



HAL
open science

Modélisation de la combustion diluée par tabulation de la cinétique chimique

Jean Lamouroux

► **To cite this version:**

Jean Lamouroux. Modélisation de la combustion diluée par tabulation de la cinétique chimique. Autre. Ecole Centrale Paris, 2013. Français. NNT : 2013ECAP0028 . tel-00905523

HAL Id: tel-00905523

<https://theses.hal.science/tel-00905523v1>

Submitted on 18 Nov 2013

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

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

THÈSE

présentée par

Jean Lamouroux

pour l'obtention du

GRADE de DOCTEUR

Formation doctorale : Énergétique

Laboratoire d'accueil : Laboratoire d'Énergétique Moléculaire
et Macroscopique, Combustion (EM2C)
du CNRS et de l'ECP

Modélisation de la combustion diluée par tabulation de la cinétique chimique

Soutenue le 19 mars 2013

Jury :	MM	Mourad	Boukhalfa	Président
		Laurent	Gicquel	Rapporteur
		Luc	Vervisch	Rapporteur
		Mario	Costa	Examinateur
		Emmanuel	Fiani	Examinateur
		Matthias	Ihme	Examinateur
		Mathieu	Ourliac	Examinateur
		Benoît	Fiorina	Co-encadrant
		Olivier	Gicquel	Directeur de thèse

Remerciements

Cette thèse a été réalisée au laboratoire EM2C de l'Ecole Centrale Paris, et a été financée conjointement par l'ADEME (Agence de l'Environnement et de la maîtrise de l'Energie) et GDF SUEZ.

Je remercie en premier lieu monsieur Mourad Boukhalfa d'avoir accepté de présider mon jury de thèse, messieurs Luc Vervisch et Laurent Gicquel pour avoir lu mon manuscrit avec minutie et intérêt, Mario Costa et Matthias Ihme d'avoir accepté de participer à ma soutenance de thèse.

Je souhaite aussi remercier l'ADEME et GDF SUEZ pour le financement de cette thèse. Du côté de l'ADEME, j'adresse ma gratitude à messieurs Franck Delacroix et Emmanuel Fiani pour le suivi de mon travail. Je remercie en outre les agents de GDF SUEZ avec qui j'ai pu interagir tout au long de mon travail. J'ai une pensée particulière pour Mathieu Ourliac, ingénieur au CRIGEN, pour sa sympathie et sa compréhension, de mon stage de fin d'étude à GDF SUEZ au jour de ma soutenance de doctorat.

Bien entendu, je remercie sincèrement Olivier Gicquel et Benoît Fiorina, mes chers encadrants, qui ont su me tirer (chacun à sa manière!) vers le haut tout au long de ses trois années. J'ai pu profiter de leur expertise scientifique et de leur sympathie, toutes deux très impressionnantes! Ils m'ont toujours encouragé et motivé, et leur optimisme à toute épreuve m'a bien souvent permis de surmonter les épreuves qui ont jalonné cette thèse. Très clairement, ils ont fait de cette thèse une expérience inoubliable pour moi.

I have to thank, in English, Matthias Ihme. I sincerely thank Professor Ihme for giving me the opportunity to work with him in Michigan. This experience was very rich, and I learned a lot on turbulent combustion from him. I also appreciated very much his enthusiasm about my work, his ultra-reactivity to answer to my questions/problems and his terrific punchlines!

Je remercie aussi l'ensemble du laboratoire EM2C, personnel, permanents, post-docs et doctorants pour l'ambiance exceptionnelle qui règne au laboratoire. Je garderai en mémoire les nombreux échanges que l'on a pu avoir sur

des sujets variés et qui ont fortement contribué à me développer scientifiquement et personnellement. J'ai une pensée particulière pour mes camarades de promo et mes collègues de bureau ! Veuillez m'excuser si je ne cite pas vos noms, vous êtes bien nombreux...

Je tiens à exprimer toute ma gratitude à Ronan Vicquelin, maître de conférence au laboratoire EM2C, et à Ghislain Lartigue, ingénieur de recherche au CORIA. Ce sont eux qui, pendant mon stage de fin d'étude, m'ont initié à la modélisation de la combustion et m'ont poussé à faire une thèse au laboratoire EM2C. Je leur en suis très reconnaissant.

Je me dois de remercier chaleureusement Maria Castela et Renaud Mercier, deux doctorants du laboratoire EM2C, qui m'ont aidé à mon retour des Etats-Unis pour mes simulations LES des configurations de combustion sans flamme. Non content d'être d'une grande gentillesse (un grand merci à Renaud pour l'avant-soutenance !!), ils se sont aussi montré disponibles pour toutes mes questions.

Un grand merci à Thomas Schmitt, chercheur CNRS du laboratoire, pour toute son aide pendant ces trois années de thèse, pour sa patience, son optimisme et son amitié. Merci pour tes démonstrations de maîtrise de l'outil de rognage sur VLC (...), pour les fous-rires, les soirées et... tout !

Je remercie du fond du cœur mes (autres) ami(e)s, et ma famille en France, en Suisse et au Costa Rica (¡ no los olvido !), pour les bols d'air frais qui m'ont été nécessaires. Dédicace, donc, à mes parents, Jeanne-Marie, Claire, Pierre, Pablo, Yonca, Léa, Jean-Luc, Monique, Philippe et Françoise, Marcel, John et Bennett, mes amis de Bordeaux, du Caire, de Damas, de Perpignan et de Paris !

Enfin, je remercie ma compagne, Sophie-Charlotte, pour m'avoir accompagné (et supporté !!) tout au long de ce travail, pour avoir relu mon manuscrit, pour le pot de thèse et pour tant d'autres choses. Elle m'a constamment soutenu et encouragé. Un grand merci !

Abstract

This thesis is within a framework of the CANOE project, under the responsibility of GDF SUEZ and the ADEME, and aims at studying the feasibility of the flameless combustion regime in industrial boilers.

It is now well established that reactants preheating allows an improvement on thermal efficiency as well as fuel savings. To avoid an increase in nitrogen oxides emissions arising from reactants temperature augmentation, massive dilution of the reactants by burnt gases can be used. While doing so, hot spots are averted and temperature gradients are smoothed : it's the principle of flameless combustion. Even though this combustion regime is a subject of increasing interest to the industry, its mechanisms are not yet fully understood.

The objective of this work is to develop and validate a new turbulent combustion model adapted to this kind of regimes. Complex chemistry as well as heat losses control is of paramount importance in the establishment and stabilization of the flameless combustion process. Here, these effects are taken into account in an FPV-type chemistry tabulation approach. To discriminate the effects associated with evolutions along the database control parameters, we analyze laminar flame responses to different levels of dilution and heat losses. Moreover, we assess the importance of high-order tabulations, and predictive capabilities of our approaches are highlighted. Then, large-eddy simulations of laboratory scale experiments (an adiabatic and a cooled wall configuration) are carried out. To this end, we compare databases featuring different number of dimensions to experimental data on temperature and species distributions available in the literature. Simulation results are in very good agreement with experimental data for complex tabulations, while discrepancies arise for lower order tabulations. Simulation results show that flameless combustion features a wide variety of flame structures, and that our models are able to tackle realistic flame structures.

Résumé

Cette thèse se situe dans le cadre du projet CANOE, piloté par GDF SUEZ et l'ADEME, qui vise à étudier la faisabilité et la viabilité du régime de combustion sans flamme dans les chaudières industrielles.

Il est maintenant bien établi que le préchauffage des réactifs permet d'améliorer le rendement thermique et de diminuer la consommation de combustible d'une configuration. Pour contourner la formation d'oxydes d'azote résultant de l'augmentation de température des réactifs, ces derniers peuvent être massivement dilués par des produits de combustion. Cela permet en particulier d'éviter la formation de points chauds et d'homogénéiser les gradients de température : c'est le principe de la combustion sans flamme. Bien que ce régime de combustion fasse l'objet d'un intérêt croissant dans l'industrie, les connaissances sur ses mécanismes sont encore parcellaires.

L'objectif de cette thèse est de développer et de valider un modèle de combustion turbulente adapté à ce type de régime. La cinétique chimique complexe et le contrôle des pertes thermiques est d'une importance capitale dans l'établissement et la stabilisation du processus de combustion sans flamme. Ici, ces effets sont pris en compte dans une approche de tabulation de la cinétique chimique de type FPV (*Flamelet-Progress Variable*). Pour discriminer les effets associés aux évolutions suivant les paramètres de contrôle de nos bases de données, on effectue une analyse des réponses de flammes laminaires à différents niveaux de dilution et de pertes thermiques. De plus, nous évaluons l'importance de l'utilisation de tabulations de dimensions élevées dans le cadre de la modélisation de la combustion MILD, et les capacités prédictives des méthodes de tabulation développées sont mises en exergue.

Puis, des simulations aux grandes échelles de la turbulence de configurations de laboratoires (l'une adiabatique, l'autre à parois refroidies), sont effectuées. Pour cela, on utilise et on compare des tabulations de nombre de degrés de libertés variés aux données expérimentales disponibles sur les champs de température et d'espèces. Les résultats obtenus sont en très bon accord avec les données expérimentales pour les tabulations les plus complexes, alors que des limitations significatives apparaissent pour des tabulations de dimensions inférieures. Les simulations proposées permettent de mettre en avant la pluralité des structures de flamme présentes en combustion sans flamme, et indiquent la capacité de nos modèles à reproduire des structures de flammes réalistes.

Table des matières

Abstract	v
Résumé	vii
Introduction	1
1 Processus inhérents à la combustion sans flamme	7
1.1 Introduction	7
1.2 Caractéristiques de la combustion sans flamme	8
1.2.1 Un point sur les termes employés dans la littérature pour qualifier la combustion sans flamme	8
1.2.2 Émission lumineuse	8
1.2.3 Préchauffage des réactifs	9
1.2.4 Recirculation des produits de combustion - Dilution des réactifs	11
1.2.5 Émissions polluantes dans le contexte de la combustion MILD	12
1.3 Stabilité du régime de combustion sans flamme	14
1.4 Problématiques de modélisation	16
1.4.1 Importance d'une cinétique chimique détaillée	18
1.4.2 De l'influence de la dilution sur les trajectoires chimiques	21
1.5 État de l'art en modélisation de la combustion diluée	23
1.5.1 Configurations non-confinées	23
1.5.2 Configurations confinées	24
1.6 Structures de flamme en combustion MILD	28
1.6.1 État de l'art - Applicabilité du régime de flammelette en combustion MILD	28
1.6.2 Hypothèse de modélisation adoptée - Description générale de l'approche	31
1.7 Conclusions	33
2 Reproduction d'une cinétique chimique détaillée : l'approche FPV	35
2.1 Introduction	35

2.1.1	Problématique du coût lié à une cinétique chimique détaillée	35
2.1.2	Réduction de la chimie détaillée	37
2.2	État de l'art de la tabulation de la cinétique chimique	38
2.2.1	Principe général de tabulation de la cinétique chimique .	38
2.2.2	Combustion prémélangée	40
2.2.3	Auto-allumage dans un mélange homogène	41
2.2.4	Réacteur partiellement ou parfaitement mélangé	41
2.2.5	Combustion non-prémélangée	42
2.2.6	Discussion sur les différences de trajectoires chimiques dans l'espace des phases	42
2.3	Tabulation de flammelettes à contre-courant non-prémélangées	44
2.3.1	Structure de flamme dans l'espace de fraction de mélange	44
2.3.2	Modèle de flammelette stationnaire	47
2.4	Approche FPV (Flamelet-Progress Variable approach)	48
2.4.1	Formalisme FPV	48
2.4.2	Analyse de l'approche FPV	52
2.5	Prise en compte des pertes thermiques avec une approche FPV	53
2.6	Stockage de la base de données	55
2.7	Conclusions	56

3 Tabulation de la cinétique chimique pour la combustion diluée soumise à des pertes thermiques 57

3.1	Introduction	57
3.2	Hypothèses de modélisation	58
3.2.1	Composition du diluant	59
3.2.2	Présence des réactifs dans les gaz frais	60
3.2.3	Échanges thermiques	61
3.2.4	Résumé des hypothèses : degrés de liberté autorisés	62
3.3	Génération de flammelettes stationnaires diluées	62
3.3.1	Définitions - Formulation des conditions limites de flammelettes stationnaires	63
3.3.2	Réactivité des conditions limites	65
3.3.3	Problématique de caractérisation - Influence de la dilution	67
3.4	Extension de l'approche FPV - Paramètres de contrôle	73
3.4.1	Caractérisation du mélange	73
3.4.2	Caractérisation des effets hors équilibre	75
3.5	Structure de flamme en régime dilué	77
3.5.1	Diluant à température adiabatique de combustion ($T^D = T^D _{\beta=0}$)	78
3.5.2	Diluant avec pertes thermiques ($T^D < T^D _{\beta=0}$)	82
3.5.3	Trajectoires potentielles - Compétition entre les phénomènes de dilution et de pertes thermiques	84
3.6	Impacts des pertes thermiques	86
3.7	Éléments de comparaison <i>a priori</i> des modèles DFPV et NADFPV	90

3.8	Conclusion	93
4	Couplage de la tabulation avec les équations de conservation	95
4.1	Introduction	95
4.2	Relations de passage	96
4.2.1	Caractérisation de la dilution	97
4.2.2	Caractérisation des pertes thermiques - cas général . . .	99
4.2.3	Caractérisation des pertes thermiques - cas simplifié DFPV	101
4.3	Équations de transport des variables de couplage	101
4.4	Couplage avec un formalisme LES	102
4.4.1	Équations de transport filtrées	103
4.4.2	Fermeture du terme source de la variable de dilution . .	105
4.4.3	Fermeture des termes source chimiques : fonctions de densité de probabilité	107
4.4.4	Relations de passage filtrées	112
4.5	Récapitulatif	113
5	Application à une configuration adiabatique	115
5.1	Introduction	115
5.2	Configuration expérimentale	116
5.3	Configuration numérique	118
5.3.1	Maillage	119
5.3.2	Conditions limites	121
5.3.3	Temps physiques simulés et moyennes	121
5.3.4	Tables thermochimiques de couplage	121
5.4	Topologie de l'écoulement	122
5.4.1	Champs de vitesse axiale	122
5.4.2	Structures dynamiques	122
5.5	Comparaison de champs instantanés	124
5.6	Comparaison avec les données expérimentales	128
5.6.1	Comparaisons suivant l'axe longitudinal	128
5.6.2	Comparaisons suivant différentes coupes radiales	130
5.7	Analyse des simulations LES	137
5.7.1	Représentation en nuages de points	137
5.7.2	Trajectoires chimiques dans l'espace des phases	140
5.7.3	Structure de flamme	143
5.8	Conclusion	147
6	Application à une configuration à parois refroidies	149
6.1	Introduction	149
6.2	Configuration expérimentale	150
6.3	Configuration numérique	153
6.3.1	Maillage	153
6.3.2	Conditions limites	154

6.3.3	Temps physiques simulés et moyennes	154
6.3.4	Tables thermochimiques de couplage	155
6.4	Topologie de l'écoulement	155
6.5	Répartitions instantanées de grandeurs thermochimiques	156
6.6	Comparaison avec les données expérimentales	159
6.6.1	Run 4 : $\phi_G = 0,58$	159
6.6.2	Run 2 : $\phi_G = 0,77$	162
6.6.3	Influence de la modélisation de l'injection d'air	167
6.6.4	Un point sur les résultats	172
6.6.5	Modélisation des pertes thermiques	174
6.7	Analyse des simulations LES	176
6.7.1	Représentation en nuages de points	176
6.7.2	Structure de flamme résolue	178
6.8	Conclusion	179
	Conclusion	181
	A Équations de l'aérothermochimie	185
A.1	Description d'un mélange	185
A.2	Grandeurs thermochimiques	186
A.3	Equations de transport	187
A.3.1	Continuité	187
A.3.2	Quantité de mouvement	187
A.3.3	Espèces	187
A.3.4	Conservation de l'énergie	188
A.4	Hypothèses simplificatrices et équations associées	189
	Références	208

Introduction

Cette thèse est le fruit d'une collaboration entre le laboratoire CNRS EM2C, l'Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie (ADEME) et GDF SUEZ. Elle s'inscrit dans le cadre d'un projet inter-partenaires regroupant des acteurs académiques (laboratoires CORIA et EM2C), industriel (GDF SUEZ) et public (ADEME) : le projet CANOE.

