to correctly evaluate heat transfer.

After this first validation step, the modeling strategy will be applied to a combustion chamber to model unsteady turbulent combustion with soot formation and coupled

radiative transfer. For this, the FPI tabulation method will be extended to partially premixed combustion and radiative flames in adding respectively the mixture fraction and the enthalpy as additional dimensions to the FPI database (as in the paper of Fiorina *et al.* [39]). Moreover full coupling between aerothermochemistry and radiative transfer phenomena will be taken into account. Modeling of interactions between turbulence and gas-phase chemistry, soot and radiation is known as a crucial key point [6] that will be addressed in a future study.

Compléments sur la simulation de flamme 1D laminaire prémélangée avec CEDRE

C

Table des matières

C.1	Méthodes pour imposer le profil expérimental de température	275
C.1.1	Profil constant au cours du temps	276
C.1.2	Profil tabulé suivant la variable d'avancement	277
C.1.2.1	Évolution de la variable d'avancement	277
C.1.2.2	Reprise de calcul non-coïncidente	277
C.1.3	Profil tabulé suivant x avec suivi de flamme	279

Cette section apporte des compléments d'information sur la mise en œuvre du calcul de flamme 1D laminaire prémélangée avec CEDRE.

C.1 MÉTHODES POUR IMPOSER LE PROFIL EXPÉRIMENTAL DE TEMPÉRATURE

La formation et l'oxydation des suies sont dépendantes de la température des gaz environnants. Pour étudier la formation des suies dans les flammes, il est donc nécessaire de prendre en compte toutes les sources de pertes de chaleur, comme par exemple le rayonnement, le système de refroidissement du brûleur ou la présence d'un coflow froid isolant la flamme. Cela complique la modélisation d'une configuration réelle. Dans les flammes monodimensionnelles, la manière la plus simple de prendre en compte ces pertes thermiques est d'imposer par un moyen numérique le profil de température expérimental dans la flamme. Cette solution est couramment adoptée dans la littérature pour l'étude de mécanismes chimiques et de modèles de suies dans ce type de flamme (voir par exemple [84, 111, 114, 134]). Dans le code de recherche PREMIX [30], cette fonctionnalité est disponible en mode *simulation de flamme stabilisée par brûleur*. Mais dans les codes à vocation industrielle comme CEDRE, il a fallu trouver une méthode pour disposer de cette fonctionnalité.

Pour que la fonctionnalité soit la moins intrusive possible et qu'elle s'intègre bien dans la structure du code, l'idée proposée ici est d'ajouter un terme source d'énergie supplémentaire $\dot{\omega}_{e_t}^{\text{exp}}$ dans l'équation de transport de l'énergie totale (C.1) pour modifier indirectement le champ de température.

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_t \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_{e_t} + \nabla \cdot [(\boldsymbol{\tau} - p\mathbf{I}) \mathbf{v}] + \dot{\omega}_{e_t} + \dot{\omega}_{e_t}^{\text{exp}}. \quad (\text{C.1})$$

En négligeant les transports diffusifs et convectifs, et en annulant les autres sources d'énergie $\dot{\omega}_{e_t} = 0$, on obtient :

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} = \dot{\omega}_{e_t}^{\text{exp}}. \quad (\text{C.2})$$

Si on désire obtenir $T = T_{\text{exp}}$ après une durée Δt , on formule le terme source d'énergie à imposer :

$$\dot{\omega}_{e_t}^{\text{exp}} = \frac{[\rho e_t](T_{\text{exp}}) - [\rho e_t](T)}{\Delta t}. \quad (\text{C.3})$$

Or par définition, dans le cas d'un écoulement laminaire :

$$e_t = e + \frac{v^2}{2}, \quad (\text{C.4})$$

où l'énergie interne e est définie par :

$$e(T) = e_f + \int_{T_{\text{ref}}}^T c_v(T) dT, \quad (\text{C.5})$$

avec l'énergie interne de formation du mélange $e_f = h_f - rT_{\text{ref}}$, et c_v la capacité thermique massique à volume constant du mélange réactif. T_{ref} est quant à elle la température à l'état de référence.

Pour simplifier grandement le problème du calcul de $\dot{\omega}_{e_t}^{\text{exp}}$ en 0D, on fait l'hypothèse que la masse volumique ρ et la vitesse de l'écoulement sont indépendantes de la température, soit :

$$\rho(T) = \rho(T_{\text{exp}}) \quad (\text{C.6})$$

$$v(T) = v(T_{\text{exp}}) \quad (\text{C.7})$$

Cette hypothèse sera justifiée quand T et T_{exp} seront très proches, ce qui sera le cas lorsque le calcul de flamme 1D aura atteint son régime établi. Comme on s'intéresse aux résultats obtenus en régime établi, on peut faire cette hypothèse forte. En outre, pour que le terme source $\dot{\omega}_{e_t}^{\text{exp}}$ ne soit pas trop violent numériquement, on applique un coefficient $\alpha < 1$ pour éviter les valeurs trop forte de source d'énergie. Ce coefficient va simplement ralentir l'établissement du régime. On calcule finalement :

$$\dot{\omega}_{e_t}^{\text{exp}} = \alpha \rho \frac{e(T_{\text{exp}}) - e(T)}{\Delta t} \quad (\text{C.8})$$

Il s'agit maintenant de déterminer le profil expérimental $T_{\text{exp}}(x)$ à imposer à chaque pas de temps, pour en déduire le profil d'énergie interne associé $e(T_{\text{exp}})$. Les trois solutions suivantes ont été testées et sont décrites dans les paragraphes suivants :

- Imposer le profil $T_{\text{exp}}(x)$ invariant en fonction du temps ;
- Tabuler T_{exp} en fonction de la variable d'avancement c de la méthode FPI ;
- Imposer le profil $T_{\text{exp}}(x)$ avec suivi du déplacement du front de flamme.

On retiendra finalement la troisième solution, les deux premières étant mises en défaut.

C.1.1 Profil constant au cours du temps

L'idée la plus simple est d'imposer un profil de température identique pendant toute la durée du calcul. Les points de mesure expérimentaux ont été numérisés puis translatés pour que le profil coïncide avec celui qui est tabulé par la méthode FPI, et imposé comme état initial au calcul de flamme. On visualise sur la figure C.1 les profils obtenus à deux instants du calcul CEDRE. Dans le cas de la flamme de Xu *et al.* [72], le

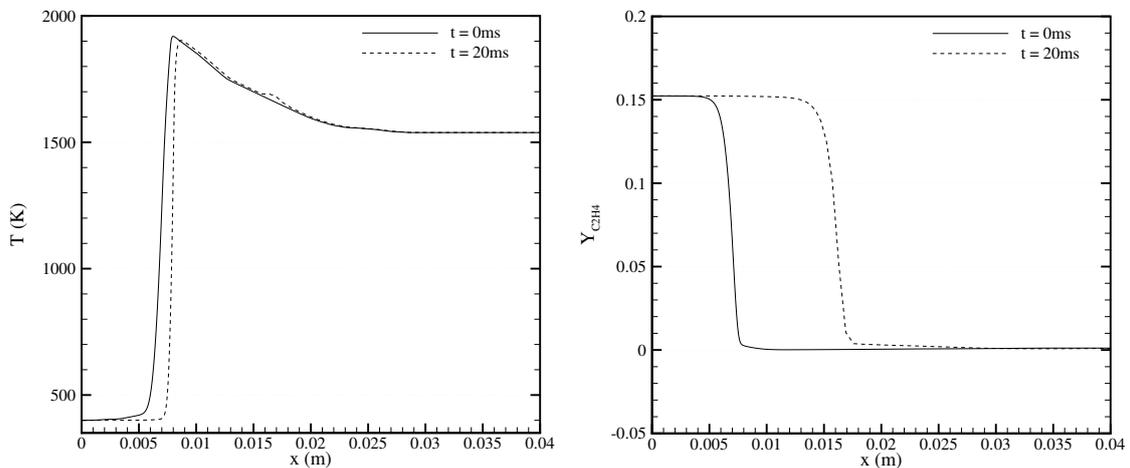


FIG. C.1 | Profils de température et de fraction massique de C_2H_4 obtenus après 1 et 20 ms de calcul.

profil de température expérimental n'est pas défini en amont de la température maximale mesurée (premier point mesuré, situé dans le front de flamme). Pour construire la table, le profil en amont du front de flamme a été choisi arbitrairement. Cependant, on décide de laisser évoluer ce profil dans CEDRE pour limiter l'influence de ce choix arbitraire sur le calcul. Le terme source $\dot{\omega}_{e_t}^{\text{exp}}$ est donc imposé à partir du premier point de mesure.

On observe sur la figure C.1 que le profil de température est bien conservé en aval du saut de température, tandis qu'il évolue légèrement en amont, comme prévu. En revanche, on observe un déplacement du front de flamme représenté par le déplacement de la discontinuité des profils de $Y_{\text{C}_2\text{H}_4}$ au cours du temps. Il est causé par les flux

diffusifs et convectifs. Comme les termes sources chimiques sont issus de la table via l'évaluation d'une variable d'avancement indépendante de T , la chimie de l'écoulement évolue indépendamment de sa température. La flamme devient donc incohérente. Ce déplacement est inévitable, car il est difficile et fastidieux de déterminer la vitesse exacte de déplacement de la flamme pour l'imposer en entrée du domaine de calcul. On en conclut que cette méthode n'est pas satisfaisante.

C.1.2 Profil tabulé suivant la variable d'avancement

La variable d'avancement c peut être définie par l'équation (B.4) de la section B.2.1. Elle est monotone et corrélée au déplacement de la flamme. On peut calculer la fonction $T_{\text{exp}}(c)$ à l'initialisation du calcul puis imposer cette fonction à chaque pas de temps du calcul, ce qui permet d'imposer un profil de température qui se déplace avec la flamme. Cependant, deux problèmes apparaissent :

- La variable d'avancement évolue au cours du temps et s'éloigne de sa valeur tabulée ;
- La reprise d'un calcul est non-coïncidente.

C.1.2.1 Évolution de la variable d'avancement

Julien Savre met en lumière [26, 40] trois causes possibles qui peuvent perturber le modèle FPI dans le cas d'un couplage faible avec CEDRE :

- (i) Les flux de diffusion ne sont pas calculés de la même manière dans CEDRE et dans PREMIX, ce qui induit parfois leur incohérence ;
- (ii) La conservation des atomes n'est pas vérifiée dans CEDRE puisqu'on transporte un jeu réduit d'espèces ;
- (iii) Les termes sources chimiques interpolés dans la table peuvent ne pas être cohérents avec les équations de transport résolues dans CEDRE.

La figure C.2 montre la perturbation induite par ces trois causes sur la variable d'avancement. Comme le profil de T_{exp} est tabulé en fonction de c , la moindre déviation influe sur la température de la flamme dans CEDRE. On constate sur les figures C.2 et C.3 qu'en aval de la flamme, sur l'intervalle $x \in [0,01;0,03]$, c varie spatialement de 2% de sa valeur en $x = 0,03$ m alors que T varie spatialement de 19% de sa valeur en $x = 0,03$ m. La faible variation temporelle de c observée sur le détail de la figure C.2 induit par conséquent une variation plus forte de la température. Par exemple en $x = 0,018$ m, c varie de 0,07% en 28 ms tandis que T varie de 2,5%. On précise que pour les figures C.2 et C.3, l'état de la flamme à $t = 30$ ms a été translaté pour compenser le déplacement de la flamme et pouvoir comparer les profils, de telle manière que les profils de c coïncident.

C.1.2.2 Reprise de calcul non-coïncidente

Le code CEDRE permet la reprise d'un ancien calcul pour le prolonger. Dans le cas présent, la reprise d'un calcul de notre flamme va avoir pour effet la retabulation du profil de $T_{\text{exp}}(x)$ en fonction de c sans tenir compte du déplacement de la flamme lors du calcul précédent. La flamme va alors remonter vers l'amont jusqu'à coïncider de nouveau avec le champ de température. En raison de la perturbation de c évoquée dans le paragraphe précédent, le champ de température obtenu à la fin du calcul précédent est faussé. On ne peut donc pas repartir de ce champ. La reprise permet dans ce cas de rétablir un champ de T_{exp} correct. Néanmoins, comme à la reprise le champ de T n'est

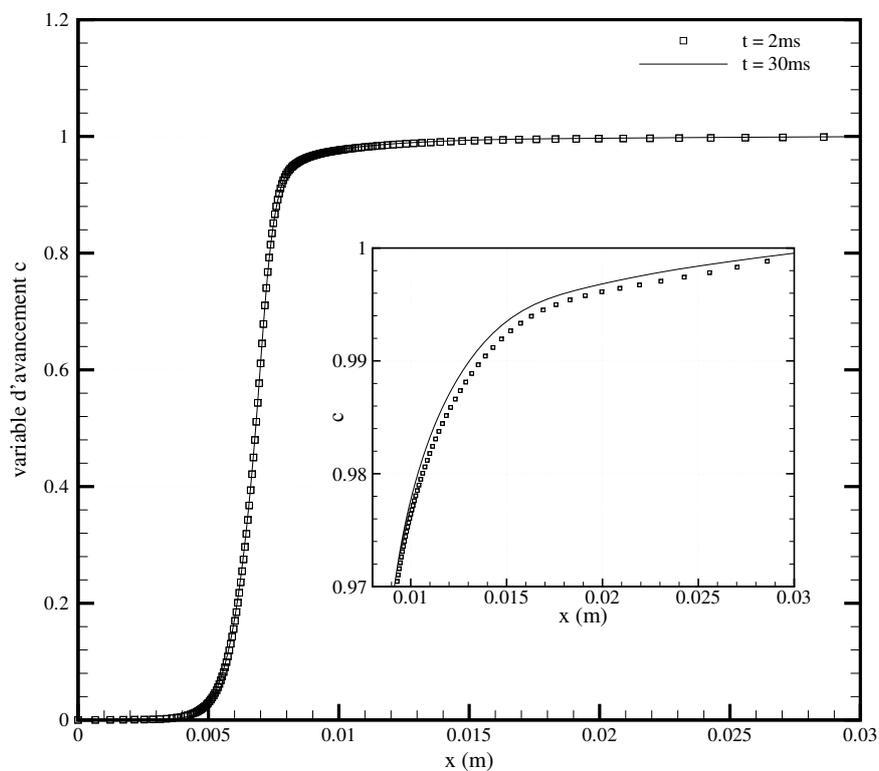
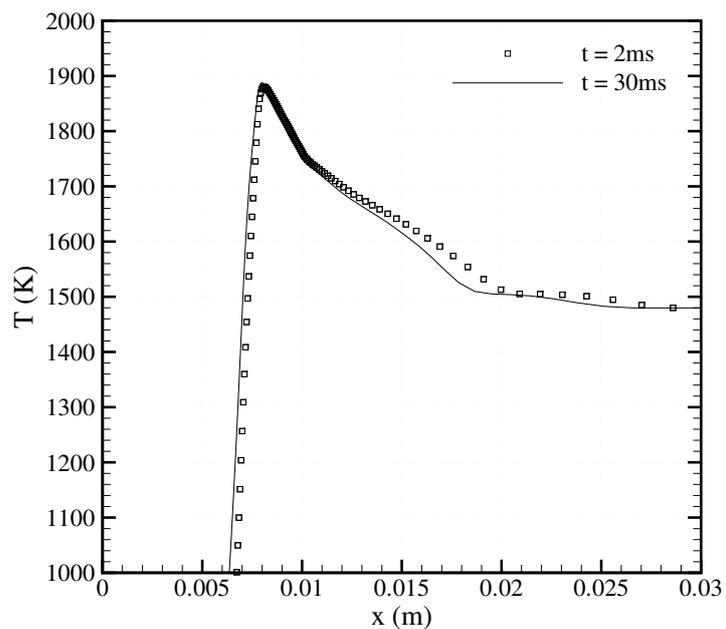
FIG. C.2 | Profils de la variable d'avancement c obtenus après 2 et 30 ms de calcul.

FIG. C.3 | Détail des profils de température obtenus après 2 et 30 ms de calcul.

pas coïncidant avec la composition de la flamme, on voit apparaître un artefact qui est capté par le modèle de suies de Tesner-Magnussen, très sensible aux perturbations de la flamme. La figure C.4 montre cet artefact sur le profil de fraction volumique de suies correspondant à la méthode $T_{\text{exp}}(c)$. En conclusion, la méthode de tabulation de T_{exp} en

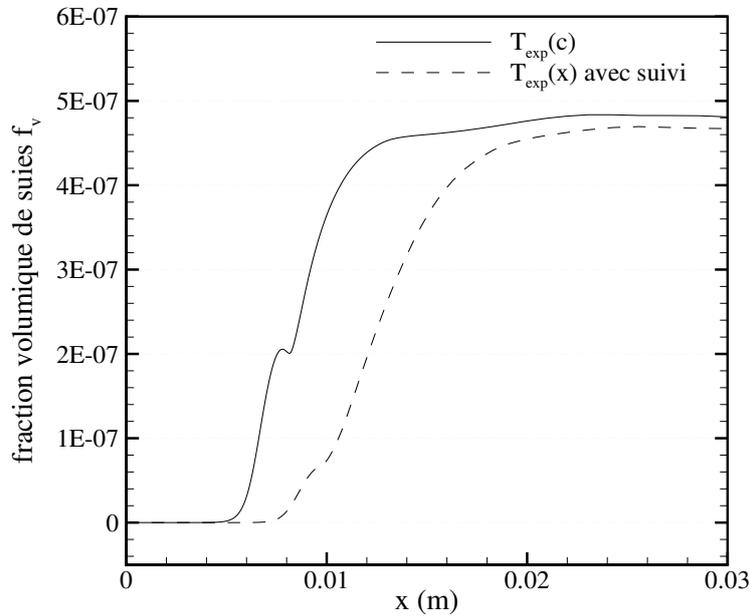


FIG. C.4 | Profils de fraction volumique de suies obtenus en tabulant $T_{\text{exp}}(c)$ ou $T_{\text{exp}}(x)$ avec suivi du déplacement de la flamme.

fonction de la variable d'avancement a montré ses limites. Il est nécessaire d'améliorer cette méthode pour avoir des résultats fiables.

C.1.3 Profil tabulé suivant x avec suivi de flamme

La méthode qui a donné pleinement satisfaction consiste à suivre le déplacement de la flamme et à translater à chaque itération du calcul le profil expérimental de température que l'on doit imposer. Pour cela, on se fixe d'abord une caractéristique de la flamme qui permet de suivre son déplacement. On choisit une valeur de $Y_{\text{C}_2\text{H}_4}$ qui se situe dans le front de flamme, soit par exemple :

$$Y_{\text{C}_2\text{H}_4}^{\text{suivi}} = \frac{1}{2}(Y_{\text{C}_2\text{H}_4}^{\text{GF}} + Y_{\text{C}_2\text{H}_4}^{\text{GB}}) \quad (\text{C.9})$$

où $Y_{\text{C}_2\text{H}_4}^{\text{GF}}$ et $Y_{\text{C}_2\text{H}_4}^{\text{GB}}$ sont respectivement les valeurs de $Y_{\text{C}_2\text{H}_4}$ dans les gaz frais et dans les gaz brûlés. On recherche ensuite cette valeur $Y_{\text{C}_2\text{H}_4}^{\text{suivi}}$ à chaque itération pour trouver son abscisse exacte et pour décaler en conséquence le profil expérimental de température avant son interpolation sur le maillage CEDRE. Le profil $T_{\text{exp}}(x)$ n'est pas perturbé au cours du calcul. A la reprise d'un calcul, on réutilise le profil résultant du calcul précédent pour tenir compte du déplacement de la flamme. On calcule un décalage initial en alignant les deux profils sur la température maximale. Cette technique n'est pas générale mais s'applique bien aux profils expérimentaux mesurés dans les flammes étudiées car ils comportent un point de température maximale proche du front de flamme.

Finalement, le profil de température est correctement imposé tout au long du calcul, comme observé sur la figure C.5, pour laquelle le profil à $t = 160$ ms a été translaté

de manière à faire coïncider les profils de c . Un léger décalage subsiste en amont de la température maximale car à cet endroit le profil de température évolue librement, comme expliqué précédemment. Par ailleurs, cette méthode de suivi de flamme permet

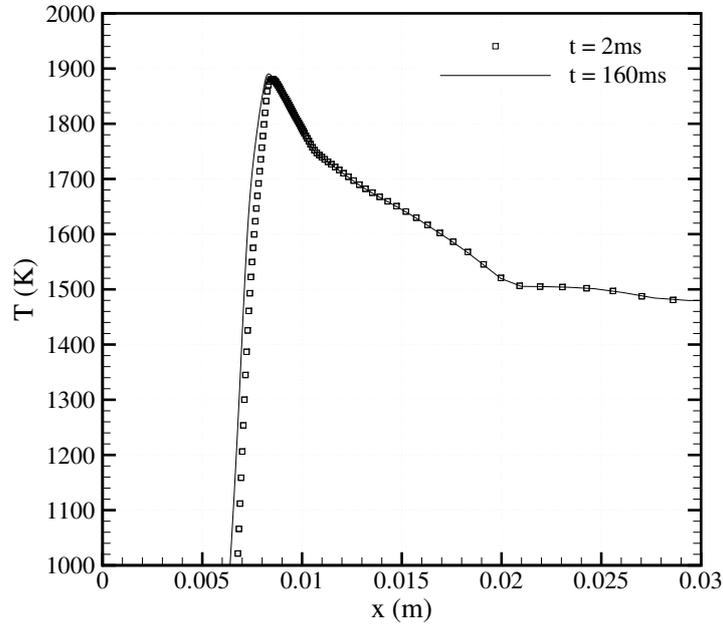


FIG. C.5 | Détail des profils de température obtenus après 2 et 160 ms de calcul en imposant $T_{\text{exp}}(x)$ en suivant le déplacement de la flamme.

d'inhiber la formation d'artefact sur la fraction volumique de suies comme observé précédemment sur la figure C.4. Sur cette figure, le profil de f_v obtenu avec la méthode de suivi a été tracé et ne présente pas d'artefact. Les deux profils ne sont pas recouvrants puisque la dynamique de la flamme n'est pas la même selon la méthode utilisée pour imposer le profil de T_{exp} .

En conclusion, on utilise cette dernière méthode pour imposer le profil expérimental de température dans les flammes 1D laminaires prémélangées calculées dans ces travaux de thèse.

Résultats complémentaires de la simulation de la chambre TLC

D

Table des matières

D.1 Lignes de courant de l'écoulement moyen	283
D.2 Indice de Takeno sur les champs moyens	283
D.3 Résultats supplémentaires	283

D.1 LIGNES DE COURANT DE L'ÉCOULEMENT MOYEN

La figure D.1 met en évidence des lignes de courant particulières passant dans l'ARZ et qui remontent vers l'amont jusqu'au centre de l'injecteur. Elles ont été construites à partir d'une section prise en sortie du 1^{er} étage de vrilles axiales, schématisée par une flèche sur la figure D.1b. Celle-ci détaille la construction d'une partie des lignes de courant tracées en figure D.1a. Les lignes de courant qui nous intéressent (en rouge) sont construites en remontant l'écoulement à partir de points situés le long de la flèche. Cela restreint évidemment la description de l'ARZ aux seules lignes de courant qui remontent à cet endroit, mais cela rend possible l'observation de l'enroulement de l'écoulement autour de l'axe (figure D.1a), causé par la dépression due au swirl. La construction de lignes de courant à partir d'une section située en aval de celle utilisée ici a permis de confirmer cet enroulement (voir figure D.2). On note par ailleurs la formation d'une petite recirculation autour de l'injecteur pilote créée par le culot situé en sortie du 1^{er} étage de vrilles axiales et mise en évidence sur la figure D.1b par quelques lignes de courant rouges.

D.2 INDICE DE TAKENO SUR LES CHAMPS MOYENS

La figure D.3 propose à l'instar de la figure 6.11a le champ moyen de l'indice de Takeno pondéré par le taux de réaction moyen, ce qui s'écrit :

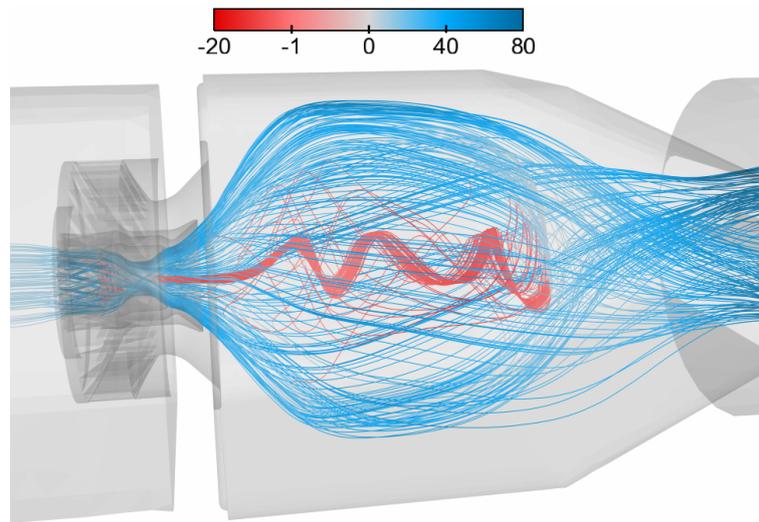
$$\widehat{\omega}_F^* = \langle \dot{\omega}_F \rangle \left\langle \frac{\mathcal{T}}{\|\nabla Y_F\| \|\nabla Y_{Ox}\|} \right\rangle. \quad (D.1)$$

L'opérateur $\widehat{\cdot}$ désigne une moyenne approchée, pour laquelle on néglige les termes de corrélation du taux de réaction avec l'indice de Takeno. Les remarques faites en section 6.1.1.6 sur les figures 6.11a et 6.11b sont confirmées : on retrouve les mêmes zones de prémélange et de diffusion. On observe en plus la présence de petites zones de diffusion du côté gaz frais de la flamme, qui étaient absentes du champ instantané. Le régime de diffusion est ici induit par le mélange de deux écoulements swirlés contra-rotatifs visibles sur le champ de vitesse azimutale (figure 6.4c) : le premier provient du deuxième étage de vrilles axiales et est riche en kérosène gazeux (voir figure 6.11b), et le second, riche en air frais, provient de l'étage de vrilles radiales.