Enjeux énergétiques et environnementaux

Dans le monde, la combustion intervient dans plus de $\sim 80\%$ de la consommation d'énergie primaire, par le biais de l'utilisation des hydrocarbures (Fig. 1). L'attrait apparent pour la combustion est lié au fait qu'aucun autre vecteur de l'énergie ne présente de densités énergétiques volumiques et massiques aussi favorables. Ainsi, la combustion intervient dans les domaines de la production d'énergie, du transport ou encore de la production de chaleur utile dans nombre d'industries manufacturières.

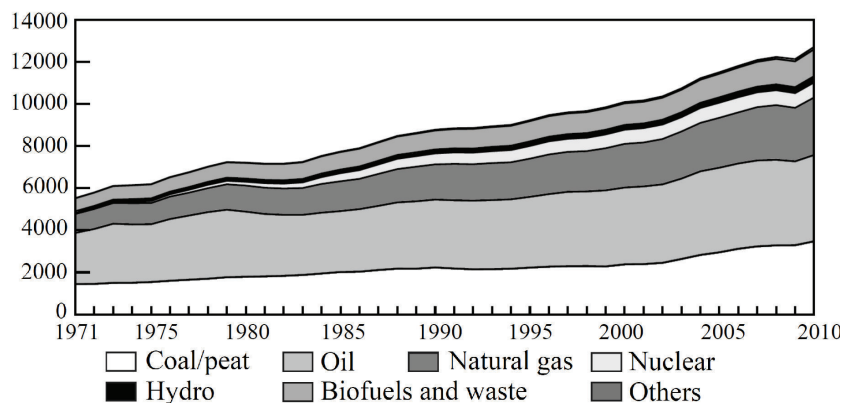


FIGURE 1 – Sources d’approvisionnement de l’énergie primaire totale (en Mégatonnes équivalent pétrole) par combustible et en fonction du temps (International Energy Agency 2012).

En raison de ses avantages et de la pluralité de ses applications, l’utilisation des hydrocarbures devrait perdurer, malgré une raréfaction de combustible toujours plus prononcée. La combustion est néanmoins responsable de la majeure

partie des émissions de CO_2 , qui est un gaz à effet de serre (Fig. 2).

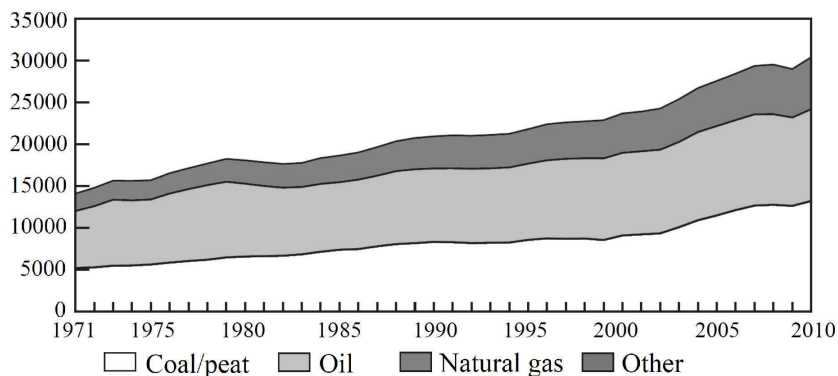


FIGURE 2 – Émissions de dioxyde de carbone CO_2 par combustible en fonction du temps (International Energy Agency 2012).

De plus, la combustion émet des espèces polluantes fortement nocives pour l'être humain, comme par exemple le monoxyde de carbone (CO), qui peut produire des intoxications sévères, ou encore les oxydes d'azote (NO_x), qui comprennent le protoxyde d'azote (NO_2), un puissant gaz à effet de serre, et le monoxyde d'azote (NO) qui est toxique à faibles doses (irritations des muqueuses) et qui peut s'associer à l'eau pour former de l'acide nitrique (HNO_3), responsable des pluies acides.

Pour l'industrie, la maîtrise de la combustion est donc essentielle, et ses enjeux sont clairs :

- Diminuer la consommation de combustible et les émissions polluantes ;
- Augmenter la rentabilité et le rendement énergétique des systèmes.

Toutefois, ces objectifs sont généralement contradictoires. Par exemple, pour diminuer la consommation du combustible, on peut préchauffer l'air utile à la combustion en récupérant la chaleur des gaz brûlés. Parallèlement, les émissions de NO_x augmentent de manière exponentielle avec la température. Cela rend problématique le développement de nouvelles technologies qui puissent être à la fois efficaces et peu polluantes.

Dans ses activités liées à l'exploitation du gaz naturel, GDF SUEZ maintient en France un parc de chaudières industrielles. À ce jour, les valeurs limites d'émissions des oxydes d'azote sont respectées dans les chaudières. Néanmoins, au vu des normes d'émissions polluantes de plus en plus restrictives, GDF SUEZ cherche à augmenter l'efficacité et diminuer les émissions de ces chaudières. Pour cela, GDF SUEZ a initié un projet inter-partenaires, le projet CANOE (CleAN and efficient flameless bOilEr), avec l'ADEME et les laboratoires CORIA et EM2C visant à évaluer la faisabilité et la viabilité d'une technologie de combustion en rupture, permettant de conjuguer un haut ren-

dement avec des émissions minimales, pour ces configurations : la combustion sans flamme. Le projet vise donc à amorcer le développement de technologies de réduction des NO_x pour les configurations à parois froides pour répondre aux futurs durcissements des normes.

La combustion sans flamme

Dans l'optique d'améliorer le rendement énergétique d'un brûleur, il est possible de transférer de la chaleur des gaz brûlés aux gaz frais : c'est le principe des brûleurs dits régénératifs. Cependant, l'augmentation de la température des réactifs a un impact direct sur la formation des oxydes d'azote. De nouvelles technologies ont été élaborées pour pallier cet inconvénient avec plus ou moins de succès. Parmi ces technologies, on peut notamment citer l'oxy-combustion, qui a l'avantage majeur de n'émettre aucun oxyde d'azote, l'azote n'étant pas présent dans les réactifs. Une autre méthode, dite d'*étagement de combustion*, vise à réduire les émissions de NO_x en limitant les temps de séjour aux températures maximales ou en favorisant une recombinaison des oxydes d'azote par des radicaux hydrocarbonés. D'autres méthodes existent, comme la Réduction Sélective Non Catalytique (SNCR) et la Réduction Sélective Catalytique (SCR), qui se basent sur l'injection d'espèces chimiques particulières dans les produits de combustion pour entraîner des réactions de réduction des oxydes d'azote. Malgré la palette de technologie à disposition de l'industrie pour réduire les émissions polluantes, la plupart de ces méthodes entraînent des coûts d'utilisation et/ou de mise en place non négligeables, mais peut aussi se faire au détriment du rendement global des configurations.

C'est en 1989 que le régime de combustion sans flamme est breveté sous l'acronyme *FLOX*, pour Flameless Oxydation, en Allemagne (Wunning (1991)). Il est alors défini comme un régime de combustion pour lequel aucune flamme n'est visible à l'œil nu, stable, à gradients de température très faibles et émettant très peu de polluants (CO et NO). Il est alors montré que la condition fondamentale pour l'obtention du régime *FLOX* est de diluer les jets de combustible et/ou de comburant avec une forte recirculation de gaz brûlés avant réaction. Suite à ces travaux, ce régime de combustion a principalement été développé dans l'industrie avant de faire l'objet d'un nombre croissant d'études de la part de laboratoires de recherche académiques (Li et al. (2011)). La combustion sans flamme est maintenant reconnue comme l'une des techniques de combustion parmi les plus avancées pour la diminution de l'utilisation de matières fossiles et la réduction de la formation des polluants. Ce régime est particulièrement intéressant pour des processus industriels nécessitant un champ de température homogène, un contrôle des contraintes mécaniques, une génération de bruit et d'instabilités faibles et étant soumis à une évolution des normes sévère d'émission de NO_x . Les applications industrielles potentielles de ce type de régime de combustion sont nombreuses : fours de verreries, fours

métallurgiques, raffineries, turbines à gaz...

Le processus de combustion sans flamme est, de nos jours, bien maîtrisé dans les configurations à parois *chaudes* (type four). Néanmoins, son utilisation à des installations de type chaudière, dans lesquelles un fluide caloporteur est employé pour transférer la chaleur produite par la combustion, n'a toujours pas été étudiée. Des problématiques particulières de stabilisation de la combustion apparaissent en effet lorsque les parois de la configuration sont soumises à des températures *basses*. Pour développer la combustion sans flamme dans les chaudières, une compréhension fine de ses mécanismes est nécessaire. Pour caractériser ce régime de combustion, les études expérimentales et numériques sont complémentaires : dans le cadre du projet partenaire, l'analyse expérimentale sur une configuration pilote a été menée par le laboratoire CORIA, alors que les efforts de modélisation et de simulation ont été entrepris par le laboratoire EM2C via ce travail de thèse.

Modélisation et simulation des écoulements réactifs

Dans un contexte industriel, l'attrait pour l'outil numérique est lié à l'augmentation constante des moyens informatiques et aux progrès effectués en modélisation de la combustion turbulente. Aujourd'hui, la simulation est devenu un outil essentiel pour la compréhension des phénomènes physiques et pour éviter les coûts de production et de développement de démonstrateurs ou de configurations pilotes en permettant d'analyser de manière précise l'influence de la géométrie, des conditions opératoires, etc.

Les enjeux de la modélisation et de la simulation des écoulements réactifs sont nombreux. La simulation peut être utilisée pour prédire des distributions de champs de température et d'espèces chimiques (et notamment de polluants), ou pour étudier la dynamique de la combustion (instabilités de combustion, phénomènes transitoires...). Dans le cadre du projet CANOE, les objectifs des travaux de modélisation visent à développer un nouveau modèle de combustion turbulente adapté à la combustion sans flamme permettant de caractériser la structure de flamme, les émissions polluantes, et la stabilité du régime de combustion. Ces objectifs sont soumis à des contraintes industrielles : le modèle développé doit être validé de manière à être prédictif et applicable aux systèmes complexes propres à l'industrie.

Enjeux de la thèse

Différentes études ont été menées afin de caractériser la combustion sans flamme, et ce aussi bien expérimentalement que numériquement. Ce mode de combustion est encore mal compris et les simulations numériques effectuées proposent une grande variété de modèles de combustion pour décrire ce régime, sans toutefois proposer de modèle assez élaboré pour décrire complètement tous

les mécanismes principaux de la combustion sans flamme. La combustion sans flamme est un régime particulier à modéliser en raison de la dilution extrême des réactifs, qui va modifier la cinétique chimique, et par là-même la structure de flamme et la dynamique de combustion. À cela s'ajoutent les échanges thermiques, très importants dans les chaudières industrielles, qui modifient eux aussi la cinétique chimique et la stabilité de la combustion.

L'objectif de cette thèse est donc de proposer, développer et valider de nouveaux modèles de combustion turbulente dont la validité doit s'étendre à la combustion sans flamme et qui permettent de capturer :

- l'influence de la dilution des réactifs ;
- l'influence des pertes thermiques ;

Les modèles développés doivent permettre de détailler les champs de température et d'espèces, la localisation de la zone de réaction ainsi que les mécanismes de stabilisation de la combustion. Cela doit se faire avec la même précision indépendamment du régime de combustion (classique ou sans flamme). La finalité recherchée est de permettre aux bureaux d'études de GDF SUEZ d'établir la faisabilité du régime de combustion sans flamme dans les configurations soumises à de forts échanges thermiques, ou de déterminer les améliorations de géométries, conditions opératoires ou autres, nécessaires à la mise en place de ce type de régime de combustion pour les chaudières industrielles. De plus l'approche proposée doit vérifier les contraintes industrielles en terme de coûts CPU et mémoire, mais aussi de temps humain d'utilisation.

Plan de la thèse

Pour répondre aux objectifs et aux contraintes mentionnés précédemment, nous avons proposé une approche basée sur une tabulation de la cinétique chimique, prenant en compte des effets de dilution et de pertes thermiques. Une validation systématique de notre approche par comparaison avec des données expérimentales a été faite dans différents cas de figures, et les résultats obtenus se sont avérés être très encourageants. La structure de ce manuscrit est exposée ci-après :

Chapitre 1 : Pour identifier les problématiques de la modélisation de la combustion sans flamme, une présentation de ses caractéristiques particulières et tout d'abord exposée. Puis, un état de l'art de la modélisation et de la simulation de ce régime est donné, avant de présenter l'approche adoptée dans ce travail.

Chapitre 2 : Les modèles de combustion développés dans ce travail se basent sur une tabulation de la cinétique chimique, afin d'avoir un bon compromis entre

précision et coût des calculs. Dans un premier temps, les techniques de tabulation sont étudiées dans un contexte général. Puis, l'approche FPV (*Flamelet-Progress Variable*), socle de ce travail de thèse, est détaillé et les modifications du modèle à apporter dans le cadre de la simulation de la combustion sans flamme sont amenées.