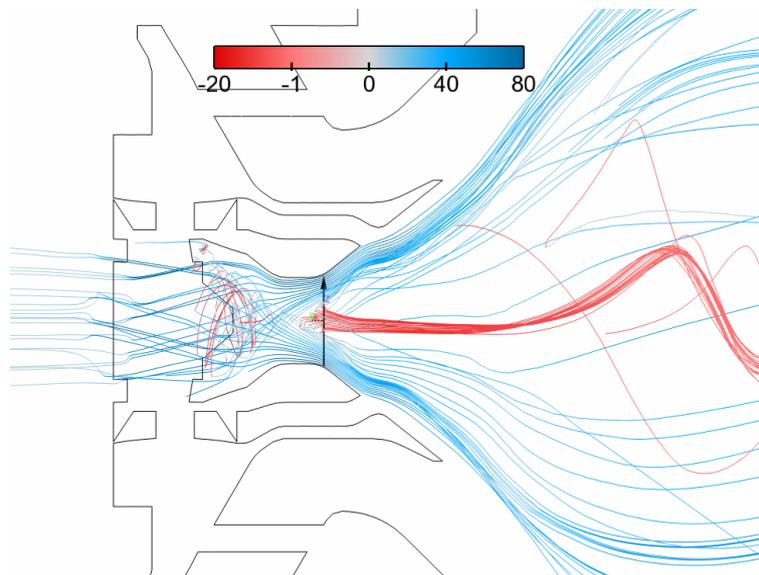
Par ailleurs, le tracé du nuage de points restreint à la zone de flamme (figure 6.15a en section 6.1.1.6) a montré la présence de nombreux points situés à basse température. On localise ces zones sur la figure D.3, sur laquelle on superpose au champ d'indice de Takeno moyen une isoligne délimitant les zones réactives ($\dot{\omega}_T > 8 \cdot 10^9 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$) et relativement froides ($T^* < 0,54$). On constate qu'elles sont placées en sortie de vrilles radiales, dans une zone où les vitesses sont élevées (jusqu'à $75 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$), ce qui contribue certainement à modérer l'effet local du dégagement de chaleur. De plus, l'évaporation des gouttes de kérosène peut également avoir un effet puisque c'est un phénomène endothermique. Cependant, le champ moyen de température peut être influencé par des phénomènes instationnaires qui affecteraient avec moins d'intensité le champ moyen de dégagement de chaleur, ce qui nous empêche ici d'être totalement affirmatif sur la raison de la présence de ces zones froides dans la flamme.

D.3 RÉSULTATS SUPPLÉMENTAIRES

Les figures D.4, D.5, D.6, D.7 et le tableau D.1 permettent d'étayer les commentaires des chapitres 6 et 7.

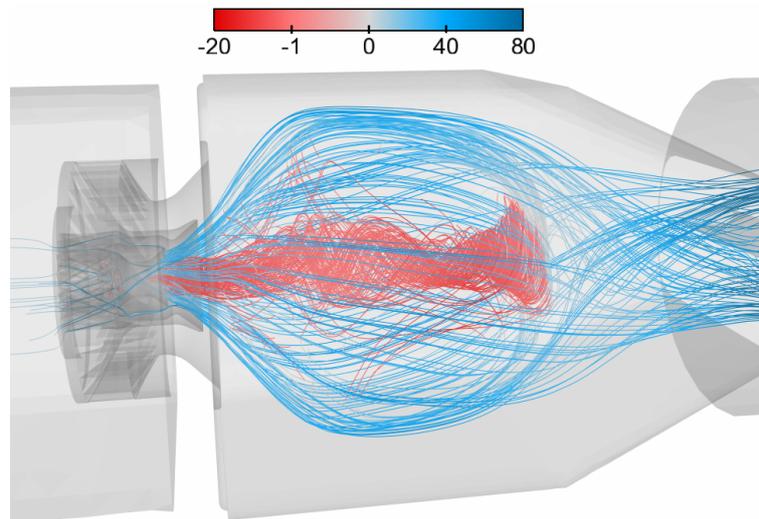


l a | Sélection de lignes de courant issues de points situés dans la section mise en évidence par la flèche sur la figure D.1b

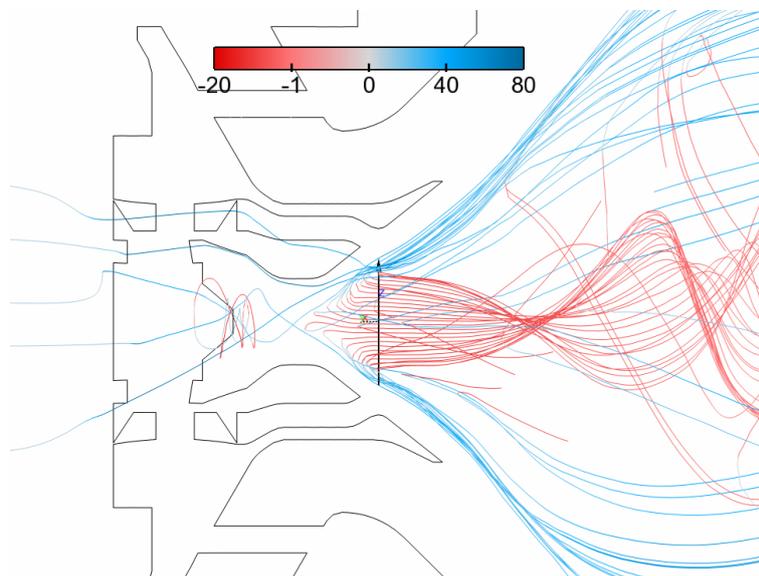


l b | Zoom sur quelques lignes de courant tracées en figure D.1a

FIG. D.1 | Lignes de courant particulières, tracées à partir du champ de vitesse moyenne obtenu en LES, colorées par la vitesse axiale.



|a| Sélection de lignes de courant issues du bol de l'injecteur pilote passant au centre de la recirculation



|b| Détails d'une ligne de construction des lignes de courant tracées en figure D.2a

FIG. D.2 | Lignes de courant particulières, tracées à partir du champ de vitesse moyenne obtenu en LES, colorées par la vitesse axiale, et construites à partir d'une section située en aval de celle utilisée sur la figure D.1.

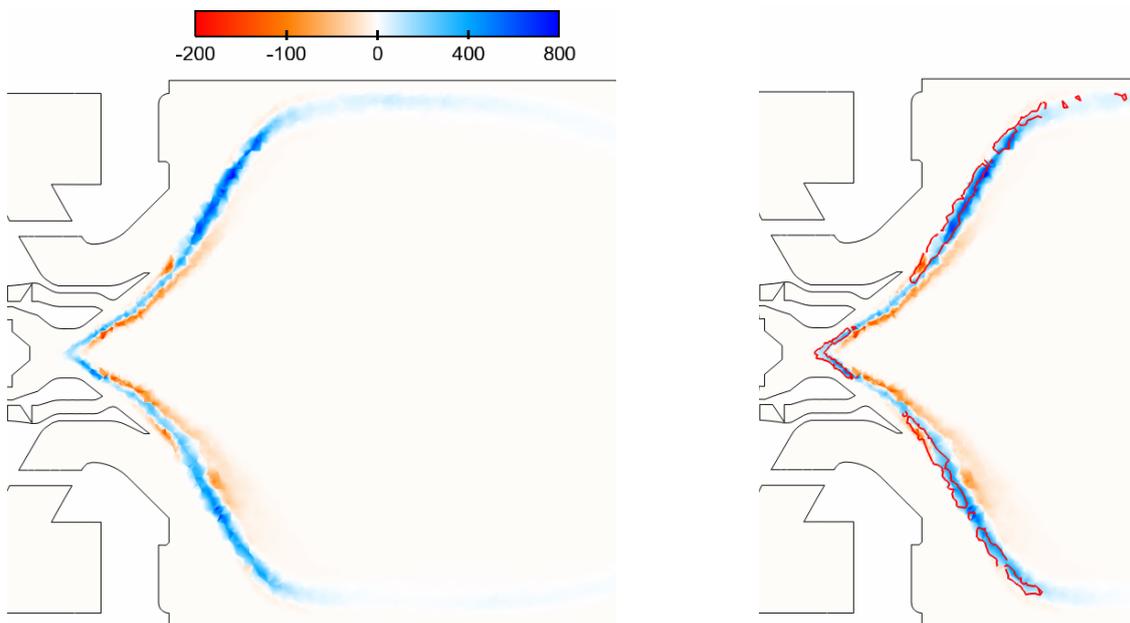


FIG. D.3 | Indice de Takeno moyen pondéré par le terme de consommation moyenne de combustible, avec une isoligne (à droite) délimitant les zones telles que $\dot{\omega}_T > 8 \cdot 10^9 \text{ W} \cdot \text{m}^{-3}$ et $T^* < 0,54$.

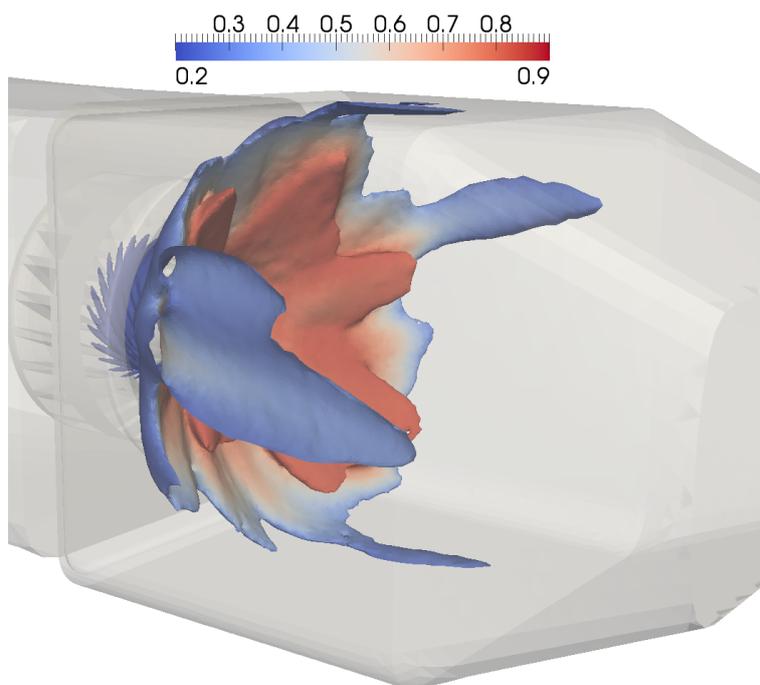


FIG. D.4 | Isosurface de fraction massique moyenne de kérosène $Y_F = 9 \cdot 10^{-3}$, colorée par la température adimensionnée.

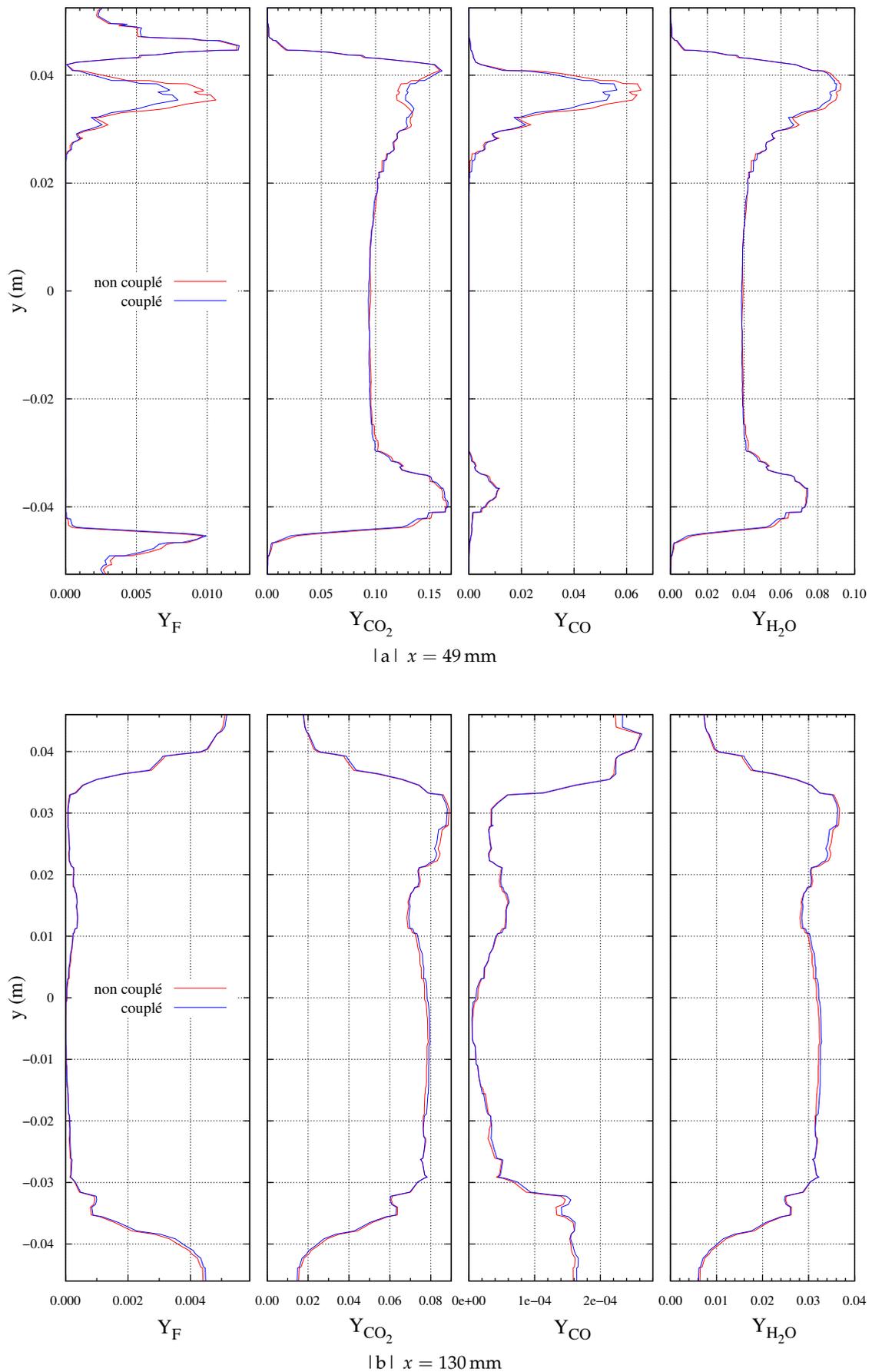


FIG. D.5 | Comparaison des fractions massiques de kérosène, CO_2 , CO et H_2O avec ou sans couplage avec le rayonnement, sur deux profils transversaux.

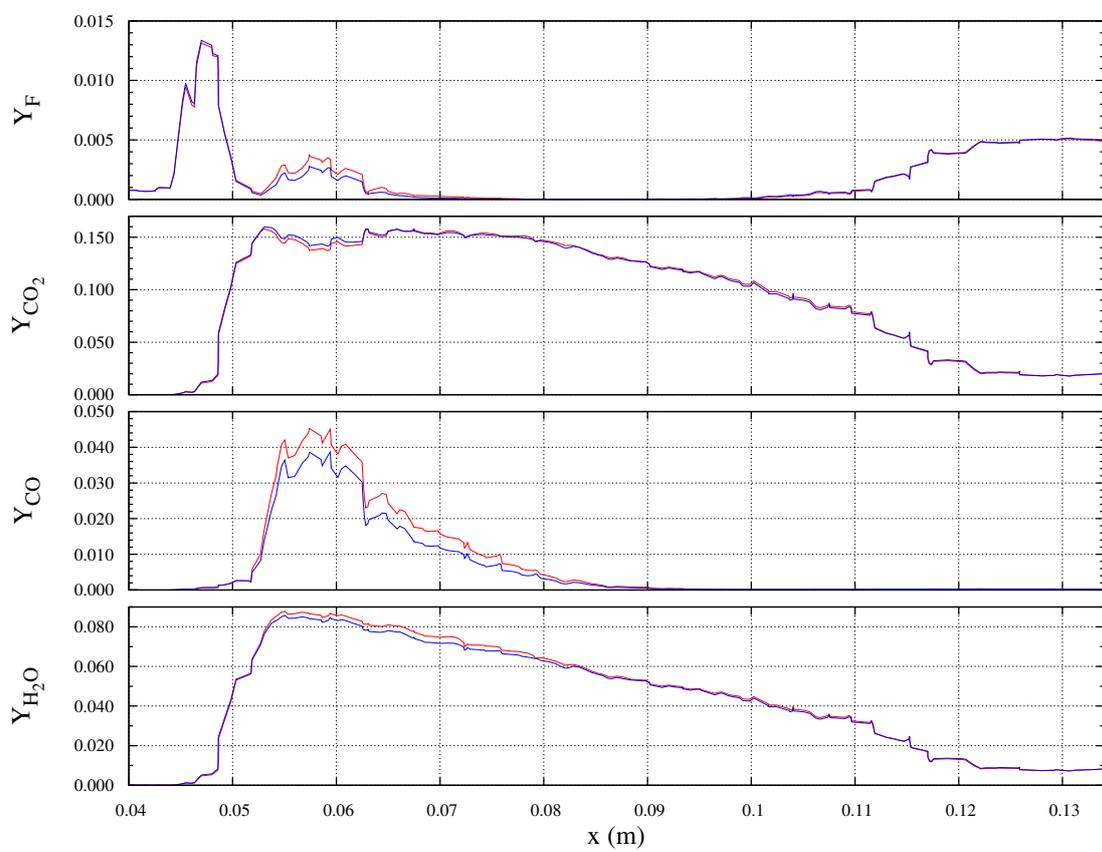


FIG. D.6 | Comparaison des fractions massiques de kérosène, CO₂, CO et H₂O avec ou sans couplage avec le rayonnement, sur le profil $y = 44$ mm.

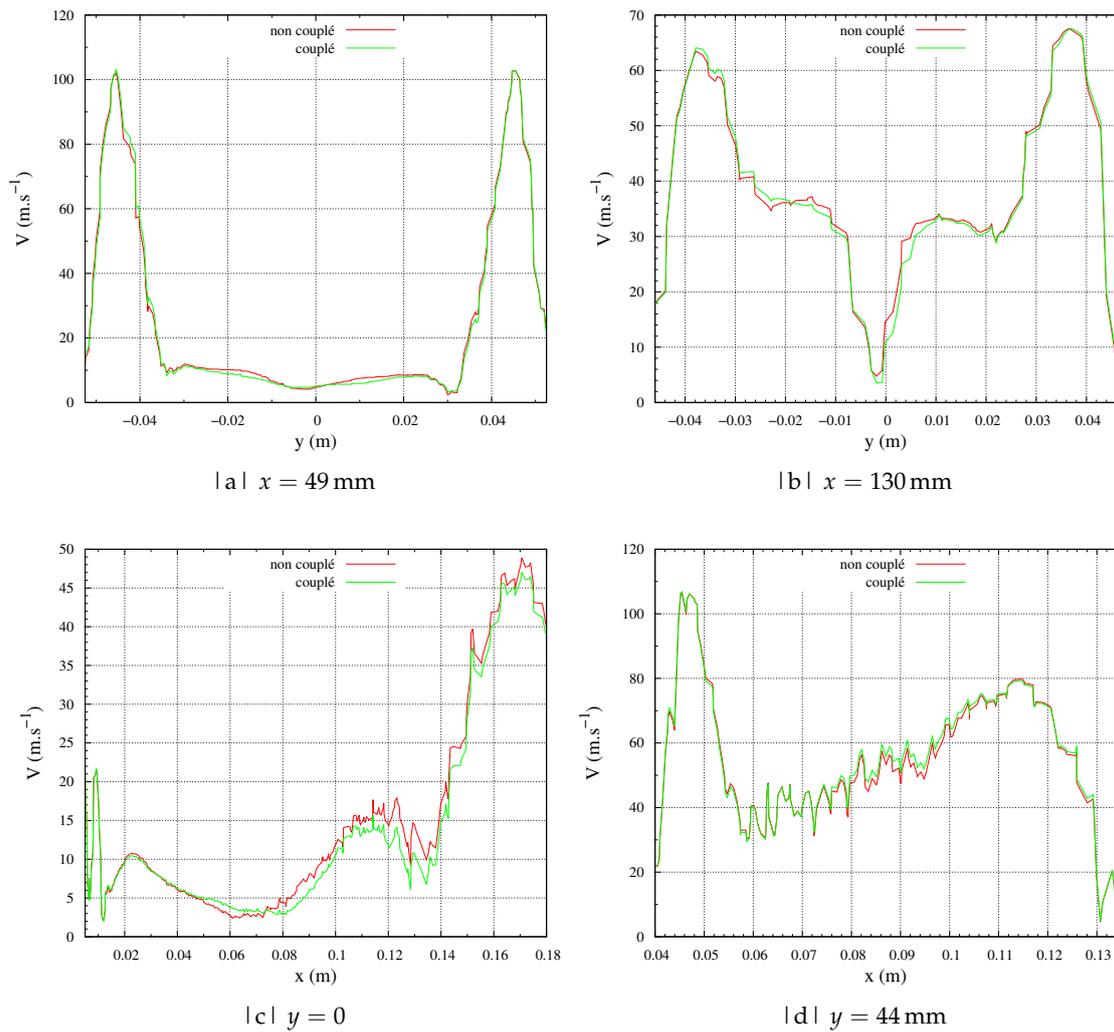


FIG. D.7 | Comparaison de la norme de la vitesse obtenue avec ou sans couplage, sur les 4 profils étudiés.

	calcul non couplé	calcul couplé	écart relatif au calcul non couplé
$\langle Y_{\text{CO}_2} \rangle$	$5,946 \cdot 10^{-2}$	$5,934 \cdot 10^{-2}$	-0,20 %
$\langle Y_{\text{CO}} \rangle$	$1,68 \cdot 10^{-3}$	$1,65 \cdot 10^{-3}$	-1,79 %
$\langle Y_{\text{H}_2\text{O}} \rangle$	$2,559 \cdot 10^{-2}$	$2,551 \cdot 10^{-2}$	-0,31 %

TAB. D.1 | Valeurs des fractions massiques moyennes sur l'ensemble de la chambre, et écart relatif.

Bibliographie

- [1] M. Ihme et H. Pitsch. Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent nonpremixed flames using a flamelet/progress variable formulation. *Physics of Fluids*, **20** (5) : 055110, 2008.
- [2] H. Gotoda, K. Michigami, K. Ikeda et T. Miyano. Chaotic oscillation in diffusion flame induced by radiative heat loss. *Combustion Theory and Modelling*, **14** (4) : 479–493, 2010.
- [3] M. T. Timko, S. C. Herndon, E. C. Wood, T. B. Onasch, M. J. Northway, J. T. Jayne, M. R. Canagaratna, R. C. Miake-Lye et W. B. Knighton. Gas turbine engine emissions—Part I : Volatile organic compounds and nitrogen oxides. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, **132** (6) : 061504, 2010.
- [4] D. Brown, M. Wilson, W. MacNee, V. Stone et K. Donaldson. Size-dependent proinflammatory effects of ultrafine polystyrene particles : A role for surface area and oxidative stress in the enhanced activity of ultrafines. *Toxicology and Applied Pharmacology*, **175** (3) : 191 – 199, 2001.
- [5] M. Di Domenico, P. Gerlinger et M. Aigner. Development and validation of a new soot formation model for gas turbine combustor simulations. *Combustion and Flame*, **157** (2) : 246–258, 2010.
- [6] R. S. Mehta, D. C. Haworth et M. F. Modest. Composition PDF/photon Monte Carlo modeling of moderately sooting turbulent jet flames. *Combustion and Flame*, **157** (5) : 982–994, 2010.
- [7] L. Tessé. *Modélisation des transferts radiatifs dans les flammes turbulentes par une méthode de Monte Carlo*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris, 2001.
- [8] B. Zamuner et F. Dupoirieux. Numerical simulation of soot formation in a turbulent flame with a Monte-Carlo PDF approach and detailed chemistry. *Combustion Science and Technology*, **158** (1) : 407–438, 2000.
- [9] L. Tessé, F. Dupoirieux et J. Taine. Monte Carlo modeling of radiative transfer in a turbulent sooty flame. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **47** (3) : 555–572, 2004.
- [10] P. Moin et S. Apte. Large-eddy simulation of realistic gas turbine combustors. *AIAA Journal*, **44** (4) : 698 – 708, 2006.
- [11] P. Schmitt, T. Poinso, B. Schuermans et K. P. Geigle. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high-pressure burner. *Journal of Fluid Mechanics*, **570** : 17–46, 2007.
- [12] V. Moureau, P. Domingo et L. Vervisch. From Large-Eddy Simulation to Direct Numerical Simulation of a lean premixed swirl flame : Filtered laminar flame-PDF modeling. *Combustion and Flame*, **158** (7) : 1340 – 1357, 2011.
- [13] G. Boudier, L. Y. M. Gicquel, T. Poinso, D. Bissières et C. Bérat. Comparison of LES, RANS and experiments in an aeronautical gas turbine combustion chamber. *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (2) : 3075 – 3082, 2007.