Chapitre 3 : Ce chapitre détaille la méthode de prise en compte des effets de dilution des réactifs et des pertes thermiques dans une tabulation FPV. Une analyse *a priori* de ces effets est menée, et on met en avant l'importance de la dilution sur le développement de la cinétique chimique en étudiant la réponse de flammes laminaires soumises à différents degrés de dilution et de pertes thermiques. Deux modèles sont proposés : le modèle NADFPV (Non-Adiabatic Diluted Flamelet-Progress Variable), pour lequel la dilution et les pertes thermiques peuvent évoluer indépendamment en temps et en espace, et le modèle DFPV (Diluted Flamelet-Progress Variable), pour lequel dilution et pertes thermiques sont considérés strictement équivalents. Les capacités prédictives des modèles sont systématiquement évaluées en se basant sur les observations expérimentales disponibles dans la littérature. Les différences entre les deux modèles sont présentées, et on montre en particulier qu'une tabulation de type NADFPV est nécessaire dans des cas de chimie fortement hors équilibre.

Chapitre 4 : Dans ce chapitre, nous discutons du couplage de nos techniques de tabulation avec les équations de conservation. Les modèles sont appliqués à un formalisme de simulation aux grandes échelles de la turbulence (LES). Pour prendre en compte les interactions chimie-turbulence, des fonctions de densité de probabilités présumées sont employées, en invoquant des hypothèses de modélisation basées sur les caractéristiques de la combustion sans flamme.

Chapitre 5 : Pour valider nos modèles, on effectue une première simulation LES d'une configuration expérimentale adiabatique fonctionnant en régime de combustion sans flamme. Les résultats de trois modèles de complexités différentes sont analysés en comparant les simulations aux données expérimentales. L'approche développée dans ce manuscrit présente les meilleurs résultats et une étude des mécanismes de stabilisation de la combustion permet de mettre en lumière des caractéristiques clés de la combustion sans flamme.

Chapitre 6 : Dans ce chapitre, on évalue les capacités des modèles NADFPV et DFPV dans le cas de la simulation d'une configuration où les parois sont refroidies dans deux cas de figures : un régime de combustion classique et un régime de combustion sans flamme. On montre que dans les deux cas, les deux approches donnent des résultats semblables et satisfaisants. Des pistes d'amélioration sont aussi fournies.

Chapitre 1

Processus inhérents à la combustion sans flamme

Le chapitre décrit le régime de combustion sans flamme. Dans un premier temps, les propriétés particulières de ce régime de combustion ainsi que les différentes définitions proposées dans la littérature sont exposées. Puis, les problématiques de modélisation inhérentes à la reproduction de ce processus de combustion sont données. Un inventaire des modèles et approches typiquement utilisés pour simuler ce régime est ensuite présenté, en mettant l'accent sur leurs avantages et/ou limitations. En fin de chapitre, une discussion sur la validité d'un régime type flammelette pour la combustion sans flamme est faite. Les conditions nécessaires à une tabulation de la cinétique chimique adaptée à ce type de combustion y sont amorcées.

1.1 Introduction

De nombreux termes ont été employés pour décrire des systèmes de combustion fonctionnant dans un régime de combustion sans flamme, ce qui montre qu'à ce jour il n'existe pas de consensus sur une définition rigoureuse de ce régime. Pour clarifier cela, il est important de passer en revue les différentes définitions proposées dans la littérature, et d'établir les caractéristiques fondamentales du régime de combustion que l'on qualifiera dans ce manuscrit de "sans flamme" ou de "MILD". C'est l'objet de la section 1.2.

Afin de cerner les problématiques de modélisation inhérentes à la simulation du régime de combustion sans flamme une discussion sur ces mécanismes et leurs impacts en terme de modélisation est faite de la section 1.3 à 1.4. Pour mettre en lumière l'intérêt de proposer une nouvelle approche pour simuler ce régime, on propose un état de l'art en modélisation de la combustion MILD en section 1.5. Enfin, le choix de l'approche de modélisation adoptée dans ce manuscrit est exposé et justifié en s'appuyant sur la littérature.

1.2 Caractéristiques de la combustion sans flamme

La combustion MILD permet d'atteindre des niveaux d'émissions d'oxydes d'azote très faibles, même en présence d'un fort préchauffage de l'air, lorsque les réactifs sont dilués par des produits de combustion dans un environnement à haute température. De nombreux articles, portant aussi bien sur des études expérimentales que numériques, traitent de systèmes de combustion opérant sous ce principe bien qu'il y soit fait référence sous des noms différents. De manière générale, la combustion sans flamme présente une ou plusieurs de ces caractéristiques majeures :

- pas de flamme visible ;
- haute efficacité de combustion ;
- gradients de température faibles ;
- peu de bruit de combustion ;
- pas ou peu d'émissions d'oxydes d'azote et de monoxyde de carbone ;

1.2.1 Un point sur les termes employés dans la littérature pour qualifier la combustion sans flamme

Différentes dénominations du régime de combustion sans flamme ont été évoquées dans la littérature. Le tableau 1.1 résume les principales appellations utilisées, ainsi que les caractéristiques fondamentales ayant servi à définir le régime de combustion.

Bien qu'une définition générale de la combustion sans flamme ne soit pas établie, il existe des liens fondamentaux entre chacune des définitions. En particulier, en combustion sans flamme, la recirculation massive de produits de combustion vient diluer les réactifs avant combustion, ce qui a pour effet d'homogénéiser le champ de température et de diminuer les émissions de polluants. Dans un souci de lisibilité, on adoptera au long de ce manuscrit les termes de *combustion sans flamme* ou de combustion *MILD* pour qualifier ce processus.

1.2.2 Émission lumineuse

Une des propriétés frappantes de la combustion sans flamme est sa capacité à manifester un mode d'émission lumineuse particulier. En effet, pour certaines conditions de température et de dilution des réactifs, le front de flamme n'est plus visible (Fig.1.1). [Wunning and Wunning](#) définissent la combustion sans flamme sur ce critère : c'est l'oxydation sans flamme (*Flameless Oxidation* ou FLOX Combustion). Plus récemment, [Khalil et al. \(2010\)](#) et [Arghode et al. \(2012\)](#) ont aussi qualifié ce régime de CDC, pour *Colorless Distributed Combustion*. Cependant, l'émission lumineuse n'est pas nulle. Elle devient en revanche

	Exemple d'auteurs	Propriété(s) utilisée(s)
MILD	Oberlack et al. (2000)	Pas de points singuliers sur la courbe en S (T en fonction du Damköhler).
	Cavaliere and de Joannon (2004)	Température des réactifs T_{in} supérieure à la température d'auto-allumage et augmentation de la température inférieure à T_{in} .
	Kumar et al. (2002)	Fluctuations de température dans l'écoulement inférieures à un certain critère.
Flameless / Colorless	Wunning and Wunning (1997) ; Arghode and Gupta (2010)	Flamme non visible à l'œil nu.
HiTAC	Gupta (2004)	Température de l'air injectée permettant l'auto-allumage du mélange.

TABLE 1.1 – *Classification du régime de combustion sans flamme en fonction du nom utilisé, des auteurs, et des propriétés principales définissant le régime.*

moins intense que la lumière émise par les parois chaudes de la chambre de combustion. Cela est dû à la dilution des espèces qui implique une diminution de la concentration des espèces les plus émettrices de lumière (radicaux CH^* et C_2^* en particulier) [Gupta et al. \(1999\)](#). Notons enfin que certaines propriétés du régime de combustion sans flamme (faibles gradients de température, faibles émissions d'oxydes d'azote) peuvent être atteintes en distinguant toujours la zone de réaction.

Par conséquent, dans un cadre général, cette définition de la combustion sans flamme basée sur l'apparence visuelle du processus de combustion n'est pas satisfaisante.

1.2.3 Préchauffage des réactifs

L'un des intérêts majeurs de la combustion sans flamme est d'émettre très peu d'oxyde d'azote, même en présence d'un préchauffage des réactifs. Le préchauffage des réactifs (en général du comburant) permet de faire des économies de combustible, d'augmenter le rendement énergétique du système et d'assurer un établissement de la combustion en favorisant notamment des phénomènes d'auto-allumage. Cela a pour effet de stabiliser la combustion sans autre moyen (flamme pilote, injection swirlée, etc).

Le préchauffage des réactifs peut s'effectuer de manière externe, en chauffant les réactifs avant leur injection dans la chambre, ou de manière interne, en favorisant la recirculation de gaz brûlés chauds vers les réactifs. Lorsque le préchauffage de l'air est très important, [Katsuki and Hasegawa \(1998\)](#) définissent la *Highly Preheated Air Combustion*. De la même manière, lorsque la dilution des

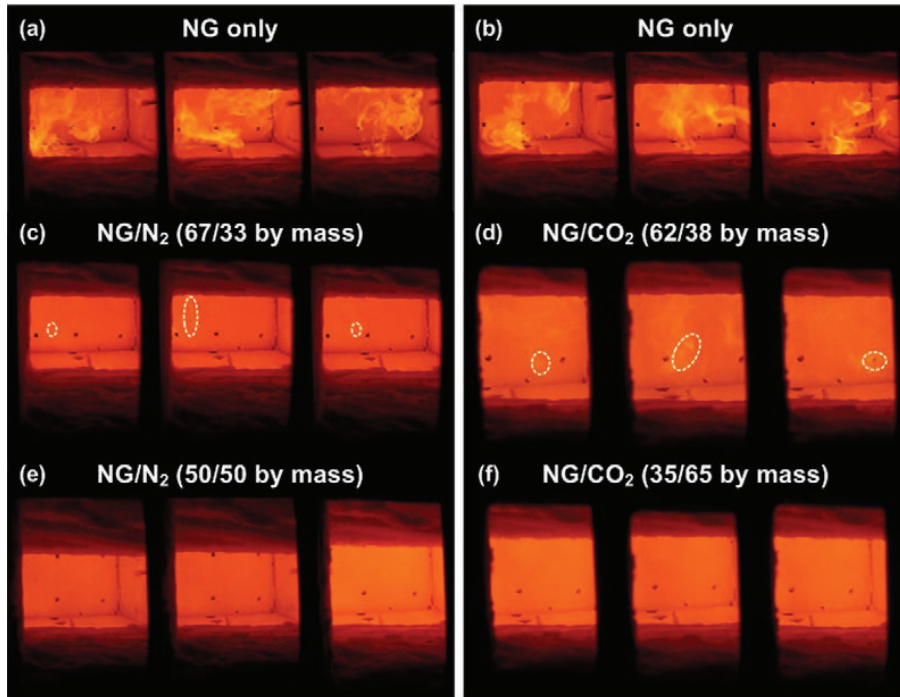


FIGURE 1.1 – Photographies de la combustion du gaz naturel avec de l'air dans un four académique pour différents degrés de dilution, (Szegö et al. (2008)).

réactifs est importante, Cavaliere and de Joannon (2004) définissent la combustion HiTAC, pour *High Temperature Air Combustion*. Dans cette configuration, l'auto-allumage contrôle la combustion au sein de la chambre de combustion. La notion de préchauffage de l'air intervient aussi dans la définition de la combustion dite MILD, acronyme de *Moderate or Intense Low-oxygen Dilution*, au sens de Cavaliere and de Joannon (2004).

Il est important de noter que cette définition de la combustion MILD repose sur l'hypothèse que le préchauffage de l'air est externe. Cependant, dans de nombreuses configurations, la température de préchauffage n'excède pas les températures d'auto-allumage (voir par exemple le système de Castela et al. (2012)) : ce sont les recirculations et la dilution des réactifs résultante qui apportent la chaleur nécessaire à une stabilisation de la combustion et un établissement de la combustion sans flamme. De plus, il a été montré que la combustion sans flamme pouvait être atteinte sans préchauffage des réactifs, bien que ce cas de figure ne soit pas intéressant pour des applications industrielles (Wunning and Wunning (1997); Masson (2005); Szegö et al. (2008); Rottier (2010)). Notons enfin que le préchauffage des réactifs n'est pas une exclusivité de la combustion sans flamme : un grand nombre de configurations fonctionnent avec préchauffage pour assurer un meilleur rendement sans pour autant atteindre le régime de combustion sans flamme. En fait, le préchauffage des réactifs, qu'il

soit interne ou externe, est une composante majeure de la combustion MILD dans le sens où ce régime de combustion opère à température de réactifs élevés.

1.2.4 Recirculation des produits de combustion - Dilution des réactifs

Un des aspects fondamentaux de la combustion sans flamme est que cette combustion présente des gradients de température faibles devant ceux que l'on retrouve dans des régimes de combustion classique. Ceci est obtenu en diluant les réactifs avec des produits de combustion. La dilution peut être effectuée *a posteriori* via une pré-combustion (le diluant est créé par une combustion annexe avant de pénétrer dans la configuration) ou bien directement dans la chambre de combustion (le diluant est créé dans la chambre de combustion). De toute évidence, une dilution interne suffisante pour obtenir un régime de combustion sans flamme sera dépendante de l'aérodynamique de la chambre de combustion, de sa géométrie et des conditions sur les quantités de mouvements aux injections de combustible et de comburant, destinées à assurer de larges zones de recirculation.

La dilution par les produits de combustion permet d'homogénéiser la température au sein du four et d'éviter les points chauds dans la chambre de combustion. Cela a pour conséquence directe de diminuer la formation des oxydes d'azote. D'un point de vue technique, la dilution des réactifs se fait en mélangeant localement combustible et comburant avec des produits de combustion avant la zone de réaction. L'effet principal obtenu est que les gradients de température sont moins importants que dans le cas d'une combustion conventionnelle. Du fait de l'injection d'air généralement préchauffé et de la température de flamme moins importante, le gradient de température au sein du domaine est, lui aussi, fortement diminué. Cette technique nécessite cependant des précautions : la dilution doit avoir lieu avant que les réactifs purs ne brûlent. Lorsque la dilution dépasse un certain seuil, on atteint le régime de combustion sans flamme (Wunning and Wunning (1997)). Au contraire, si la dilution n'est pas favorisée ou si elle est trop tardive, la combustion peut être conventionnelle ou instable. Cela peut s'illustrer en traçant les localisations des zones de combustion en fonction de la température de fonctionnement d'un four et d'un facteur d'entraînement des produits de combustion $K_v = \dot{m}_e / (\dot{m}_a + \dot{m}_f)$, où \dot{m}_e, \dot{m}_a et \dot{m}_f correspondent respectivement aux débits massiques de gaz brûlés, d'air et de fuel (Fig.1.2). Notons que dans ce diagramme, le domaine de combustion sans flamme doit aussi être borné par une droite lorsque la température de fonctionnement devient trop importante ; le cas échéant, la production de polluants explose et le risque de sortir du mode de combustion sans flamme est accru. La figure 1.2 montre clairement l'importance primordiale de la dilution, et donc des recirculations, sur l'établissement d'un régime de combustion MILD.