- [14] G. Boudier, L. Y. M. Gicquel et T. J. Poinso. Effects of mesh resolution on large eddy simulation of reacting flows in complex geometry combustors. *Combustion and Flame*, **155** (1-2) : 196 – 214, 2008.
- [15] M. Boileau, G. Staffelbach, B. Cuénot, T. Poinso et C. Bérat. LES of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combustion and Flame*, **154** (1-2) : 2 – 22, 2008.
- [16] P. E. Desjardin et S. H. Frankel. Two-dimensional large eddy simulation of soot formation in the near-field of a strongly radiating nonpremixed acetylene-air turbulent jet flame. *Combustion and Flame*, **119** (1-2) : 121–132, 1999.
- [17] R. Gonçalves dos Santos, M. Lecanu, S. Ducruix, O. Gicquel, E. Iacona et D. Veynante. Coupled large eddy simulations of turbulent combustion and radiative heat transfer. *Combustion and Flame*, **152** (3) : 387–400, 2008.
- [18] D. Poitou, J. Amaya, M. E. Hafi et B. Cuénot. Analysis of the interaction between turbulent combustion and thermal radiation using unsteady coupled LES/DOM simulations. *Combustion and Flame*, **159** (4) : 1605 – 1618, 2012.
- [19] A. J. Chandy, D. J. Glaze et S. H. Frankel. A hybrid large eddy simulation/filtered mass density function for the calculation of strongly radiating turbulent flames. *Journal of Heat Transfer*, **131** (5) : 051201, 2009.
- [20] T. Poinso et D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. Edwards, 2005.
- [21] K. Kuo. *Principles of combustion*. A Wiley-interscience publications. Wiley, 1986.
- [22] S. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [23] M. Lesieur. *Turbulence in fluids*. Fluid mechanics and its applications. Springer, 2008.
- [24] D. Dutoya. Modélisation de la turbulence au voisinage des parois : étude numérique des performances de différents modèles. Rapport Technique RT 48/3473 EY, ONERA, 1992.
- [25] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge monographs on mechanics. Cambridge University Press, 2000.
- [26] J. Savre. *Simulation numérique instationnaire de la combustion turbulente au sein de foyers aéronautiques et prédiction des émissions polluantes*. Thèse de doctorat, INSA de Rouen, 2010.
- [27] R. J. Blint. The relationship of the laminar flame width to flame speed. *Combustion Science and Technology*, **49** (1-2) : 79–92, 1986.
- [28] M. Rullaud. *Modélisation de la combustion turbulente via une méthode de tabulation de la cinétique chimique détaillée couplée à des fonctions densités de probabilité. Application aux foyers aéronautiques*. Thèse de doctorat, INSA de Rouen, 2004.
- [29] P. Dagaut et M. Cathonnet. The ignition, oxidation, and combustion of kerosene : A review of experimental and kinetic modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, **32** (1) : 48 – 92, 2006.
- [30] R. J. Kee, J. F. Grcar, M. Smooke et J. A. Miller. A Fortran Program for Modeling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flame. Rapport technique SAND85-8240, Sandia National Laboratories, 1985.
- [31] G. Albouze. *Simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs non prémélangés*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009.
- [32] J. Warnatz, U. Maas et R. Dibble. *Combustion : physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation*. Springer, 2006.
- [33] C. K. Westbrook et F. L. Dryer. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combustion Science and Technology*, **27** (1-2) : 31–43, 1981.

- [34] E. Fernández-Tarrazo, A. L. Sánchez, A. Liñán et F. A. Williams. A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion. *Combustion and Flame*, **147** (1-2) : 32 – 38, 2006.
- [35] B. Franzelli, E. Riber, M. Sanjosé et T. Poinso. A two-step chemical scheme for kerosene-air premixed flames. *Combustion and Flame*, **157** (7) : 1364–1373, 2010.
- [36] U. Maas et S. B. Pope. Simplifying chemical kinetics : Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combustion and Flame*, **88** (3-4) : 239–264, 1992.
- [37] O. Gicquel, N. Darabiha et D. Thévenin. Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion. *Proceedings of the Combustion Institute*, **28** (2) : 1901–1908, 2000.
- [38] J. A. van Oijen et L. P. H. de Goey. Modelling of premixed counterflow flames using the flamelet-generated manifold method. *Combustion Theory and Modelling*, **6** (3) : 463–478, 2002.
- [39] B. Fiorina, R. Baron, O. Gicquel, D. Thevenin, S. Carpentier et N. Darabiha. Modelling non-adiabatic partially premixed flames using flame-prolongation of ILDM. *Combustion Theory and Modelling*, **7** (3) : 449–470, 2003.
- [40] J. Savre, N. Bertier, Y. D’Angelo et D. Gaffié. A chemical time scale approach for FPI modeling. *Comptes Rendus Mecanique*, **336** (11-12) : 807–812, 2008.
- [41] O. Colin, C. Pera et S. Jay. Detailed chemistry tabulation based on a FPI approach adapted and applied to 3-D internal combustion engine calculations. Dans *Proceedings of the 3rd European Combustion Meeting*, 2007.
- [42] C. F. Curtiss et J. O. Hirschfelder. Transport properties of multicomponent gas mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, **17** (6) : 550–555, 1949.
- [43] D. Veynante et L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, **28** (3) : 193 – 266, 2002.
- [44] R. Borghi et M. Champion. *Modélisation Et Théorie Des Flammes*. Technip, 2000.
- [45] ONERA. Manuel utilisateur de la chaîne CEDRE - 3.2. Document utilisateur, ONERA, 2010.
- [46] N. Bertier. *Simulation des Grandes Echelles en Aérodynamique sur des Maillages Non-Structurés Généraux*. Thèse de doctorat, Université Paris VI, 2006.
- [47] N. Leterrier. *Discrétisation Spatiale en Maillage Non-Structuré de type Général*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie (Paris VI), 2003.
- [48] F. Haider, J.-P. Croisille et B. Courbet. Stability analysis of the cell centered finite-volume MUSCL method on unstructured grids. *Numerische Mathematik*, **113** : 555–600, 2009.
- [49] F. Haider. *Discrétisation en maillage non structuré général et applications LES*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie (Paris VI), 2009.
- [50] B. Sainte-Rose. *Simulations numériques d’écoulements réactifs massivement décollés par une approche hybride RANS/LES*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris, 2010.
- [51] M. F. Modest. *Radiative Heat Transfer*. Academic Press, Burlington, seconde édition, 2003.
- [52] L. Tessé et J.-M. Lamet. Radiative transfer modeling developed at Onera for numerical simulations of reactive flows. *The ONERA Journal, AerospaceLab*, **2**, <http://www.aerospacelab-journal.org>, 2011.
- [53] L. Tessé, F. Dupoirieux, B. Zamuner et J. Taine. Radiative transfer in real gases using reciprocal and forward Monte Carlo methods and a correlated-k approach. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **45** (13) : 2797–2814, 2002.

- [54] F. Dupoirieux, L. Tessé, S. Avila et J. Taine. An optimized reciprocity Monte Carlo method for the calculation of radiative transfer in media of various optical thicknesses. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **49** (7-8) : 1310 – 1319, 2006.
- [55] J. T. Farmer et J. R. Howell. Comparison of Monte Carlo strategies for radiative transfer in participating media. tome 31 de *Advances in Heat Transfer*, p. 333 – 429. Elsevier, 1998.
- [56] J. Taine, E. Iacona et J.-P. Petit. *Transferts Thermiques. Introduction aux transferts d'énergie*. Dunod, Paris, 4 édition, 2008.
- [57] J. Taine et A. Soufiani. Gas IR radiative properties : From spectroscopic data to approximate models. tome 33 de *Advances in Heat Transfer*, p. 295 – 414. Elsevier, 1999.
- [58] L. Pierrot. *Développement, étude critique et validation de modèles, de propriétés radiatives infrarouges de CO₂ et H₂O à haute température. Applications au calcul des transferts dans des chambres aéronautiques et à la télédétection*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris, 1997.
- [59] R. Duval. *Transferts radiatifs dans des chambres de combustion de propulseurs à propergol solide aluminisé*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris, 2002.
- [60] A. Soufiani et J. Taine. High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow-band model for H₂O, CO₂ and CO, and correlated-K model for H₂O and CO₂. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **40** (4) : 987 – 991, 1997.
- [61] B. S. Haynes et H. G. Wagner. Soot formation. *Progress in Energy and Combustion Science*, **7** (4) : 229–273, 1981.
- [62] I. M. Kennedy. Models of soot formation and oxidation. *Progress in Energy and Combustion Science*, **23** (2) : 95–132, 1997.
- [63] R. S. Mehta. *Detailed Modeling of Soot Formation and Turbulence-Radiation Interactions in Turbulent Jet Flames*. Thèse de doctorat, The Pennsylvania State University, 2008.
- [64] R. N. Kleiveland. *Modelling of Soot Formation and Oxidation in Turbulent Diffusion Flames*. Thèse de doctorat, Norwegian University of Science and Technology, 2005.
- [65] M. Frenklach et H. Wang. Detailed mechanism and modeling of soot particle formation. Dans H. Bockhorn (Rédacteur), *Soot Formation in Combustion : Mechanisms and Models*, p. 165–192. Springer-Verlag, New-York, 1994.
- [66] M. Frenklach. On the driving force of pah production. *Symposium (International) on Combustion*, **22** (1) : 1075 – 1082, 1989.
- [67] B. Zhao, Z. Yang, Z. Li, M. V. Johnston et H. Wang. Particle size distribution function of incipient soot in laminar premixed ethylene flames : effect of flame temperature. *Proceedings of the Combustion Institute*, **30** (1) : 1441–1448, 2005.
- [68] M. Commodo, S. Violi, A. D'Anna, A. D'Alessio, C. Allouis, F. Beretta et P. Minutolo. Soot and nanoparticle formation in laminar and turbulent flames. *Combustion Science and Technology*, **179** (1) : 387–400, 2007.
- [69] A. D. Filippo, L. A. Sgro, G. Lanzuolo et A. D'Alessio. Probe measurements and numerical model predictions of evolving size distributions in premixed flames. *Combustion and Flame*, **156** (9) : 1744–1754, 2009.
- [70] L. A. Sgro, A. D. Filippo, G. Lanzuolo et A. D'Alessio. Characterization of nanoparticles of organic carbon (NOC) produced in rich premixed flames by differential mobility analysis. *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (1) : 631–638, 2007.
- [71] H. Wang, D. X. Du, C. J. Sung et C. K. Law. Experiments and numerical simulation on soot formation in opposed-jet ethylene diffusion flames. *Symposium (International) on Combustion*, **26** (2) : 2359–2368, 1996.