La dilution, qui impose en combustion sans flamme des zones de dégagement de chaleur vastes et des fluctuations de température faibles (Choi and Katsuki

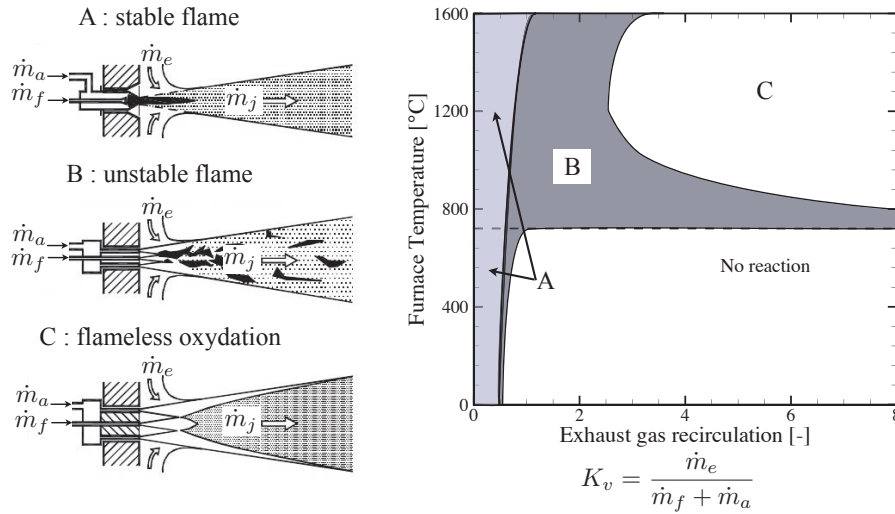


FIGURE 1.2 – Domaines de combustion en fonction de la température du four et du facteur d'entraînement K_v , *Wunning and Wunning (1997)*

(2001)), est un élément clé à prendre en compte dans la modélisation de la combustion sans flamme. Les problématiques de modélisations associées à ce processus seront discutées plus loin dans ce chapitre.

Notons enfin que la dilution apporte aux réactifs de la chaleur en les diluants : on préchauffe les réactifs avant combustion. La figure 1.3 permet de situer le régime de combustion MILD en fonction du taux de recirculation K_v (rapport des débits de diluant sur les débits d'entrée de réactifs) et de la température des réactifs. On peut alors discriminer le régime de combustion sans flamme comme étant un régime opérant à hautes températures de diluant et à des teneurs en oxygène relativement faibles (conséquences directes des recirculations/dilutions).

1.2.5 Émissions polluantes dans le contexte de la combustion MILD

Le contrôle des émissions polluantes est crucial dans le design de nouveaux systèmes de combustion. La combustion MILD a la capacité d'émettre des quantités très faibles de polluants, en particulier d'oxydes d'azote (NO_x), de monoxyde de carbone (CO) et d'hydrocarbures imbrûlés (HC)¹. Cela est valable pour des configurations opérant avec des injections non-prémélangées (*Wunning and Wunning (1997)*) et prémélangées (*Lueckerath et al. (2008)*). Nous donnons ici des éléments de compréhension des mécanismes de formation de ces trois polluants.

1. Bien que non abordées dans cette thèse, ces propriétés se retrouvent pour des combustibles non-gazeux, comme le charbon (*Stadler et al. (2009)*).

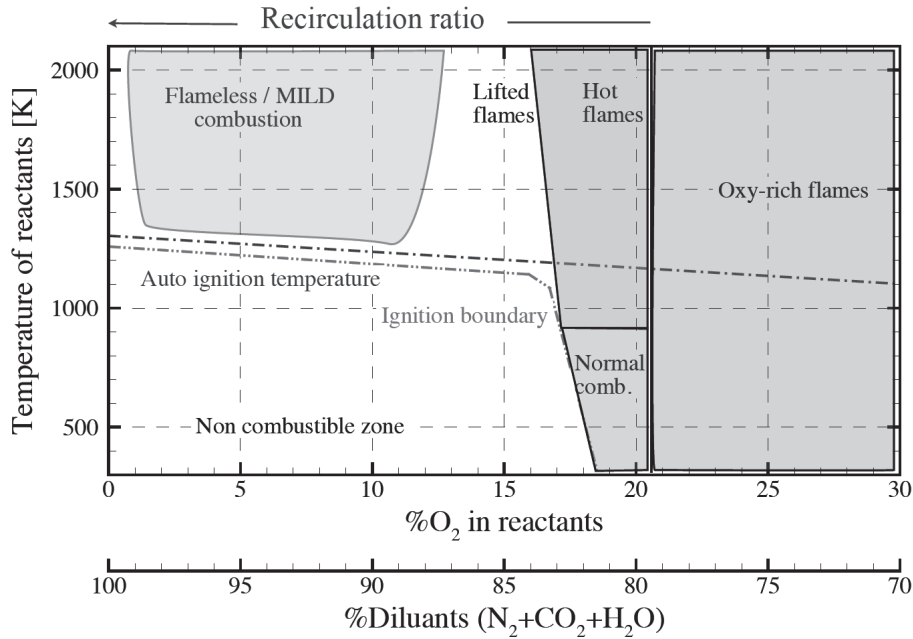


FIGURE 1.3 – Diagramme schématique des localisations des régimes de combustion en fonction de la température des réactifs et de la teneur en oxygène ou en diluant, ou du taux de recirculation K_v . D'après Rao and Levy (2010).

- Les NO_x regroupent le monoxyde de carbone NO, principal constituant des oxydes d'azote, le protoxyde d'azote N_2O et le dioxyde d'azote NO_2 . Le protoxyde d'azote est un puissant gaz à effet de serre, alors que le NO est toxique à faibles doses (irritations des muqueuses) et peut s'associer à l'eau pour former de l'acide nitrique (HNO_3), responsable des pluies acides. En outre, les NO_x perturbent l'équilibre atmosphérique : ils forment de l'ozone (O_3) dans la troposphère par des réactions photochimiques et participent à la destruction de la couche d'ozone stratosphérique. Lors de la combustion des hydrocarbures, le NO est formé suivant trois mécanismes principaux (Miller and Bowman (1989)) :
 1. la voie thermique, qui est la voie de formation principale pour des températures supérieures à 1700 K ;
 2. la voie précoce, aussi appelée voie de *prompt NO*, actif à plus basses températures ;
 3. le Fuel-NO, lié à la présence d'azote dans certains combustibles.

Diverses études paramétriques sur des flammes laminaires diluées ont montré l'importance de toutes les voies de formation des NO_x en combustion MILD (Lee and Choi (2009)), contrairement à un régime de combustion classique dans lequel le mécanisme thermique est généralement dominant. Choi and Katsuki (2002), puis Hamdi et al. (2009),

ont avancé dans ces études le rôle de la dilution de l'air et de l'intensité du mélange sur les émissions de NO . Au contraire, en simulant des configurations tridimensionnelles semi-industrielles opérant en régime de combustion sans flamme, Mancini et al. (2002) et Parente et al. (2008) concluent que la voie de formation principale de l'oxyde d'azote est la voie thermique. Ces différences de conclusions entre les études citées ici indiquent qu'il n'existe pas encore à ce jour de consensus sur les voies privilégiées de création des NO_x en combustion MILD. Néanmoins, on peut avancer que la prise en compte de toutes les voies de formation des NO_x est importante dans ce régime de combustion. Une cinétique chimique détaillée et une bonne prédiction du champ de température seront donc des conditions nécessaires pour capturer la formation de NO_x .

- La combustion complète d'hydrocarbures produit du dioxyde de carbone et de l'eau. Le monoxyde de carbone est le résultat d'une combustion incomplète. Une étude des réactions de formation-destruction du CO montre qu'il est produit dans des régions à faibles teneurs en oxygène (les zones riches en combustibles) ou lorsque la chimie n'est pas assez rapide pour parvenir à l'équilibre. En conséquence, il est reconnu que les technologies permettant de diminuer les émissions de NO_x peuvent produire beaucoup de CO. En combustion MILD, la combustion de poches riches en combustible est évitée en diluant massivement les réactifs.
- De la même manière que le CO, les hydrocarbures imbrûlés sont issus d'une combustion incomplète. Les régions excessivement riches en combustible, ou trop pauvres, sont donc des sources potentielles d'émissions d'imbrûlés. Ces derniers peuvent aussi être produits en présence de phénomènes d'extinction, comme par exemple à proximité de parois froides. Pour diminuer ces émissions, une combustion complète doit être favorisée, et le design de la chambre de combustion, de son brûleur et des systèmes d'injection doivent assurer une topologie d'écoulement et de mélange adéquate. En combustion sans flamme, l'uniformité du champ de température, ainsi que la gamme de taux d'aérations typiquement utilisés assurent des émissions extrêmement faibles de HC.

1.3 Stabilité du régime de combustion sans flamme

Après avoir exposé les caractéristiques du régime de combustion sans flamme ont été exposées, il est important de s'attarder sur la connaissance actuelle concernant les mécanismes de stabilisation de la combustion MILD. avant d'aborder les problématiques de modélisation inhérentes à ce régime.

Les paramètres contrôlant la stabilité du régime de combustion sans flamme sont à ce jour encore à l'étude. Cela vient essentiellement du fait que l'extra-

polation des conclusions obtenues pour une configuration donnée (conditions opératoires, géométrie...) à un cas général est difficile. En combustion non-prémélangée classique, la stabilisation de la combustion peut se faire par divers moyens : accroche flamme, flammes pilotes, swirls ou encore recirculation des gaz chauds à proximité du système d'injection (Poinsot and Veynante (2005)). En combustion sans flamme, les brûleurs facilitent les réactions chimiques en aval de l'écoulement en freinant le mélange entre les réactifs ou en augmentant le taux d'étirement local. Pour ce faire, des températures de réactifs élevées ainsi que de forts taux de dilution sont nécessaires à la stabilisation de la combustion (Fig.1.2). Le contrôle du mélange au sein d'une chambre de combustion MILD est donc primordial.

Les études dédiées à la stabilité d'un régime de combustion fortement dilué se sont faites à différentes échelles, sur des configurations variées. La structure chimique de flammes laminaires soumises à différents niveaux de dilution par du N_2 a été analysée par Payet (2007) en calculant avec une chimie détaillée des flammes mono-dimensionnelles de prémélange et à contre-courant. Ces calculs ont permis de mettre en avant l'importance de la dilution sur la vitesse de flamme, les températures de gaz brûlés et les épaisseurs de flamme. Dans un article plus récent, Min et al. (2011) ont examiné l'effet de la dilution de l'injection d'air par divers diluants dans des flammes laminaires de diffusion. Ils ont isolé les effets des propriétés physicochimiques du diluant, qu'ils démontrent responsables du décrochage de flamme pour un certain niveau de dilution, des effets de la dilution pure, qui est à l'origine des modifications de longueur de flamme. Par la suite, cette étude a été développée pour des conditions aérodynamiques diverses (Min and Baillet (2012)). Mastorakos et al. (1995) ont analysé les limites d'extinction de flammes turbulentes à contre courant pour des injections de réactifs dilués avec des produits de combustion. Dans cet article, les auteurs montrent que la stabilisation de la combustion n'est assurée que si la température des réactifs augmente avec la dilution. De plus, lorsque la température de l'air vicié dépasse une certaine température, un phénomène d'auto-allumage apparaît, et la combustion est maintenue, même pour des étirements très forts. Ce dernier point corrobore les conclusions de Darabiha and Candel (1992), qui ont observé des comportements similaires sur des flammes hydrogène-air pour lesquelles ils ont fait varier la température du comburant. Enfin, Riechelmann et al. (2002) ont étudié l'influence de la dilution des injections d'air et de fuel par différents diluants (Ar, N_2 et CO_2) sur les limites d'extinction de flamme méthane-air de diffusion. Ils sont parvenus à discriminer les effets d'augmentation de température des réactifs des effets de la dilution et à démontrer l'importance de la composition du diluant sur la structure de flamme.

Bien que les études mentionnées n'aient pas toutes été conçues pour simuler le processus de combustion sans flamme, elles permettent de mettre en avant la stabilisation du processus de combustion lorsque les réactifs sont dilués et préchauffés.

L'analyse de la stabilisation de la combustion MILD dans des configurations complexes (confinement, pertes thermiques, haut nombre de Reynolds...) s'est principalement focalisée sur l'influence du taux de recirculation K_v introduit par [Wunning and Wunning \(1997\)](#). Ces derniers estiment que la combustion sans flamme n'est stabilisée que pour des températures de fonctionnement suffisamment élevées (plus de 1100 K pour une combustion méthane-air) et pour un taux de recirculation supérieur à $K_v = 0,3$. Hors de cette zone, la combustion est considérée comme classique et stable pour des taux de recirculation inférieurs à 0,5, alors qu'elle est dite instable (combustion par bouffées, extinction de flamme, etc.) pour des valeurs de K_v intermédiaires. Pour caractériser la transition entre une combustion classique et un régime de combustion sans flamme (basée sur l'apparence visuelle de la flamme), [Cavigiolo et al. \(2003\)](#) ont conduit une étude expérimentale sur un brûleur cylindrique confiné. Ils ont fait varier le taux de recirculation en modifiant la température de l'air injecté ou en diluant le jet d'air principal par de l'azote. Pour une combustion au méthane, les auteurs ont montré qu'un régime de combustion MILD s'établissait pour des valeurs de K_v dépassant 4 pour des températures de fonctionnement de plus de 1100 K. [Effuggi et al. \(2008\)](#) ont étendu cette étude à l'utilisation de différents combustibles. Notons enfin que comme le taux de recirculation K_v est lié au rapport de quantités de mouvements du combustible et du comburant injectés au sein d'une chambre de combustion, certains auteurs ont discuté de la stabilité de la combustion sans flamme en fonction de ce rapport ([Derudi et al. \(2007\)](#), [Szegö et al. \(2008\)](#)).