- [72] F. Xu, P. B. Sunderland et G. M. Faeth. Soot formation in laminar premixed ethylene/air flames at atmospheric pressure. *Combustion and Flame*, **108** (4) : 471–493, 1997.
- [73] R. A. Dobbins, G. J. Govatzidakis, W. Lu, A. F. Schwartzman et R. A. Fletcher. Carbonization rate of soot precursor particles. *Combustion Science and Technology*, **121** (1) : 103–121, 1996.
- [74] F. Liu, K. A. Thomson, H. Guo et G. J. Smallwood. Numerical and experimental study of an axisymmetric coflow laminar methane-air diffusion flame at pressures between 5 and 40 atmospheres. *Combustion and Flame*, **146** (3) : 456–471, 2006.
- [75] M. Frenklach et H. Wang. Detailed modeling of soot particle nucleation and growth. *Symposium (International) on Combustion*, **23** (1) : 1559 – 1566, 1991.
- [76] A. D'Alessio, A. D'Anna, P. Minutolo, L. A. Sgro et A. Violi. On the relevance of surface growth in soot formation in premixed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, **28** (2) : 2547–2554, 2000.
- [77] C. W. Lautenberger, J. L. de Ris, N. A. Dembsey, J. R. Barnett et H. R. Baum. A simplified model for soot formation and oxidation in CFD simulation of non-premixed hydrocarbon flames. *Fire Safety Journal*, **40** (2) : 141–176, 2005.
- [78] J. Y. Hwang et S. H. Chung. Growth of soot particles in counterflow diffusion flames of ethylene. *Combustion and Flame*, **125** (1-2) : 752–762, 2001.
- [79] S. A. Zelepouga, A. V. Saveliev, L. A. Kennedy et A. A. Fridman. Relative effect of acetylene and PAHs addition on soot formation in laminar diffusion flames of methane with oxygen and oxygen-enriched air. *Combustion and Flame*, **122** (1-2) : 76–89, 2000.
- [80] F. Xu, A. M. El-Leathy, C. H. Kim et G. M. Faeth. Soot surface oxidation in hydrocarbon/air diffusion flames at atmospheric pressure. *Combustion and Flame*, **132** (1-2) : 43–57, 2003.
- [81] C. A. Echavarria, I. C. Jaramillo, A. F. Sarofim et J. S. Lighty. Studies of soot oxidation and fragmentation in a two-stage burner under fuel-lean and fuel-rich conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*, **33** (1) : 659 – 666, 2011.
- [82] K. G. Neoh, J. B. Howard et A. F. Sarofim. Effect of oxidation on the physical structure of soot. *Symposium (International) on Combustion*, **20** (1) : 951–957, 1985.
- [83] B. Zhao, K. Uchikawa et H. Wang. A comparative study of nanoparticles in premixed flames by scanning mobility particle sizer, small angle neutron scattering, and transmission electron microscopy. *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (1) : 851 – 860, 2007.
- [84] A. D. Abid, N. Heinz, E. D. Tolmachoff, D. J. Phares, C. S. Campbell et H. Wang. On evolution of particle size distribution functions of incipient soot in premixed ethylene-oxygen-argon flames. *Combustion and Flame*, **154** (4) : 775–788, 2008.
- [85] A. D. Abid, E. D. Tolmachoff, D. J. Phares, H. Wang, Y. Liu et A. Laskin. Size distribution and morphology of nascent soot in premixed ethylene flames with and without benzene doping. *Proceedings of the Combustion Institute*, **32** (1) : 681–688, 2009.
- [86] J. P. Cain, J. Camacho, D. J. Phares, H. Wang et A. Laskin. Evidence of aliphatics in nascent soot particles in premixed ethylene flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, **33** (1) : 533 – 540, 2011.
- [87] K. Tian, K. A. Thomson, F. Liu, D. R. Snelling, G. J. Smallwood et D. Wang. Determination of the morphology of soot aggregates using the relative optical density method for the analysis of TEM images. *Combustion and Flame*, **144** (4) : 782–791, 2006.
- [88] B. Hu, B. Yang et U. O. Koylu. Soot measurements at the axis of an ethylene/air non-premixed turbulent jet flame. *Combustion and Flame*, **134** (1-2) : 93–106, 2003.

- [89] Q. Zhang, M. J. Thomson, H. Guo, F. Liu et G. J. Smallwood. A numerical study of soot aggregate formation in a laminar coflow diffusion flame. *Combustion and Flame*, **156** (3) : 697–705, 2009.
- [90] S. H. Park, S. N. Rogak, W. K. Bushe, J. Z. Wen et M. J. Thomson. An aerosol model to predict size and structure of soot particles. *Combustion Theory and Modelling*, **9** (3) : 499–513, 2005.
- [91] M. Kraft. Modelling of particulate processes. *KONA Powder and Particle Journal*, **23** : 18–35, 2005.
- [92] I. M. Kennedy, W. Kollmann et J.-Y. Chen. A model for soot formation in a laminar diffusion flame. *Combustion and Flame*, **81** (1) : 73–85, 1990.
- [93] J. B. Moss. Modelling soot formation for turbulent flame prediction. Dans H. Bockhorn (Rédacteur), *Soot Formation in Combustion : Mechanisms and Models*, p. 551–568. Springer-Verlag, New-York, 1994.
- [94] J. B. Moss, C. D. Stewart et K. J. Syed. Flowfield modelling of soot formation at elevated pressure. *Proceedings of the Combustion Institute*, **22** (1) : 413–423, 1989.
- [95] S. V. Zhubrin. Discrete reaction model for composition of sooting flames. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **52** (17-18) : 4125–4133, 2009.
- [96] R. Said, A. Garo et R. Borghi. Soot formation modeling for turbulent flames. *Combustion and Flame*, **108** (1-2) : 71–86, 1997.
- [97] R. Borghi. Turbulent combustion modelling. *Progress in Energy and Combustion Science*, **14** (4) : 245–292, 1988.
- [98] P. A. Tesner, T. D. Smegiriova et V. G. Knorre. Kinetics of dispersed carbon formation. *Combustion and Flame*, **17** (2) : 253–260, 1971.
- [99] P. A. Tesner, E. I. Tsygankova, L. P. Guilazetdinov, V. P. Zuyev et G. V. Loshakova. The formation of soot from aromatic hydrocarbons in diffusion flames of hydrocarbon-hydrogen mixtures. *Combustion and Flame*, **17** (3) : 279–285, 1971.
- [100] B. F. Magnussen et B. H. Hjertager. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Symposium (International) on Combustion*, **16** (1) : 719–729, 1977.
- [101] B. F. Magnussen. Modeling of pollutant formation in gas turbine combustors based on the eddy dissipation concept. Dans *18th International Congress on Combustion Engines, Tianjin, China*, 1989.
- [102] N. I. Lilleheie, J. Holen et B. F. Magnussen. Multi-species version of Kameleon-FireEx with emphasis on combustion and soot modeling. Rapport Technique, SINTEF Energy, 1997.
- [103] F. Lopez-Parra et A. Turan. Computational study on the effects of non-periodic flow perturbations on the emissions of soot and NO_x in a confined turbulent methane/air diffusion flame. *Combustion Science and Technology*, **179** (7) : 1361–1384, 2007.
- [104] J. B. Moss, C. D. Stewart et K. J. Young. Modeling soot formation and burnout in a high temperature laminar diffusion flame burning under oxygen-enriched conditions. *Combustion and Flame*, **101** (4) : 491–500, 1995.
- [105] S. J. Brookes et J. B. Moss. Predictions of soot and thermal radiation properties in confined turbulent jet diffusion flames. *Combustion and Flame*, **116** (4) : 486–503, 1999.
- [106] K. J. Syed, C. D. Stewart et J. B. Moss. Modelling soot formation and thermal radiation in buoyant turbulent diffusion flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, **23** (1) : 1533–1541, 1991.

- [107] K. M. Leung, R. P. Lindstedt et W. P. Jones. A simplified reaction mechanism for soot formation in nonpremixed flames. *Combustion and Flame*, **87** (3-4) : 289–305, 1991.
- [108] P. R. Lindstedt. Simplified soot nucleation and surface growth steps for non-premixed flames. Dans H. Bockhorn (Rédacteur), *Soot Formation in Combustion : Mechanisms and Models*, p. 417–441. Springer-Verlag, New-York, 1994.
- [109] R. P. Lindstedt et S. A. Louloudi. Joint-scalar transported PDF modeling of soot formation and oxidation. *Proceedings of the Combustion Institute*, **30** (1) : 775–783, 2005.
- [110] H. Wang et M. Frenklach. A detailed kinetic modeling study of aromatics formation in laminar premixed acetylene and ethylene flames. *Combustion and Flame*, **110** (1-2) : 173–221, 1997.
- [111] J. Appel, H. Bockhorn et M. Frenklach. Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics : laminar premixed flames of C2 hydrocarbons. *Combustion and Flame*, **121** (1-2) : 122–136, 2000.
- [112] A. D’Anna, J. H. Kent et R. J. Santoro. Investigation of species concentration and soot formation in a co-flowing diffusion flame of ethylene. *Combustion Science and Technology*, **179** (1) : 355–369, 2007.
- [113] M. von Smoluchowski. Versuch einer mathematischen theorie der koagulationskinetik kolloider Lösungen. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, **92** : 129 – 168, 1917.
- [114] R. S. Mehta, D. C. Haworth et M. F. Modest. An assessment of gas-phase reaction mechanisms and soot models for laminar atmospheric-pressure ethylene-air flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, **32** (1) : 1327–1334, 2009.
- [115] F. Mauss, K. Netzell et H. Lehtiniemi. Aspects of modeling soot formation in turbulent diffusion flames. *Combustion Science and Technology*, **178** (10) : 1871–1885, 2006.
- [116] H. Pitsch, E. Riesmeier et N. Peters. Unsteady flamelet modeling of soot formation in turbulent diffusion flames. *Combustion Science and Technology*, **158** (1) : 389–406, 2000.
- [117] D. O. Lignell, J. C. Hewson et J. H. Chen. A-priori analysis of conditional moment closure modeling of a temporal ethylene jet flame with soot formation using direct numerical simulation. *Proceedings of the Combustion Institute*, **32** (1) : 1491–1498, 2009.
- [118] D. O. Lignell, J. H. Chen et P. J. Smith. Three-dimensional direct numerical simulation of soot formation and transport in a temporally evolving nonpremixed ethylene jet flame. *Combustion and Flame*, **155** (1-2) : 316–333, 2008.
- [119] H. El-Asrag et S. Menon. Large eddy simulation of soot formation in a turbulent non-premixed jet flame. *Combustion and Flame*, **156** (2) : 385–395, 2009.
- [120] J. Z. Wen, M. Thomson, S. Park, S. Rogak et M. Lightstone. Study of soot growth in a plug flow reactor using a moving sectional model. *Proceedings of the Combustion Institute*, **30** (1) : 1477 – 1484, 2005.
- [121] K. Netzell, H. Lehtiniemi et F. Mauss. Calculating the soot particle size distribution function in turbulent diffusion flames using a sectional method. *Proceedings of the Combustion Institute*, **31** (1) : 667 – 674, 2007.
- [122] S. H. Park et S. N. Rogak. A novel fixed-sectional model for the formation and growth of aerosol agglomerates. *Journal of Aerosol Science*, **35** (11) : 1385 – 1404, 2004.
- [123] S. Tsantilis, H. K. Kammler et S. E. Pratsinis. Population balance modeling of flame synthesis of titania nanoparticles. *Chemical Engineering Science*, **57** (12) : 2139 – 2156, 2002.
- [124] A. D’Anna. Combustion-formed nanoparticles. *Proceedings of the Combustion Institute*, **32** (1) : 593–613, 2009.

- [125] B. Yang, B. Hu et U. O. Koylu. Mean soot volume fractions in turbulent hydrocarbon flames : a comparison of sampling and laser measurements. *Combustion Science and Technology*, **177** (8) : 1603–1626, 2005.
- [126] B. Yang et U. O. Koylu. Detailed soot field in a turbulent non-premixed ethylene/air flame from laser scattering and extinction experiments. *Combustion and Flame*, **141** (1-2) : 55–65, 2005.
- [127] B. Yang et U. O. Koylu. Soot processes in a strongly radiating turbulent flame from laser scattering/extinction experiments. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **93** (1-3) : 289–299, 2005.
- [128] A. Coppalle et D. Joyeux. Temperature and soot volume fraction in turbulent diffusion flames : Measurements of mean and fluctuating values. *Combustion and Flame*, **96** (3) : 275–285, 1994.
- [129] M. F. Modest. Chapter 11 - Radiative properties of particulate media. Dans *Radiative Heat Transfer*, p. 361–412. Academic Press, Burlington, seconde édition, 2003.
- [130] T. Joutsenoja, A. D’Anna, A. D’Alessio et M. I. Nazzaro. Ultraviolet absorption spectra of carbon dioxide and oxygen at elevated temperatures. *Applied Spectroscopy*, **55** (2) : 130–135, 2001.
- [131] R. J. Jensen, R. D. Guettler et J. L. Lyman. The ultraviolet absorption spectrum of hot carbon dioxide. *Chemical Physics Letters*, **277** (4) : 356 – 360, 1997.
- [132] A. D’Alessio, A. D’Anna, A. D’Orsi, P. Minutolo, R. Barbella et A. Ciajolo. Precursor formation and soot inception in premixed ethylene flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, **24** (1) : 973 – 980, 1992.
- [133] B. Zhao, Z. Yang, J. Wang, M. V. Johnston et H. Wang. Analysis of soot nanoparticles in a laminar premixed ethylene flame by scanning mobility particle sizer. *Aerosol Science and Technology*, **37** (8) : 611–620, 2003.
- [134] B. Zhao, Z. Yang, M. V. Johnston, H. Wang, A. S. Wexler, M. Balthasar et M. Kraft. Measurement and numerical simulation of soot particle size distribution functions in a laminar premixed ethylene-oxygen-argon flame. *Combustion and Flame*, **133** (1-2) : 173–188, 2003.
- [135] A. D. Abid, J. Camacho, D. A. Sheen et H. Wang. Quantitative measurement of soot particle size distribution in premixed flames - the burner-stabilized stagnation flame approach. *Combustion and Flame*, **156** (10) : 1862–1870, 2009.
- [136] R. J. Santoro, H. G. Semerjian et R. A. Dobbins. Soot particle measurements in diffusion flames. *Combustion and Flame*, **51** : 203–218, 1983.
- [137] C. S. McEnally, A. M. Schaffer, M. B. Long, L. D. Pfefferle, M. D. Smooke, M. B. Colket et R. J. Hall. Computational and experimental study of soot formation in a coflow, laminar ethylene diffusion flame. *Symposium (International) on Combustion*, **27** (1) : 1497–1505, 1998.
- [138] D. R. Snelling, K. A. Thomson, G. J. Smallwood et Ömer L. Gülder. Two-dimensional imaging of soot volume fraction in laminar diffusion flames. *Appl. Opt.*, **38** (12) : 2478–2485, 1999.
- [139] C. H. Kim, F. Xu et G. M. Faeth. Soot surface growth and oxidation at pressures up to 8.0 atm in laminar nonpremixed and partially premixed flames. *Combustion and Flame*, **152** (3) : 301–316, 2008.
- [140] C. P. Arana, M. Pontoni, S. Sen et I. K. Puri. Field measurements of soot volume fractions in laminar partially premixed coflow ethylene/air flames. *Combustion and Flame*, **138** (4) : 362–372, 2004.