En définitive, cette partie a dressé un rapide état de l'art des connaissances actuelles sur les mécanismes de stabilisation d'un régime de combustion sans flamme. Bien qu'aucune conclusion franche n'ait été à ce jour formulée, les études disponibles dans la littérature montrent l'importance de certains paramètres qu'il sera essentiel de prendre en compte pour simuler fidèlement ce régime de combustion :

- la dilution des réactifs et la composition/température du diluant ;
- l'aérodynamique des jets et de la chambre ;

1.4 Problématiques de modélisation

Le régime de combustion MILD reste encore mal compris dans des configurations complexes. En effet, il subsiste des zones d'ombre sur les mécanismes de stabilisation de ce régime ou encore sur sa structure de flamme locale. Cela pose d'importants problèmes de modélisation que nous décrirons dans cette section.

La figure 1.4 illustre les différentes étapes d'un processus de combustion sans flamme typique. Pour chacun des points représentés dans la figure, diverses problématiques de modélisation peuvent intervenir :

1. Principe clé de l'établissement et de la stabilisation en combustion MILD,

la dilution des réactifs par des produits de combustion pose des problématiques majeures. Tout d'abord, une prédiction fiable des zones de recirculation et leur interaction avec les réactifs frais est essentielle. Par conséquent, une modélisation fiable du processus de combustion, mais aussi du mélange au sein de la chambre est primordiale. Sur ce dernier point, il est intéressant de noter que les simulations avec un formalisme RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*) ont montré de fortes limitations sur la prédiction de la dilution du jet de combustible (Mancini et al. (2007)). Des études se sont focalisées sur ce problème de manière analytique (Grandmaison et al. (1998)) ou expérimentale (Yimer I. and E.W. (2001)). De plus, deux phénomènes parallèles apparaissent lors de la recirculation des produits de combustion. La recirculation peut entraîner une dilution simple, un changement de composition, et ce, sans apport de chaleur. La dilution des réactifs par des gaz brûlés peut cependant se faire avec un apport d'énergie qui changera la réactivité du mélange. Ce couplage est extrêmement problématique puisqu'on ne sait pas *a priori* dans quel ordre se font ces processus. De plus, ce phénomène est couplé aux pertes thermiques qui vont largement influencer l'histoire énergétique d'une poche de gaz brûlé. En définitive, la dilution peut avoir des effets multiples selon le taux de recirculation et de pertes thermiques. Il sera donc de première importance de pouvoir caractériser l'ensemble des trajectoires chimiques possibles pour les différents cas de figure.

2. La majorité des systèmes opérants en mode de combustion MILD, à l'exception des turbines à gaz, fonctionne avec des injections de combustible et de comburant dissociées. Les jets de combustible et de comburant ne se mélangent *a priori* qu'après avoir été dilués. Cela introduit une difficulté supplémentaire dans la mesure où un modèle de combustion turbulente adapté devra prendre en compte un mélange entre trois fluides (combustible, comburant, diluant).
3. Puis, la combustion des réactifs prend place. Le modèle de combustion turbulente est censé reproduire l'évolution des grandeurs thermo-chimiques d'intérêts, comme par exemple la température ou les polluants.
4. Les systèmes de combustion opérants en régime de combustion sans flamme ont pour objectif de transmettre à une charge un maximum de la chaleur des gaz chauds. Dans le cadre du projet CANOE, on s'intéresse en particulier à la faisabilité et la viabilité d'un régime de combustion MILD pour des chaudières (parois refroidies par un fluide caloporteur). Les pertes thermiques par conducto-convection et rayonnement y sont très importantes. Par conséquent, une bonne prédiction des champs de température, de polluants, mais aussi de la stabilité du régime de combustion est conditionnée par une bonne prédiction des pertes thermiques aux parois et par

rayonnement.

5. Après combustion des réactifs, une portion des gaz brûlés, qui peuvent avoir été affectés par différents degrés de pertes thermiques, recirculent en amont de l'écoulement. À nouveau, l'aérodynamique de l'écoulement doit être suffisamment bien décrite pour capturer le bon taux de recirculation. Ce dernier dépendra de la quantité de mouvement des réactifs injectés et de la géométrie de la chambre.
6. Après avoir effectué un ou plusieurs passages par les étapes 1 à 5, les mélanges gazeux sortent de la chambre de combustion. Notons que pour obtenir un régime de combustion sans flamme, certaines configurations favorisent le mélange entre les réactifs et les produits de combustion en ayant les sorties sur la même paroi que les injections : c'est le principe des "Stagnation Point Reverse Flow Combustors" ([Gopalakrishnan et al. \(2007\)](#)).

Les différentes étapes présentées dans la figure 1.4 montrent que la combustion sans flamme est un phénomène complexe et multi-physiques. La différence fondamentale avec un régime de combustion turbulente *classique* en terme de problématiques de modélisation vient de la dilution et de ses effets sur l'évolution de la température et des espèces (dont les polluants). Nous mettons en avant dans les sous-paragraphes suivants une analyse préliminaire des difficultés inhérentes à la bonne prédiction des effets de la dilution des réactifs.

1.4.1 Importance d'une cinétique chimique détaillée

L'utilisation de schémas cinétiques globaux dans le cadre de la simulation de configurations complexes est séduisante, puisqu'elle ne demande que très peu de ressources informatiques. Cependant, les modèles classiques de combustion basés sur une chimie infiniment rapide ou un équilibre thermodynamique sont incapables de reproduire la combustion sans flamme : la prise en compte d'une chimie hors équilibre y est fondamentale ([Orsino et al. \(2001\)](#), [Kumar et al. \(2007\)](#)). En fait, le mélange se fait aussi bien par mélange turbulent dans les zones de forts cisaillements et par diffusion que par recirculation des gaz brûlés, ce qui implique des réactions chimiques retardées dues aux effets de non-équilibre et ce, même dans le cas d'un fort préchauffage de l'air. De plus, l'auto-allumage ne peut pas être pris en compte avec une chimie infiniment rapide : c'est la raison pour laquelle les modèles de chimie à l'équilibre ou de flammelettes stationnaires prédisent une combustion trop précoce dans l'enceinte d'un four à combustion sans flamme et ne captent pas la zone de réaction localisée. La prédiction des polluants, et en particulier des oxydes d'azote, impose aussi la prise en compte d'une chimie hors-équilibre. Une émission faible de *NO* est en effet obtenue si la combustion ne génère pas de températures avoisinant la température adiabatique de flamme de la richesse globale de la

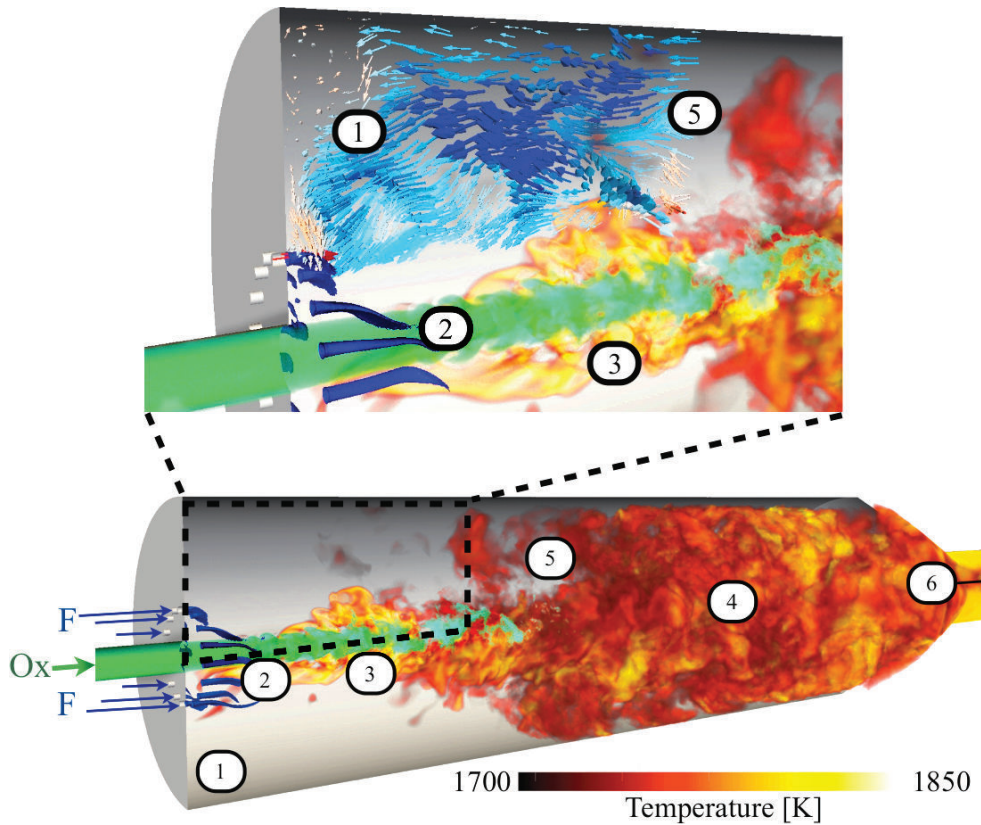


FIGURE 1.4 – Simulation aux grandes échelles de la turbulence issue de la thèse de la configuration à parois refroidies de *Verissimo et al. (2011)*, qui fonctionne en régime de combustion MILD. Il s'agit d'une combustion méthane-air pour laquelle la température adiabatique de combustion à la stœchiométrie est de 2400 K. Sont représentés : les iso-surfaces de fraction de mélange $Z = 0,8$ en bleu représentant la pénétrations des jets de méthane ; un rendu en volume de la fraction molaire d' O_2 ($X_{O_2} \in [0,19 ; 0,21]$) en vert pour représenter la pénétration de l'air dans la chambre ; le rendu en volume des températures les plus élevées ($T \in [1700 \text{ K} ; 1850 \text{ K}]$). La partie agrandie proche du système d'injection présente aussi les vecteurs vitesse colorés par la vitesse axiale sur une coupe.

- 1 : Dilution des réactifs frais par des produits de combustion ;
- 2 : Mélange entre les jets d'oxydant et de combustible, dilués ou non ;
- 3 : Réaction entre les réactifs ;
- 4 : Diminution de la température des gaz brûlés (rayonnement, conducto-convection aux parois) ;
- 5 : Recirculation des produits de combustion ;
- 6 : Sortie des gaz brûlés.

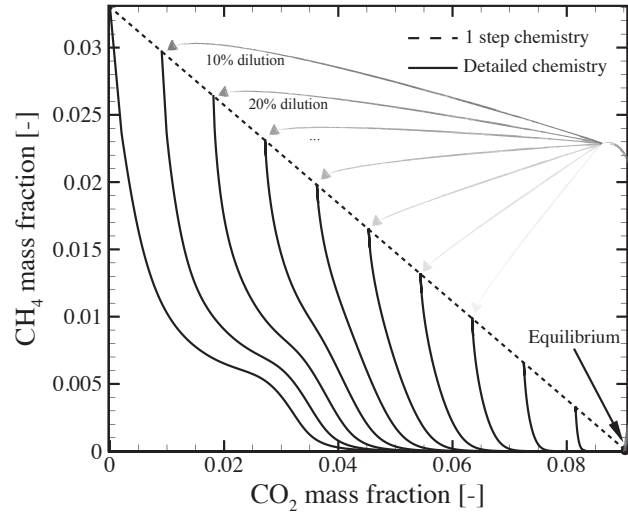


FIGURE 1.5 – Trajectoires chimiques du méthane en fonction du dioxyde de carbone pour l'équilibre thermochimique, une chimie une étape et une chimie détaillée pour différents niveaux de dilution. Le diluant est constitué d'espèces à l'équilibre et la richesse du mélange est ici fixée à 0,58. Ces trajectoires sont calculées le long de "courbes en S'' " issues de calculs laminaires de flammes à contre-courant.

chambre.

Afin de préciser l'importance d'une chimie détaillée dans l'évolution des espèces chimiques lorsqu'un mélange est soumis à de la dilution, des calculs de flammes laminaires sont présentés ici pour : une cinétique chimique complexe, une chimie mono-étape et une chimie infiniment rapide (équilibre des grandeurs thermochimiques). Le cas de référence, où une chimie détaillée est calculée, nous est fourni par les solutions des équations stationnaires de flammes 1D laminaires de diffusion pour lesquelles on a ajouté divers taux de diluant aux réactifs. Dans ce cas, les trajectoires chimiques du méthane en fonction du dioxyde de carbone sont multiples : le point de départ de la combustion est modifié en fonction de la dilution, et plusieurs valeurs de fraction massique de CH_4 sont possibles pour une fraction massique de CO_2 (Fig. 1.5). Pour une chimie à une étape, une unique trajectoire est possible et aucun effet de la dilution n'est par conséquent observable. Enfin, dans le cas d'un calcul d'équilibre, un point unique dans l'espace des phases est obtenu. Ces différences entre les trois approches impliquent que le cas d'une chimie complexe est le seul à même de décrire un effet de la dilution des réactifs par des gaz brûlés en terme de trajectoires chimiques. Cela peut être d'une importance capitale pour capturer avec précision la dissociation des réactifs, et donc la position de la zone de réaction, mais aussi pour prédire la formation des polluants tels que le CO ou les NO_x .

Cette comparaison simple permet de conclure que pour capturer l'influence de la dilution sur l'évolution des espèces chimiques, la prise en compte d'une

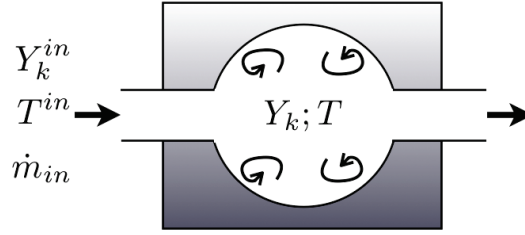


FIGURE 1.6 – Schéma d'un réacteur mélangé 0D.

chimie détaillée est nécessaire. Il pourrait être soutenu qu'une chimie réduite avec suffisamment d'étapes peut être satisfaisante. Cependant, une étude récente a montré que l'ajout d'étapes supplémentaires pour prendre en compte l'évolution du CO ne donne pas de différences significatives avec une réaction globale (Kim et al. (2008))².

Ce constat est à la base de la solution proposée dans ce manuscrit, qui fera un compromis entre la prise en compte d'une chimie détaillée et le coût de calcul associé.

1.4.2 De l'influence de la dilution sur les trajectoires chimiques

Pour aller plus loin dans cette analyse préliminaire et essayer de déterminer s'il est important de prendre en compte les diverses trajectoires chimiques, on étudie l'influence de la dilution sur les délais d'auto-inflammation d'un mélange dans un réacteur mélangé.

Jusque-là, on a considéré les effets de la dilution sur une cinétique complexe, et pour un niveau de dilution fixé. Cela revient à supposer que dans la combustion sans flamme, le mélange entre les gaz frais et brûlés est terminé avant que la réaction ne démarre. Dans un cas plus général cependant, dilution et réaction peuvent intervenir simultanément. Cette complexité supplémentaire peut être illustrée par un calcul de réacteur mélangé auquel on associe un temps de mélange. On étudie ici le cas d'une poche de gaz frais se faisant diluer par des gaz brûlés à l'équilibre et ce, pour des temps de mélange différents.

Le schéma du réacteur 0D et des grandeurs utilisées dans les équations est donné en Fig. 1.6. Le débit massique d'entrée \dot{m}_{in} intervient dans le calcul du temps de mélange τ , qui est aussi relié à la densité du mélange et au volume V du réacteur. Le mélange initial (espèces Y_k , température T) correspond aux conditions de la flamme de Cabra (Cabra et al. (2002)) pour une fraction de mélange de 0,01. Le diluant (espèces Y_{in} , température T_{in}) est composé de ce même mélange à l'équilibre.

2. Notons que cette conclusion n'est pas franche. Elle pourrait être revue si la communauté de chimistes/cinéticiens fournit de nouveaux mécanismes réduits adaptés.

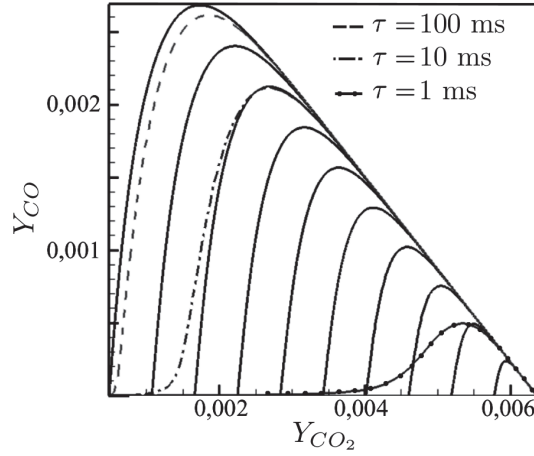


FIGURE 1.7 – Évolution de Y_{CO} en fonction de Y_{CO_2} lors d'un auto-allumage dans un PSR pour différents temps de résidence τ_{res} . Les trajectoires calculées à partir de réacteurs 0D à niveaux de dilution fixés sont illustrées en traits pleins noirs et le pas de dilution entre chaque courbe est de 10%. Le mélange correspond aux mêmes conditions que pour la figure 1.6.

Les équations régissant l'évolution des espèces Y_k sont alors données par :

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{1}{\tau} (Y_k^{in} - Y_k) + \dot{\omega}_k \quad (1.1)$$

$$\tau \equiv \frac{\rho V}{\dot{m}_{in}} \quad (1.2)$$

où ρ est la densité, Y_k la fraction massique de l'espèce k et $\dot{\omega}_k$ le taux de réaction de l'espèce k . Ces équations permettent de décrire la compétition entre la réaction chimique (terme $\dot{\omega}_k$) et la dilution des réactifs (terme $\frac{1}{\tau}(Y_k^{in} - Y_k)$).

La résolution de ces équations pour diverses prescriptions du temps de mélange τ donne des résultats forts différents (Fig. 1.7). Lorsque le temps de mélange est important (cas $\tau = 100$ ms), la trajectoire d'une espèce chimique (ici le CO) converge vers l'espace attracteur et, dans une moindre mesure (cas $\tau = 10$ ms), sur les trajectoires définies par des niveaux de dilution fixés. Par contre, lorsque τ est faible (cas $\tau = 1$ ms), la trajectoire dévie fortement de celles issues de calculs à dilution fixée, et ne rattrape que tardivement l'espace attracteur. Par conséquent, la cinétique chimique cesse à nouveau d'être restreinte à une unique trajectoire. Cela impose la prise en compte d'un degré de complexité supplémentaire pour pouvoir capturer ces évolutions. De plus, on note que les émissions maximales de CO sont diminuées dans le cas $\tau = 1$ ms : la prise en compte de trajectoires 2D complexes peut avoir un impact considérable sur la prédiction des polluants.

Bien que les trajectoires chimiques ne soient pas préalablement connues dans le régime de combustion MILD, ces calculs mettent en relief la nécessité de dissocier l'avancement de réaction du niveau de dilution d'un mélange. À défaut

de connaissances suffisantes, la description des effets de dilution à enthalpie fixée est primordiale. Aussi, un des objectifs de ce travail de thèse visera à décrire ce processus et à essayer d'en quantifier l'importance dans des configurations complexes opérants en régimes de combustion sans flamme.

1.5 État de l'art en modélisation de la combustion diluée

Maintenant que les problématiques de modélisation sont exposées, nous nous attardons ici sur un état de l'art de la modélisation de la combustion sans flamme. Cela permettra de dégager la nécessité de développer un nouveau modèle de combustion turbulente adapté.

1.5.1 Configurations non-confinées

Pour s'affranchir de la complexité de modélisation inhérente à la combustion sans flamme, certaines études se sont focalisées sur des configurations simplifiées permettant de négliger certains phénomènes physiques comme une dilution variable des réactifs, ou encore les pertes thermiques.

La flamme de Cabra (Cabra et al. (2002); Cabra et al. (2005); Gordon et al. (2007)) permet d'étudier, à dilution fixée (la dilution est imposée en entrée : le combustible et le comburant sont effectivement viciés au préalable), les effets d'auto-allumage sur la stabilisation de la flamme et de diffusion en aval de la flamme, en négligeant les effets de pertes thermiques. Bien que cette flamme ne soit pas représentative du régime de combustion sans flamme, elle constitue un premier pas dans l'étude des caractéristiques de la zone de réaction pour des mélanges dilués par des produits de combustion.

De nombreux articles sont dédiés à la simulation de cette flamme. Par exemple, Vicquelin (2010) a développé un modèle de combustion turbulente adapté à cette configuration qui permet de reproduire correctement la hauteur de *lift-off* de la flamme dans le cas hydrogène-air à l'aide d'une tabulation des grandeurs thermo-chimiques. Pour cette configuration, la prise en compte fine de l'auto-allumage d'un mélange est essentielle pour prédire correctement les champs d'espèces et de température.

Une autre configuration utilisée pour étudier la combustion MILD est le JHC (Jet in Hot Coflow) (Dally et al. (2002); Medwell et al. (2007); Medwell et al. (2008)). Cette expérience présente une injection d'air et de combustible (méthane-hydrogène) séparées par un coflow d'air chaud vicié par des gaz brûlés. Pour cette configuration, une série de mesures détaillées de la température et des concentrations d'espèces ont été faites pour différentes concentrations en oxygène en entrée de système, différents nombres de Reynolds pour l'injection de combustible et de comburant et pour des compositions de fuel différentes. Encore une fois, cette expérience permet de s'affranchir des effets de pertes ther-

miques et de la recirculation des produits de combustion en imposant en entrée du coflow divers niveaux de dilution. Elle correspond toutefois aux conditions de forte dilution de l'air que l'on retrouve en combustion sans flamme.

Comme pour la configuration de [Cabra et al. \(2002\)](#), les articles traitants de la modélisation et de la simulation du JHC sont nombreux ([Kim et al. \(2005\)](#), [De et al. \(2011\)](#)). Pour ne prendre que les modèles de flammelles en exemple, on peut citer l'étude de [Christo and Dally \(2005\)](#), qui ont conduit des simulations RANS du brûleur et ont évalué la précision de différents modèles de turbulence, de schémas cinétiques et de modèles de combustion comme le modèle de flammelles stationnaires de [Peters \(1984\)](#), l'EDC ([Magnussen and Hjertager \(1977\)](#)) ou un modèle à transport de fonctions de densité de probabilités. Ils font état de l'incapacité du modèle de flammelles stationnaires à capturer la structure de flamme dans cette configuration. Très récemment cependant, [Ihme et al. \(2012\)](#) ont mis en place une méthode de tabulation de flammelles stationnaires permettant de prendre en compte les variations de composition des réactifs dues au coflow d'air vicié. Cette approche a été validée par des simulations aux grandes échelles de la turbulence (LES), et a permis de montrer la viabilité d'une approche type flammelle pour une configuration fortement diluée.

1.5.2 Configurations confinées

Dans des configurations complexes (système confiné, géométrie complexe, injections multiples, ...), la mise en place de systèmes de mesures est délicate, notamment pour les mesures optiques en raison du fort rayonnement des parois. Beaucoup d'études numériques sur le régime de combustion MILD en configuration complexe souffrent de cette limitation et ne proposent pas de comparaison avec des données expérimentales. Toutefois, trois aspects fondamentaux couplés peuvent être dégagés pour une simulation d'un régime de combustion sans flamme dans des conditions semi-industrielles ou industrielles : l'aérodynamique de l'écoulement et la modélisation du mélange, les pertes thermiques aux parois et par rayonnement, et enfin la cinétique chimique et les interactions chimie-turbulence.

1.5.2.1 Dynamique des fluides et mélange

La description du mélange, et *a fortiori* de l'aérodynamique d'une chambre de combustion, est primordiale à l'obtention de résultats cohérents. Il est effectivement impensable de valider un modèle de combustion ou de tirer quelque conclusion que se soit si la composition à un point de calcul n'est pas la même que dans la réalité. Aussi évident que cela puisse paraître, il s'agit cependant d'un problème très important dans la mesure où un grand nombre d'expériences ne présentent aucune donnée sur les champs de vitesses et ses fluctuations. De plus, en combustion MILD, la prédiction des zones de recirculation

et des impacts de la dilution des réactifs par les gaz brûlés est tributaire de la modélisation de la turbulence.

Néanmoins, une description de la turbulence fine via des approches LES ou DNS est prohibitive dans un cadre industriel. C'est la raison pour laquelle la très large majorité des travaux de simulation numérique en combustion sans flamme est effectuée avec une approche RANS : on ne résout aucune échelle de la turbulence, on modélise l'évolution des champs moyens de façon stationnaire. Le modèle le plus utilisé est le modèle $k - \epsilon$ standard pour lequel on décrit la viscosité turbulente μ_t introduite dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement moyennée au sens de Favre via l'énergie cinétique turbulente k et sa dissipation ϵ Jones and Launder (1972) :

- Coelho and Peters (2001)
- Mancini et al. (2002)
- Yang and Blasiak (2005)
- Kumar et al. (2007)
- Kim et al. (2007)
- Mancini et al. (2007)
- Parente et al. (2008)
- Schütz et al. (2008)
- Schaffel et al. (2009)
- Khazaei et al. (2009)

Un des problèmes majeurs du modèle $k - \epsilon$ est son incapacité à reproduire correctement les jets ronds. Pour pallier cette déficience, le modèle $k - \epsilon$ Realisable (encore appelé RNG ou $k - \epsilon$ modifié) a été développé. Il est en fait possible de modifier les constantes de modélisation du modèle standard pour retrouver des comportements corrects pour les jets ronds. La liste des travaux utilisant le modèle $k - \epsilon$ Realisable est donnée ici :

- Mancini et al. 2007
- Dally et al. 2004
- Galletti et al. 2007
- Galletti et al. 2009

Aucun modèle n'utilisant une description de la turbulence via des modèles plus élaborés (type Reynolds Stress Models) ou de simulation aux grandes échelles n'a été effectué jusqu'à ce jour pour des fours opérant en régime de combustion MILD. Il est cependant intéressant de noter qu'un calcul LES de combustion sans flamme a été effectué sur une turbine à gaz (Duwig et al. 2007,2008). En effet, l'intérêt de ces configurations-là est que les vitesses d'injection sont extrêmement élevées et que les dimensions géométriques y sont très petites. Cela induit des temps convectifs faibles, mais aussi des maillages bien moins volumineux à générer et à traiter. L'inconvénient majeur de cette expérience numérique est son manque de comparaison avec des données expérimentales autres qu'en sortie de chambre.

1.5.2.2 Pertes thermiques par rayonnement

Le but d'un brûleur industriel est de transmettre un maximum de la chaleur des gaz brûlés. La combustion n'est donc pas adiabatique et les gaz brûlés perdent de l'enthalpie aux parois et par rayonnement. La bonne prédiction du champ de température est en partie tributaire d'une modélisation correcte du rayonnement. L'approche la moins coûteuse est de modéliser le rayonnement sous l'hypothèse de limite optiquement mince avec une approximation de propriété de gaz gris pour n'avoir à ajouter dans l'équation de conservation de l'énergie qu'un terme de la forme $\sigma(T^4 - T_{ref}^4)$. C'est l'approche utilisée par [Coelho and Peters \(2001\)](#). Une approche plus rigoureuse et précise est de résoudre l'équation de transfert radiatif pour calculer le flux radiatif. Les modèles DOM, pour *Discrete Ordinates Model* ([Fiveland \(1984\)](#)), et DTM, pour *Discrete Transfer Method* ([Lockwood and Shah \(1981\)](#)) sont généralement utilisés puisqu'ils présentent un bon compromis entre le modèle le plus simple et les modèles les plus élaborés, mais très coûteux, basés sur des algorithmes de Monte-Carlo. En combustion sans flamme, les simulations réalisées ont le plus souvent été effectuées avec un modèle DOM ou DTM :

- [Coelho and Peters 2001](#)
- [Yang and Blasiak 2005](#)
- [Kim et al. 2005](#)
- [Galletti et al. 2007](#)
- [Parente et al. 2008](#)
- [Schaffel et al. 2009](#)
- [Galletti et al. 2009](#)

1.5.2.3 Modèles de combustion turbulente

Pour la simulation de configurations réalistes, les modèles déjà implantés dans les codes commerciaux sont très utilisés. En effet, leur utilisation est facile à mettre en œuvre, les temps de calculs s'avèrent courts devant des modèles académiques plus fondamentaux et l'expérience développée sur ces modèles est déjà conséquente. Ainsi, les modèles EBU (Eddy Break-Up) pour la combustion prémélangée et EDM (Eddy Dissipation Model) ([Magnussen and Hjertager \(1977\)](#)) pour la combustion non-prémélangée sont largement utilisés dans un cadre industriel. Le modèle EDC (Eddy Dissipation Concept) permet d'inclure une cinétique détaillée, mais pour un coût CPU nettement plus important que celui du modèle EDM. Une alternative utilisée par [Coelho and Peters \(2001\)](#) est d'utiliser un modèle de flammelette pour lequel l'interaction chimie-turbulence est intégrée via des fonctions de densité de probabilité présumée. [Dally et al. \(2004\)](#), ont mis en avant la nécessité de prendre en compte une chimie hors équilibre pour le calcul de flammelettes. À partir de 2005 cependant, aucune simulation numérique de combustion MILD ne s'est faite avec un modèle de flammelette, et ce jusqu'en 2012, avec les travaux de [Ihme et al. \(2012\)](#). Une large majorité des simulations a été faite avec des modèles de combustion EDM

ou EDC. Les autres modèles de combustion ayant été utilisés dans des configurations industrielles restent cependant fondamentalement proches de l'EDC. Mancini et al. (2007) proposent un modèle de réseau de réacteurs parfaitement mélangés pour décrire la combustion au sein de la chambre. Schütz et al. (2008) développent un modèle de combustion turbulente pour lequel un réacteur partiellement mélangé est calculé pour chaque cellule de calcul et pour chaque pas de temps (la simulation est instationnaire). Pour ce faire, ils utilisent un maillage dynamique se raffinant aux zones de dégagement de chaleur pour éviter des coûts de calculs prohibitifs. L'interaction chimie-turbulence est traitée de manière semblable au modèle EDC, le temps de réaction τ_{mix} en entrée étant cependant recalculé comme une moyenne géométrique des temps caractéristiques des échelles de Taylor et de Kolmogorov. Clairement, les modèles de flammelette n'ont été que très peu utilisés pour simuler des configurations réalistes de combustion sans flamme.