- [141] C. S. McEnally et L. D. Pfefferle. Experimental study of nonfuel hydrocarbons and soot in coflowing partially premixed ethylene/air flames. *Combustion and Flame*, **121** (4) : 575–592, 2000.
- [142] S. J. Brookes et J. B. Moss. Measurements of soot production and thermal radiation from confined turbulent jet diffusion flames of methane. *Combustion and Flame*, **116** (1-2) : 49–61, 1999.
- [143] M. D. Smooke, R. J. Hall, M. B. Colket, J. Fielding, M. B. Long, C. S. McEnally et L. D. Pfefferle. Investigation of the transition from lightly sooting towards heavily sooting co-flow ethylene diffusion flames. *Combustion Theory and Modelling*, **8** (3) : 593–606, 2004.
- [144] B. Öktem, M. P. Tolocka, B. Zhao, H. Wang et M. V. Johnston. Chemical species associated with the early stage of soot growth in a laminar premixed ethylene-oxygen-argon flame. *Combustion and Flame*, **142** (4) : 364–373, 2005.
- [145] Q. Zhang, H. Guo, F. Liu, G. J. Smallwood et M. J. Thomson. Implementation of an advanced fixed sectional aerosol dynamics model with soot aggregate formation in a laminar methane/air coflow diffusion flame. *Combustion Theory and Modelling*, **12** (4) : 621–641, 2008.
- [146] M. Fairweather, W. P. Jones et R. P. Lindstedt. Predictions of radiative transfer from a turbulent reacting jet in a cross-wind. *Combustion and Flame*, **89** (1) : 45–63, 1992.
- [147] M. D. Smooke, C. S. McEnally, L. D. Pfefferle, R. J. Hall et M. B. Colket. Computational and experimental study of soot formation in a coflow, laminar diffusion flame. *Combustion and Flame*, **117** (1-2) : 117–139, 1999.
- [148] Q. Zhang, H. Guo, F. Liu, G. J. Smallwood et M. J. Thomson. Modeling of soot aggregate formation and size distribution in a laminar ethylene/air coflow diffusion flame with detailed PAH chemistry and an advanced sectional aerosol dynamics model. *Proceedings of the Combustion Institute*, **32** (1) : 761–768, 2009.
- [149] R. J. Santoro, T. T. Yeh, J. J. Horvath et H. G. Semerjian. The transport and growth of soot particles in laminar diffusion flames. *Combustion Science and Technology*, **53** (2) : 89–115, 1987.
- [150] S. S. Iyer, T. A. Litzinger, S.-Y. Lee et R. J. Santoro. Determination of soot scattering coefficient from extinction and three-angle scattering in a laminar diffusion flame. *Combustion and Flame*, **149** (1-2) : 206–216, 2007.
- [151] R. Puri, T. F. Richardson, R. J. Santoro et R. A. Dobbins. Aerosol dynamic processes of soot aggregates in a laminar ethene diffusion flame. *Combustion and Flame*, **92** (3) : 320–333, 1993.
- [152] Yunardi, R. M. Woolley et M. Fairweather. Conditional moment closure prediction of soot formation in turbulent, nonpremixed ethylene flames. *Combustion and Flame*, **152** (3) : 360–376, 2008.
- [153] J. H. Kent et D. Honnery. Soot and mixture fraction in turbulent diffusion flames. *Combustion Science and Technology*, **54** (1) : 383–398, 1987.
- [154] K. J. Young, C. D. Stewart, K. J. Syed et J. B. Moss. Soot formation in confined turbulent flames fuelled by pre-vaporised kerosene and by ethylene. Dans *Proceedings of The 10th ISABE Meeting, AIAA, Nottingham*, p. 239–248, 1991.
- [155] Z. Qin, V. V. Lissianski, H. Yang, W. C. Gardiner, S. G. Davis et H. Wang. Combustion chemistry of propane : A case study of detailed reaction mechanism optimization. *Proceedings of the Combustion Institute*, **28** (2) : 1663–1669, 2000.

- [156] G. Ma, J. Z. Wen, M. F. Lightstone et M. J. Thomson. Optimization of soot modeling in turbulent nonpremixed ethylene/air jet flames. *Combustion Science and Technology*, **177** (8) : 1567–1602, 2005.
- [157] A. Kronenburg, R. W. Bilger et J. H. Kent. Modeling soot formation in turbulent methane-air jet diffusion flames. *Combustion and Flame*, **121** (1-2) : 24–40, 2000.
- [158] O. V. Roditcheva et X. S. Bai. Pressure effect on soot formation in turbulent diffusion flames. *Chemosphere*, **42** (5-7) : 811–821, 2001.
- [159] H. El-Asrag et S. Menon. Large eddy simulation of soot formation in a turbulent nonpremixed jet flame. *Combustion and Flame*, **156** (2) : 385–395, 2009.
- [160] D. O. Lignell, J. H. Chen, P. J. Smith, T. Lu et C. K. Law. The effect of flame structure on soot formation and transport in turbulent nonpremixed flames using direct numerical simulation. *Combustion and Flame*, **151** (1-2) : 2–28, 2007.
- [161] International Civil Aviation Organization. *Convention on International Civil Aviation*, chapitre Annex 16 – International Standards and Recommended Practices – Environmental Protection. seconde édition, 1993.
- [162] F. Grisch et M. Orain. TLC deliverable report d2.3.1.2 - third onera campaign report. Rapport technique, ONERA, 2010.
- [163] M. Orain, F. Grisch, E. Jourdanneau, B. Rossow, C. Guin et B. Trétout. Simultaneous measurements of equivalence ratio and flame structure in multipoint injectors using plif. *Comptes Rendus Mécanique*, **337** (6-7) : 373 – 384, 2009.
- [164] K. P. Geigle et C. Guin. TLC deliverable report d2.3.1.1b - first campaign report (particulates, lii). Rapport technique, ONERA, 2008.
- [165] J. Lavedrine. *Simulations aux grandes échelles de l'écoulement diphasique dans des modèles d'injecteur de moteurs aéronautiques*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2008.
- [166] R. Lecourt, F. X. d'Herbigny et F. Bismes. TLC deliverable report d2.2.1a - injection system characterisation at 1 bar on test benches CAPITOL and TOULOUSE. Rapport technique, ONERA, 2007.
- [167] R. Lecourt et F. Bismes. TLC deliverable report d2.2.1b - injection system characterisation at 0.5 and 5 bar. Rapport technique, ONERA, 2007.
- [168] R. Lecourt. TLC deliverable report d2.2.1c - injection system characterisation at 30 bar. Rapport technique, ONERA, 2007.
- [169] F. Jaegle. *Large eddy simulation of evaporating sprays in complex geometries using Eulerian and Lagrangian methods*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009.
- [170] F. P. Incropera, D. P. DeWitt, T. L. Bergman et A. S. Lavine. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. Wiley, 6 édition, 2006.
- [171] A. H. Lefebvre. *Atomization and sprays*. Hemisphere Pub. Corp., 1989.
- [172] O. Desjardins, V. Moureau et H. Pitsch. An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization. *Journal of Computational Physics*, **227** (18) : 8395 – 8416, 2008.
- [173] M. Sanjosé. *Évaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation aux grandes échelles des chambres à carburant liquide*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009.

- [174] J.-M. Senoner. *Simulation aux Grandes Échelles de l'écoulement diphasique dans un brûleur aéronautique par une approche Euler-Lagrange*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2010.
- [175] D. Poitou. *Modélisation du rayonnement dans la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente*. Thèse de doctorat, Université de Toulouse, 2009.
- [176] N. Bertier et L.-H. Dorey. Mécanisme réactionnel avec PEA pour la combustion du kérosène dans l'air. Rapport Technique RT 3/17454 DEFA, ONERA, 2010.
- [177] S. Blakey, L. Rye et C. W. Wilson. Aviation gas turbine alternative fuels : A review. *Proceedings of the Combustion Institute*, **33** (2) : 2863 – 2885, 2011.
- [178] J. Luche. *Obtention de modèles cinétiques réduits de combustion : application à un mécanisme du kérosène*. Thèse de doctorat, Université d'Orléans, 2003.
- [179] S. Pascaud. *Vers la simulation aux grandes échelles des écoulements turbulents diphasiques réactifs : application aux foyers aéronautiques*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2006.
- [180] O. Lucca-Negro et T. O'Doherty. Vortex breakdown : a review. *Progress in Energy and Combustion Science*, **27** (4) : 431 – 481, 2001.
- [181] A. Lefebvre et D. Ballal. *Gas Turbine Combustion : Alternative Fuels and Emissions*. Taylor and Francis, 3 édition, 2010.
- [182] C. Fenimore. Formation of nitric oxide in premixed hydrocarbon flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, **13** (1) : 373 – 380, 1971.
- [183] M. Orain, E. Jourdanneau et F. Grisch. TLC deliverable report d2.3.1.1a - first campaign report (oh). Rapport technique, ONERA, 2008.
- [184] M. Orain et F. Grisch. TLC deliverable report d2.3.1.1c. Rapport technique, ONERA, 2008.
- [185] M. Fairweather, W. P. Jones, H. S. Ledin et R. P. Lindstedt. Predictions of soot formation in turbulent, non-premixed propane flames. *Symposium (International) on Combustion*, **24** (1) : 1067–1074, 1992.
- [186] N. E. Endrud. *Soot, radiation and pollutant emissions in oxygen-enhanced turbulent jet flames*. Thèse de master, The Pennsylvania State University, 2000.
- [187] R. Gonçalves dos Santos. *Large Eddy Simulations of turbulent combustion including radiative heat transfer*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris, 2008.
- [188] J. Zhang, O. Gicquel, D. Veynante et J. Taine. Monte Carlo method of radiative transfer applied to a turbulent flame modeling with LES. *Comptes Rendus Mécanique*, **337** (6-7) : 539–549, 2009.
- [189] D. Poitou, M. El Hafi et B. Cuénot. Analysis of radiation modeling for turbulent combustion : Development of a methodology to couple turbulent combustion and radiative heat transfer in LES. *Journal of Heat Transfer*, **133** (6) : 062701–1 – 10, 2011.
- [190] M. Roger, C. B. D. Silva et P. J. Coelho. Analysis of the turbulence-radiation interactions for large eddy simulations of turbulent flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **52** (9-10) : 2243 – 2254, 2009.
- [191] P. Coelho. Approximate solutions of the filtered radiative transfer equation in large eddy simulations of turbulent reactive flows. *Combustion and Flame*, **156** (5) : 1099 – 1110, 2009.
- [192] I. Hernández Vera. *Soot modeling in flames and Large-Eddy Simulations of thermo-acoustic instabilities*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2011.