L'engouement pour les modèles EDM ou EDC pour simuler la combustion MILD est lié au fait que ces modèles ne font pas l'hypothèse que la chimie est rapide devant les temps caractéristiques de mélange. En combustion MILD, la combustion est *a priori* contrôlée par la cinétique chimique. Autrement dit, le nombre de Damköhler ($Da = \frac{\tau_{turbulent}}{\tau_{chimie}}$) est faible devant l'unité dans la zone de réaction primaire. Cette caractérisation reste cependant hypothétique, car aucune étude n'a réussi à déterminer la structure de flamme dans la zone de réaction localisée en combustion sans flamme. Les calculs RANS ne sont pas suffisants pour étudier le Damköhler local, puisqu'on y calcule que les champs moyens stationnaires. Galletti et al. (2007) montrent cependant que le champ moyen de température et la zone de réaction primaire sont directement reliés à des Damköhler moyens inférieurs à l'unité. L'hypothèse de combustion limitée par une cinétique chimique lente est *a priori* plus réaliste que l'hypothèse d'une chimie rapide devant les temps turbulents (régime de flammelette). Une étude approfondie du Damköhler local est cependant nécessaire à la connaissance du régime de combustion dans la zone de réaction primaire. Si les Damköhler sont localement faibles, le régime de combustion se rapproche des conditions d'un réacteur partiellement mélangé. C'est en se basant sur une étude du Damköhler local moyen que Schütz et al. (2008) proposent un modèle de combustion turbulente pour lequel on calcule de manière instationnaire un PaSR à chaque cellule de calcul.

En combustion MILD, malgré un manque fréquent de validation par des données expérimentales ou par des simulations LES ou de DNS, l'intérêt de modèles "bas-Damköhler" est de pouvoir fournir une référence de calcul incluant tous les processus en jeu lors de la combustion sans flamme : chimie hors équilibre (EDC avec chimie détaillée), effet des recirculations et dilution des réactifs ainsi que pertes thermiques.

1.5.2.4 Conclusions sur les limitations des solutions actuelles

Depuis sa découverte dans les années 80, beaucoup de progrès ont été faits sur la modélisation du processus de combustion MILD. Cependant, il n'existe pas encore de consensus sur l'approche de modélisation à choisir pour fournir des prédictions quantitatives de la combustion sans flamme dans tout le domaine de combustion. Face à cela, nous proposerons dans ce manuscrit une nouvelle approche de modélisation prenant en compte différents points :

- les effets d'une cinétique chimique détaillée ;
- la dilution des réactifs ;
- les pertes thermiques.

Pour valider avec confiance l'approche développée et tenter d'en mesurer les capacités prédictives, nous attacherons une importance particulière à décrire son comportement dans des flammes laminaires soumises à différents niveaux de dilution et/ou de pertes thermiques. Nous emploierons aussi des simulations LES pour valider le modèle de combustion turbulent en tirant parti d'analyses expérimentales récentes fournissant des données sur la température et les espèces dans l'enceinte des systèmes étudiés.

1.6 Structures de flamme en combustion MILD

Le modèle de combustion doit fournir les termes sources chimiques intervenant dans les équations de conservation des espèces. Pour ce faire, il est tout d'abord essentiel de déterminer quelles hypothèses de modélisation peuvent être effectuées au niveau de la structure locale de flamme en combustion MILD. C'est l'objet de cette section.

Comme le font remarquer [Poinso and Veynante \(2005\)](#), la classification des régimes de combustion non-prémélangés en fonction d'échelles caractéristiques n'est pas triviale et fait l'objet de controverses. En combustion sans flamme, diverses hypothèses ont été formulées sur la structure de flamme. Nous passerons ici en revue les différentes approches, avant de formuler les hypothèses fondatrices du modèle de combustion développé dans cette thèse.

1.6.1 État de l'art - Applicabilité du régime de flammelette en combustion MILD

La plupart des systèmes de combustion industriels présentent différentes structures de flamme locales et différents nombres de Damköhler locaux. Cela peut mener à des phénomènes localisés d'extinction et d'allumage de mélanges. Aucune étude expérimentale ou numérique n'est parvenue à décrire avec précision la dynamique moléculaire d'un régime de combustion sans flamme. Pour ce

faire, il faudrait des expériences dédiées, mais la mise en œuvre d'expériences précises dans un four à combustion sans flamme reste une tâche très difficile. Une autre alternative serait de réaliser une simulation directe (DNS) représentative d'une combustion sans flamme. Des études commencent à s'y intéresser ([van Oijen \(2011\)](#)), mais elles ne fournissent pas encore suffisamment d'informations quant aux structures de flammes rencontrées dans des configurations complexes de combustion MILD.

Malgré tout, la combustion sans flamme a souvent été comparée à un réacteur parfaitement mélangé ([de Joannon et al. \(2005\)](#), [de Joannon et al. \(2007\)](#), [Sabia et al. \(2007\)](#)). Sous cette hypothèse, la combustion est alors supposée contrôlée par auto-allumage local du mélange et le champ de température est homogène comparé à une combustion classique. Néanmoins, la structure de flamme locale n'est pas prise en compte : les phénomènes diffusifs ne sont pas intégrés et il ne peut y avoir de propagation d'un front de flamme. Bien que l'augmentation de température dans la zone de réaction soit faible en combustion MILD, cette hypothèse est difficilement valide dans toute une configuration, et notamment dans les régions proches des systèmes d'injection, où des vitesses d'injection très élevées, et donc de très faibles temps de résidence et de forts taux de dissipation scalaire peuvent exister ([Dally et al. \(2004\)](#)).

Ce constat est aussi fait par [Yokomori et al. \(2007\)](#). Bien que l'on estime souvent que la zone de réaction en combustion MILD soit proche d'un réacteur mélangé (zone de réaction épaisse), ces auteurs ont mis en avant expérimentalement de forts pics de réaction impliquant l'existence de zones de réaction fines. Ils ont aussi montré que ces zones de réaction changeaient rapidement dans le temps et dans l'espace. Ces résultats sont aussi avancés dans une étude expérimentale très récente de [Duwig et al. \(2012\)](#).

En utilisant des simulations numériques RANS, [Awosope and Lockwood \(2005\)](#) ont classifiés trois applications de systèmes opérants en régime combustion MILD dans un diagramme de Borghi : un four de laboratoire, un prototype de turbine à gaz de post-combustion et un four *HiTAC* semi-industriel. Ce diagramme positionne les régimes de combustion en fonction d'échelles caractéristiques³. [Awosope and Lockwood](#) ont montré que pour les trois configurations, la combustion s'initiait dans le régime de flamme épaissie mais suivait des chemins différents par la suite (Fig. 1.8). Pour le four de laboratoire et la turbine, la combustion a principalement lieu dans le régime de *Perturbed Flamelet Regime* (régime de flammelette perturbée), alors que le four semi-industriel opère en régime de flammelette. En terme d'interactions entre la turbulence et la cinétique chimique, cela implique que dans les deux premiers cas, la turbulence perturbe la structure de flamme locale, mais qu'elle influence moins la cinétique chimique dans le cas du four *HiTAC*.

Ces informations donnent un aperçu de la difficulté de caractériser la combustion sans flamme au niveau de sa dynamique moléculaire. Cependant, elles

3. Ce type de diagramme est normalement adapté à l'étude de flammes de prémélange

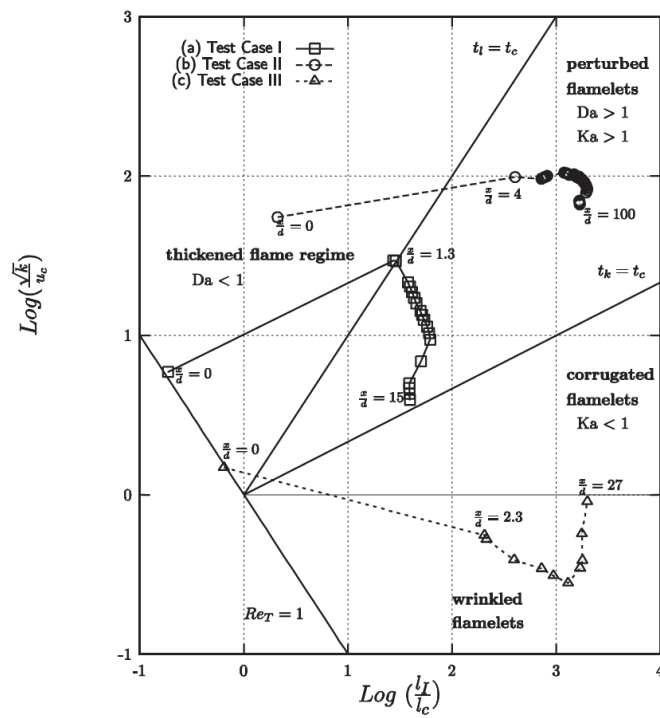


FIGURE 1.8 – Régimes de combustion turbulente dans un diagramme de Borghi pour les simulations de trois différentes configurations opérant en régime de combustion sans flamme *Awosope and Lockwood (2005)*.

mettent en avant la diversité des structures de flammes locales dans ce type de combustion : des zones de réaction fines de type flammelette peuvent coexister dans une chambre de combustion avec des zones de réaction plus épaisses, proches de réacteur parfaitement mélangées.

1.6.2 Hypothèse de modélisation adoptée - Description générale de l'approche

Face à la méconnaissance de la structure locale de la combustion en régime MILD, des hypothèses de modélisation s'imposent. De nombreux articles ont fait état de l'incapacité des modèles de flammelettes "classiques" à capturer les processus en jeu pour la combustion MILD ([Christo and Dally \(2005\)](#), [Rebola et al. \(2010\)](#)). Les limitations majeures du modèle de flammelette introduit par [Peters \(1984\)](#) peuvent être listées ci-après :

- pas d'extinction et d'allumage possible - les mélanges sont considérés comme étant toujours en réaction ;
- pas de prise en compte des effets de la dilution - les réactifs ne sont caractérisés à l'état initial que par un unique scalaire passif, la fraction de mélange, qui ne considère le mélange qu'entre une seule composition de comburant et de combustible.

Ces deux points s'avèrent trop limitant pour la simulation de la combustion MILD. Pourtant, l'utilisation de flammelettes non-prémélangées pour décrire localement la combustion en régime de combustion MILD a été récemment remise en avant par [Ihme and See \(2011\)](#). Une approche similaire sera retenue dans ce travail : on considérera que la cinétique chimique peut localement être représentée par une collection de flammelettes à contre-courant stationnaires. En particulier, nous emploierons une approche FPV (Flamelet Progress-Variable) pour pouvoir émuler l'extinction ou l'allumage de mélange.

Cette hypothèse, qui constitue le socle des développements apportés dans cette thèse, doit être discutée. En particulier, deux points capitaux doivent d'ors et déjà être évoqués⁴ :

1. la stationnarité des équations de flammelettes ;
2. leur capacité à reproduire l'influence de la dilution sur la structure de flamme.

En étudiant l'effet de variations stochastiques du nombre de Damköhler dans un réacteur homogène, [Oberlack et al. \(2000\)](#) ont montré que lors de la disparition des points singuliers de la courbe en S (taux de dissipation scalaire d'allumage et d'extinction), des fluctuations du nombre de Damköhler entraînent une

4. Implicitement, cette hypothèse implique aussi que les phénomènes d'auto-allumage ou de propagation de flamme seront de moindre importance dans le cas d'une combustion sans flamme à injection non-prémélangée.

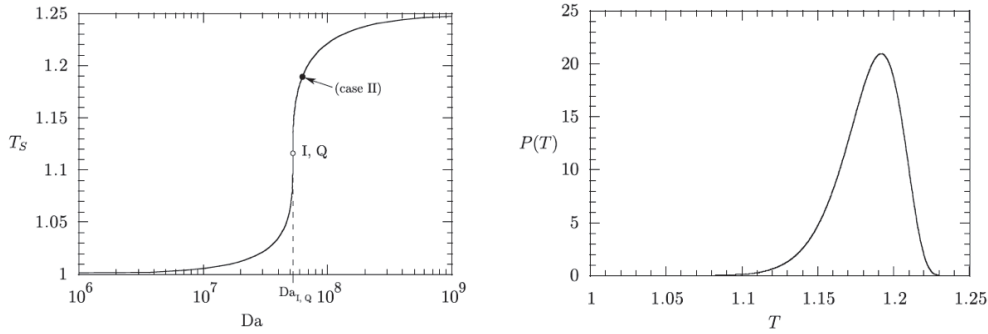


FIGURE 1.9 – Solutions stationnaires pour la température des équations de réacteurs utilisés dans Oberlack et al. (2000) (gauche) et fonction de densité de probabilité de la température (droite), dans un cas de combustion MILD. Nous invitons le lecteur à se référer à l'article original pour la nomenclature, les équations utilisées et la procédure de variation stochastique des nombre de Damköhler (Oberlack et al. (2000)).

fonction de densité de probabilité mono-modale sur la température centrée sur la solution stationnaire (Fig. 1.9). C'est le comportement attendu en combustion MILD, pour laquelle le passage de l'état imbrûlé à l'état d'équilibre se fait de façon graduelle et monotone en fonction du nombre de Damköhler (Maruta et al. (2000)). Les auteurs de l'étude précisent que dans un cas proche d'une combustion classique, une fonction de densité de probabilité bimodale est obtenue, traduisant l'importance des effets instationnaires locaux de la cinétique chimique. Comme les effets instationnaires de type extinction et ré-allumage sont *a priori* de peu d'importance en combustion MILD, on considérera que la cinétique chimique peut localement être représentée par une collection de flammelettes à contre-courant stationnaires.