- [193] D. Joseph, P. Perez, M. El Hafi et B. Cuénot. Discrete ordinates and monte carlo methods for radiative transfer simulation applied to computational fluid dynamics combustion modeling. *Journal of Heat Transfer*, **131** (5) : 052701, 2009.
- [194] A. Collin, P. Boulet, G. Parent et D. Lacroix. Numerical simulation of a water spray — Radiation attenuation related to spray dynamics. *International Journal of Thermal Sciences*, **46** (9) : 856 – 868, 2007.
- [195] A. Collin, P. Boulet, G. Parent, M. Vetrano et J. Buchlin. Dynamics and thermal behaviour of water sprays. *International Journal of Thermal Sciences*, **47** (4) : 399 – 407, 2008.
- [196] J.-D. Garaud. *Développement de méthodes de couplage aéro-thermo-mécanique pour la prédiction d'instabilités dans les structures aérospatiales chaudes*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, 2008.
- [197] L.-H. Dorey, L. Tessé, A. Roos et F. Feyel. Simulation numérique des transferts couplés conduction-rayonnement au cours des procédés de formage du verre. Dans *Actes du congrès de la Société Française de Thermique*, 2009, http://www.sft.asso.fr/Local/sft/dir/user-3775/documents/actes/congres_2009/Communications/252.pdf.
- [198] B. Leckner. Spectral and total emissivity of water vapor and carbon dioxide. *Combustion and Flame*, **19** (1) : 33 – 48, 1972.
- [199] M. F. Modest. Chapter 10 - Radiative properties of molecular gases. Dans *Radiative Heat Transfer*, p. 288 – 360. Academic Press, Burlington, seconde édition, 2003.
- [200] A. Gaydon et H. Wolfhard. *Flames, their structure, radiation and temperature*, p. 214. Chapman & Hall, 1960.
- [201] J. Gore et N. Zhan. NO_x emission and major species concentrations in partially premixed laminar methane/air co-flow jet flames. *Combustion and Flame*, **105** (3) : 414 – 427, 1996.
- [202] R. Duval, A. Soufiani et J. Taine. Coupled radiation and turbulent multiphase flow in an aluminised solid propellant rocket engine. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **84** (4) : 513 – 526, 2004. Eurotherm Seminar 73 - Computational Thermal Radiation in Participating Media.
- [203] M.-Y. Perrin, P. Rivière et A. Soufiani. Radiation Database for Earth and Mars Entry. Dans *RTO-EN-AVT-162 Non-Equilibrium Gas Dynamics - From Physical Models to Hypersonic Flights*, VKI Lecture Series, von Karman Institute for Fluid Dynamics, p. 8.1,8.40. NATO Research and Technology Organisation, 2009.
- [204] F. Dittus et L. Boelter. Heat transfer in automobile radiators of tubular type. *Univ. of Calif. Pub. Eng.*, **2** : 443 – 461, 1930.
- [205] L.-H. Dorey, N. Bertier, L. Tessé et F. Dupoirieux. Soot and radiation modeling in laminar ethylene flames with tabulated detailed chemistry. *Comptes Rendus Mécanique*, **339** (12) : 756 – 769, 2011.
- [206] H. Wang, B. Zhao, B. Wyslouzil et K. Streletzky. Small-angle neutron scattering of soot formed in laminar premixed ethylene flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, **29** (2) : 2749–2757, 2002.
- [207] A. G. Yazicioglu, C. M. Megaridis, A. Campbell, K.-O. Lee et M. Y. Choi. Measurement of fractal properties of soot agglomerates in laminar coflow diffusion flames using thermophoretic sampling in conjunction with transmission electron microscopy and image processing. *Combustion Science and Technology*, **171** (1) : 71–87, 2001.
- [208] K.-O. Lee, C. M. Megaridis, S. Zelepouga, A. V. Saveliev, L. A. Kennedy, O. Charon et F. Ammouri. Soot formation effects of oxygen concentration in the oxidizer stream of laminar coannular nonpremixed methane/air flames. *Combustion and Flame*, **121** (1-2) : 323–333, 2000.

- [209] M. D. Smooke, M. B. Long, B. C. Connelly, M. B. Colket et R. J. Hall. Soot formation in laminar diffusion flames. *Combustion and Flame*, **143** (4) : 613–628, 2005.
- [210] K. Tian, F. Liu, K. A. Thomson, D. R. Snelling, G. J. Smallwood et D. Wang. Distribution of the number of primary particles of soot aggregates in a nonpremixed laminar flame. *Combustion and Flame*, **138** (1-2) : 195–198, 2004.
- [211] K. A. Thomson, Ömer L. Gülder, E. J. Weckman, R. A. Fraser, G. J. Smallwood et D. R. Snelling. Soot concentration and temperature measurements in co-annular, nonpremixed CH₄/air laminar flames at pressures up to 4 MPa. *Combustion and Flame*, **140** (3) : 222–232, 2005.
- [212] I. Ayrancı, R. Vaillon, N. Selçuk, F. André et D. Escudié. Determination of soot temperature, volume fraction and refractive index from flame emission spectrometry. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **104** (2) : 266 – 276, 2007.
- [213] D. R. Snelling, R. A. Fraser, Ö. L. Gülder, G. J. Smallwood, K. A. Thomson et E. J. Weckman. Spectrally Resolved Measurement of Flame Radiation to Determine Soot Temperature and Concentration. *AIAA Journal*, **40** : 1789–1795, 2002.
- [214] A. D’Anna, M. Commodo, M. Sirignano, P. Minutolo et R. Pagliara. Particle formation in opposed-flow diffusion flames of ethylene : An experimental and numerical study. *Proceedings of the Combustion Institute*, **32** (1) : 793–801, 2009.
- [215] J. P. Gore et G. M. Faeth. Structure and spectral radiation properties of turbulent ethylene/air diffusion flames. *Symposium (International) on Combustion*, **21** (1) : 1521–1531, 1988.
- [216] Y. R. Sivathanu et J. P. Gore. Simultaneous multiline emission absorption measurements in optically thick turbulent flames. *Combustion Science and Technology*, **80** (1) : 1–21, 1991.
- [217] Y. Zheng et J. P. Gore. Measurements and inverse calculations of spectral radiation intensities of a turbulent ethylene/air jet flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, **30** (1) : 727–734, 2005.
- [218] H. Wang. Formation of nascent soot and other condensed-phase materials in flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, **33** (1) : 41–67, 2011.
- [219] M. B. Colket et R. J. Hall. Successes and uncertainties in modeling soot formation in laminar, premixed flames. Dans H. Bockhorn (Rédacteur), *Soot Formation in Combustion : Mechanisms and Models*, p. 442–470. Springer-Verlag, New-York, 1994.
- [220] H. Guo et G. J. Smallwood. A numerical study on the influence of CO₂ addition on soot formation in an ethylene/air diffusion flame. *Combustion Science and Technology*, **180** (10) : 1695–1708, 2008.
- [221] C. K. Law. Comprehensive description of chemistry in combustion modeling. *Combustion Science and Technology*, **177** (5) : 845–870, 2005.
- [222] B. Fiorina, R. Vicquelin, P. Auzillon, N. Darabiha, O. Gicquel et D. Veynante. A filtered tabulated chemistry model for les of premixed combustion. *Combustion and Flame*, **157** (3) : 465–475, 2010.
- [223] R. Vicquelin, B. Fiorina, N. Darabiha, O. Gicquel et D. Veynante. Coupling tabulated chemistry with large eddy simulation of turbulent reactive flows. *Comptes Rendus Mecanique*, **337** (6-7) : 329–339, 2009.
- [224] A. Refloch, B. Courbet, A. Murrone, P. Villedieu, C. Laurent, P. Gilbank, J. Troyes, L. Tessé, G. Chaineray, J. B. Dargaud, E. Quémerais et F. Vuillot. CEDRE software. *AerospaceLab, the ONERA Journal*, **2**, <http://www.aerospacelab-journal.org>, 2011.

- [225] J. Galpin, A. Naudin, L. Vervisch, C. Angelberger, O. Colin et P. Domingo. Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burner. *Combustion and Flame*, **155** (1-2) : 247 – 266, 2008.
- [226] S. J. Harris et A. M. Weiner. Chemical kinetics of soot particle growth. *Annual Review of Physical Chemistry*, **36** (1) : 31–52, 1985.
- [227] F. Liu, H. Guo, G. J. Smallwood et Ömer L. Gülder. Effects of gas and soot radiation on soot formation in a coflow laminar ethylene diffusion flame. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **73** (2-5) : 409–421, 2002.
- [228] O. A. Ezekoye et Z. Zhang. Soot oxidation and agglomeration modeling in a microgravity diffusion flame. *Combustion and Flame*, **110** (1-2) : 127–139, 1997.
- [229] V. Eymet, A. M. Brasil, M. El Hafi, T. L. Farias et P. J. Coelho. Numerical investigation of the effect of soot aggregation on the radiative properties in the infrared region and radiative heat transfer. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **74** (6) : 697–718, 2002.
- [230] T. J. Poinso et S. K. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, **101** (1) : 104 – 129, 1992.
- [231] K. B. Lee, M. W. Thring et J. M. Beér. On the rate of combustion of soot in a laminar soot flame. *Combustion and Flame*, **6** : 137–145, 1962.
- [232] D. Bradley, G. Dixon-Lewis, S. E. din Habik et E. M. J. Mushi. The oxidation of graphite powder in flame reaction zones. *Proceedings of the Combustion Institute*, **20** (1) : 931–940, 1985.
- [233] J. Singh, R. I. A. Patterson, M. Kraft et H. Wang. Numerical simulation and sensitivity analysis of detailed soot particle size distribution in laminar premixed ethylene flames. *Combustion and Flame*, **145** (1-2) : 117–127, 2006.
- [234] C. A. Echavarria, A. F. Sarofim, J. S. Lighty et A. D’Anna. Modeling and measurements of size distributions in premixed ethylene and benzene flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, **32** (1) : 705–711, 2009.
- [235] C. S. McEnally, L. D. Pfefferle, B. Atakan et K. Kohse-Höinghaus. Studies of aromatic hydrocarbon formation mechanisms in flames : Progress towards closing the fuel gap. *Progress in Energy and Combustion Science*, **32** (3) : 247–294, 2006.

Modélisation des phénomènes couplés combustion – formation des suies – transferts radiatifs dans les chambres de combustion de turbine à gaz

Pour concevoir des foyers aéronautiques plus fiables et moins polluants, les industriels ont de plus en plus recours à des simulations numériques s'appuyant sur de nombreux modèles physiques. Si l'on s'intéresse en particulier aux problématiques des charges thermiques pariétales et des émissions polluantes, la modélisation des phénomènes couplés de combustion, de formation des suies et de transfert radiatif est nécessaire. Ainsi, cette thèse a pour objectif de développer une méthodologie permettant de simuler ces phénomènes couplés de manière instationnaire, dans un foyer représentatif des systèmes industriels. Un modèle de formation des suies simple et robuste, à caractère empirique, a d'abord été mis au point sur une configuration de flamme 1D laminaire prémélangée. Ce modèle a été choisi car, étant compatible avec des mécanismes réactionnels globaux, il est bien adapté aux simulations instationnaires en géométrie complexe. Dans un deuxième temps, il a été appliqué à la simulation instationnaire de l'écoulement turbulent réactif diphasique dans un foyer doté d'un prototype d'injecteur industriel. Les niveaux de température obtenus ainsi que la topologie du champ de fraction volumique de suies ont été comparés aux résultats expérimentaux. Les écarts constatés ont été analysés et des corrections ont été proposées. Enfin, une stratégie de couplage entre l'approche LES (*Large Eddy Simulation*) et un outil de simulation des transferts radiatifs basé sur la méthode de Monte Carlo a été mise au point et éprouvée sur le foyer étudié. L'écoulement apparaît peu affecté par le rayonnement, mais en revanche, les transferts radiatifs ont un impact relativement important sur les flux reçus par les parois.

Mots-clés : FORMATION DES SUIES ; COMBUSTION TURBULENTE ; TRANSFERTS RADIATIFS ; SIMULATION GRANDES ECHELLES ; SIMULATION MULTIPHYSIQUE

Modelling of combustion, soot formation and radiative transfer coupled phenomena in gas turbine combustion chambers

Numerical simulations, involving numerous physical models, are more and more employed to design more reliable and less pollutant industrial combustors. In particular, focusing on wall thermal load and pollutant emission issues, coupled phenomena such as combustion, soot formation and radiative transfer have to be modelled. Thus, the aim of this PhD thesis is to develop a methodology to simulate these coupled phenomena in an unsteady way, in an industrial-like combustion chamber. A simple and robust empirical soot formation model has been developed and applied in a first step to a 1D laminar premixed flame configuration. This model was chosen because it is well adapted to unsteady simulations in complex geometries, as it is compatible with global reaction mechanisms. In a second step it was applied to the unsteady simulation of the two-phase turbulent reactive flow in a combustor equipped with an industrial injector prototype. Predicted temperature levels and topology of the soot volume fraction field were compared to experimental results. Some discrepancies were observed: they were analysed and corrections were proposed. Finally, a coupling strategy between the LES (*Large Eddy Simulation*) approach and a radiative transfer simulation tool based on the Monte Carlo method was developed and tested on the same combustor. It appears that radiative transfer does not greatly modify the flow, but has a relatively important effect on wall heat fluxes.

Keywords: SOOT FORMATION; TURBULENT COMBUSTION; RADIATIVE TRANSFER; LARGE EDDY SIMULATION; MULTIPHYSICAL SIMULATION