L'autre point fondamental à considérer pour l'utilisation des équations de flammelettes est la variation de composition des mélanges. En effet, il est important de remarquer que le modèle FPV tel que décrit par Pierce and Moin (2004), ou encore le modèle de flammelettes laminares de Peters (1984), négligent toute possibilité de variation de composition du combustible et/ou du comburant. En combustion sans flamme, la combustion présente une structure spatiale étendue, et la zone de réaction principale se produit dans des zones pauvres et à faibles taux de dissipation scalaire. Cela limite les interactions possibles entre compositions différentes dans l'espace de variation de mélange (Ihme and See (2010a), Ihme and See (2011), Ihme et al. (2012)). Ainsi, l'hypothèse locale de flammelette peut être valable à condition de prendre en compte les variations de composition des réactifs. Une reformulation des conditions aux limites des équations de flammelettes stationnaire sera donc nécessaire.

1.7 Conclusions

La combustion sans flamme est un phénomène complexe impliquant un couplage fort entre différents processus physiques. Par conséquent, sa modélisation s'avère délicate : tous les phénomènes en jeu et leurs différentes interactions doivent être modélisés et quantifiés. De plus, il existe de nombreuses zones d'ombres sur la stabilisation et l'établissement de la combustion sans flamme. Une grande variété de modèles de combustion ont été utilisés ou proposés pour simuler ce régime particulier, sans toutefois dégager un consensus sur l'approche idéale à adopter.

Une analyse préliminaire issue de calculs 0D et d'un état de l'art permet cependant de montrer que :

- l'effet d'une cinétique chimique détaillée est nécessaire, à défaut de schémas cinétiques réduits adaptés ;
- les trajectoires chimiques sont influencées par la dilution, et elles ne sont *a priori* pas connues en combustion MILD.

On propose donc une nouvelle approche, basée sur l'utilisation de flammelettes stationnaires, pour laquelle on conciliera ces aspects.

Chapitre 2

Reproduction d'une cinétique chimique détaillée : l'approche FPV

Ce chapitre est consacré aux techniques de prise en compte des effets de cinétique chimique détaillée mises en œuvre pour diminuer les coûts de calculs. Les méthodes de tabulation de la cinétique chimique sont décrites de manière générale, et les modèles de flammelettes sont plus particulièrement détaillés. Les équations de flammelettes non-prémélangées sont données section 2.3.1 avant d'exprimer les paramètres de contrôle spécifiques à une tabulation des solutions de ces équations. L'approche FPV (acronyme de Flamelet-Progress Variable approach) est ensuite introduite section 2.4, et sera à la base des développements apportés dans ce travail.

2.1 Introduction

La combustion est un processus mettant en jeu plusieurs espèces dans des réactions chimiques qui peuvent avoir lieu sur des échelles de temps différentes. Si l'on suppose que les effets de diffusion différentielle sont négligeables, l'évolution de chaque espèce k est régie par l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_k) + \rho \dot{\omega}_{Y_k} \quad (2.1)$$

où ρ est la densité, \mathbf{u} le vecteur vitesse, D le coefficient de diffusion et $\dot{\omega}_{Y_k}$ le terme source de l'espèce k .

2.1.1 Problématique du coût lié à une cinétique chimique détaillée

La combustion d'un réactif avec un oxydant implique des espèces majoritaires et minoritaires qui peuvent interagir dans diverses phases liées par une

cinétique chimique. Celle-ci peut être décrite au moyen d'un schéma écrit sous la forme :

$$\sum_k \nu'_{rk} \mathcal{M}_k \Leftrightarrow \sum_k \nu''_{rk} \mathcal{M}_k \quad r = 1, N_r \quad (2.2)$$

où \mathcal{M}_k est le symbole de l'espèce k ; ν'_{rk} et ν''_{rk} sont ses coefficients stœchiométriques pour cette même espèce à la réaction r et N_r le nombre total de réactions impliquées. Le nombre d'espèces N_k et de réactions N_r dépendent des réactifs : dans le cas d'une combustion méthane-air, le schéma GRI3.0 proposé par [Smith et al. \(1999\)](#) met en jeu 53 espèces dans 325 réactions alors que pour un fuel plus lourd comme le kérosène, le schéma cinétique de [Voisin et al. \(1998\)](#) propose 225 espèces dans plus de 3490 réactions.

Pour tout schéma cinétique donné, le taux d'avancement de la réaction r , \mathcal{Q}_r est défini par :

$$\mathcal{Q}_r = k_{fr} \prod_k [X_k]^{\nu'_{kr}} - k_{br} \prod_k [X_k]^{\nu''_{kr}} \quad (2.3)$$

où les facteurs k_{fr} et k_{br} sont respectivement les taux de réaction direct et indirect. k_{fr} s'exprime généralement au moyen de la loi empirique d'Arrhenius :

$$k_{fr} = A_{fr} T^{\beta_r} \exp\left(\frac{-E_r}{RT}\right) \quad (2.4)$$

où le facteur pré-exponentiel A_{fr} , l'exposant pour la température β_r et l'énergie d'activation E_r doivent être fournis par un schéma cinétique. Le taux de réaction indirect est, quant à lui, évalué comme le rapport entre k_{fr} et les constantes d'équilibre de la réaction.

Le taux de réaction chimique de l'espèce k est calculé à partir des taux d'avancement en incluant la contribution de chaque réaction r du schéma cinétique :

$$\dot{\omega}'_k = \sum_r W_k \nu_{k,r} \mathcal{Q}_r \quad (2.5)$$

Le terme source chimique utilisé dans l'équation de transport de la fraction massique d'une espèce k est ensuite évalué sous la forme¹ :

$$\dot{\omega}_k = \frac{\dot{\omega}'_k}{\rho} \quad (2.6)$$

La caractérisation de ces espèces au moyen d'une cinétique complexe pose donc une problématique de coût de calcul. En effet, l'évaluation de la fraction massique d'une espèce k nécessite le calcul de :

1. Bien que l'évaluation des constantes de réactions, et donc des termes sources chimiques des espèces, soit un problème fondamental pour la modélisation de la combustion, la construction et la validation des schémas cinétiques utilisés dans le cadre de cette thèse est hors de portée de l'étude. Tout au long de ce travail, les schémas cinétiques employés seront donc considérés validés et viables pour les conditions opératoires cibles.

- la solution de l'équation de transport de l'espèce k ;
- son terme source $\dot{\omega}_k$, Eq.2.6.

Ces deux estimations rendent un calcul CFD complet prohibitif pour des combustibles comme le méthane, le gaz naturel, le kérosène, etc. Pour une chimie plus simple, impliquant par exemple une combustion d'hydrogène avec de l'air, la résolution directe de la cinétique chimique complexe dans des calculs tridimensionnels s'est pour l'instant limitée à des études sur des configurations académiques ou purement numériques via des calculs de DNS (Direct Numerical Simulation) à des fins de compréhension phénoménologique et de création de bases de données (Mizobuchi et al. (2002), Chen et al. (2006), Yoo et al. (2009)). Pour de telles études, des calculateurs teraflopiques, voire petaflopiques, doivent être utilisés et des développements spécifiques doivent être mis en œuvre pour l'architecture et l'algorithmique des codes afin d'optimiser le parallélisme, la gestion de la mémoire et des entrées/sorties (Chen et al. (2009), Chen (2011)). Ils sont donc largement hors de portée pour des calculs industriels ou pour simuler des configurations complexes².

2.1.2 Réduction de la chimie détaillée

Pour pallier ce problème, une approche largement répandue consiste à construire des schémas cinétiques réduits qui reproduisent de manière globale le comportement des schémas détaillés (température adiabatique de fin de combustion, délais d'auto-allumage, vitesse de flamme laminaire...). Ce type d'approche offre des avantages indéniables en terme de coût de calcul et permet aussi de s'affranchir de la raideur inhérente à certaines réactions chimiques qui pourrait pénaliser le pas de temps d'une simulation. Une description des méthodes de réduction de schéma cinétique est fournie dans les thèses de Naudin (2008) et de Vicquelin (2010). Bien qu'elle soit efficace pour de nombreuses applications, la réduction de schéma cinétique n'est cependant pas suffisante pour des régimes de combustion complexes qui nécessitent une description plus particulièrement fine de la chimie en jeu. Dans le cas de combustion MILD, l'importance de la prise en compte des effets d'une cinétique détaillée a été mise en avant, et les simulations effectuées avec des schémas réduits ou squelettiques n'ont pas donné de résultats satisfaisants comparés à des schémas cinétiques plus complets (Parente et al. (2008), Galletti et al. (2009), Graca et al. (2012)).

2. La limitation des simulations DNS n'est pas uniquement liée au coût de la chimie. Elles sont aussi limitées par le Reynolds de l'écoulement, autrement dit par les échelles de kolmogorov η_k .

2.2 État de l'art de la tabulation de la cinétique chimique

Pour récupérer plus d'informations qu'avec des schémas cinétiques réduits et éviter les coûts inabordables associés à la résolution d'une chimie complexe, le nombre de degrés de liberté utilisé pour la cinétique peut être diminué. Par conséquent, la chimie est contrainte à un sous-espace (low-dimensionnal manifold) pouvant être caractérisé par un ensemble restreint de paramètres de contrôle : c'est le principe de base des méthodes de tabulation de la cinétique chimique.

2.2.1 Principe général de tabulation de la cinétique chimique

En ne considérant que la chimie, et pour une combustion à pression et enthalpie constantes, toute composante du vecteur $\boldsymbol{\psi} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_{N_k}, T)^\top$ est fonction de ce dernier :

$$\psi_i = \mathcal{F}(Y_1, \dots, Y_{N_k}, T) \quad (2.7)$$

L'idée générale derrière la tabulation de la cinétique chimique est de réduire le système 2.7 à un système de dimension inférieure en introduisant un jeu de paramètres de contrôle $(\Psi_1, \dots, \Psi_{N_c})$, où $N_c < N_k + 1$ est le nombre de paramètres de contrôle, tel que :

$$\psi_i = \mathcal{G}(\Psi_1, \dots, \Psi_{N_c}) \quad (2.8)$$

Différentes approches peuvent être utilisées pour estimer cette fonction \mathcal{G} . Une méthode directe et efficace du calcul de \mathcal{G} réside dans le calcul de flammelettes : la combustion est vue comme une collection de petits éléments (les flammelettes), qui peuvent être calculés avec une chimie détaillée, puis stockés dans une table en fonction des paramètres de contrôle $\boldsymbol{\Psi}$. Le choix des éléments et des paramètres de contrôle dépend de la physique du processus de combustion à modéliser.

Pour construire une table de référence donnant accès aux grandeurs thermo-chimiques utiles à la simulation de la combustion, l'approche typique consiste à formuler des archétypes de configurations de combustion, à calculer le comportement de la cinétique chimique avec une chimie détaillée dans ces conditions et à stocker les informations en fonction d'un nombre restreint de paramètres de contrôle (Enjalbert (2011)). La variété ainsi obtenue sert à modéliser les termes chimiques des équations résolues par un code CFD.

Avant de s'intéresser aux différents éléments constitutifs d'une table chimique, il est important de préciser quels sont les paramètres de contrôle les plus fréquemment choisis pour restreindre la cinétique chimique : la fraction de mélange z et la variable d'avancement Y_C .

- En combustion non-prémélangée, le combustible et le comburant sont initialement séparés. Pour conserver une information sur la richesse locale du mélange, on introduit régulièrement la fraction de mélange z . Ce paramètre, égal à un dans le fuel et à zéro dans l'oxydant, est solution à une équation de transport de scalaire passif (pour $Le_z = 1$) :

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i z) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \quad (2.9)$$

Différentes définitions de la fraction de mélange sont disponibles. Cette variable de contrôle peut être définie à partir de fractions massiques élémentaires (Bilger (1976), Williams (1985), Barlow and Frank (1998)). La fraction de mélange est définie comme la fraction massique Y_e d'un élément e normalisée par rapport à sa valeur dans le combustible (F) et le comburant (Ox) :

$$Z = \frac{Y_e - Y_e^{Ox}}{Y_e^F - Y_e^{Ox}} \quad (2.10)$$

Si les nombres de Lewis d'espèces Le_k sont tous égaux à l'unité, le scalaire Z répond à une équation de transport de scalaire passif strictement équivalente à l'équation 2.9.

- Le deuxième paramètre de contrôle fréquemment utilisé est la variable d'avancement Y_C . Cette dernière permet le suivi de l'avancement des réactions d'un état non-brûlé à un état d'équilibre thermo-chimique. Cette variable contient une information sur l'évolution temporelle ou spatiale des espèces et de la température en fonction de la cinétique chimique et doit permettre de couvrir des échelles de temps chimiques d'intérêt. De manière générale, elle est définie comme une combinaison linéaire d'espèces :

$$Y_C = \sum_k^{N_k} w_k Y_k \quad (2.11)$$

où w_k est le poids attribué à l'espèce k . Cette variable, contrairement à la fraction de mélange, est décrite par une équation de transport de scalaire réactif (pour $Le_{Y_C} = 1$) :

$$\frac{\partial \rho Y_C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_C) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Y_C}{\partial x_i} \right) + \rho \dot{\omega}_c \quad (2.12)$$

Souvent, pour discriminer plus aisément l'état d'avancement des réactions chimiques de leur dépendance à la richesse locale du mélange, on utilise une variable d'avancement normalisée c :

$$c = \frac{Y_C - Y_C^0}{Y_C^{eq} - Y_C^0} \quad (2.13)$$

où Y_C^{eq} et Y_C^0 représentent respectivement la valeur de la variable d'avancement à l'équilibre et dans les gaz frais.

- Pour décrire une chimie détaillée dans une combustion complexe, admettant par exemple des pertes thermiques, des phénomènes de dilution, des injections multiples ou autres, l'utilisation de la fraction de mélange et de la variable d'avancement n'est pas suffisante. Des paramètres de contrôle supplémentaires doivent être employés pour caractériser la chimie du processus. Ces paramètres doivent être définis de manière à ce qu'il n'existe pas de correspondance univoque entre eux et n'importe quel autre paramètre de contrôle.

Afin de construire une tabulation adaptée à la combustion sans flamme, il est important de passer en revue les différents éléments utilisés dans le cadre d'une tabulation de la cinétique chimique. Nous ne donnerons ici que les équations et conditions aux limites pour les espèces à des fins d'illustration de la physique en place, l'équation sur l'énergie ou la température étant omise pour plus de lisibilité.

2.2.2 Combustion prémélangée

Pour caractériser localement une combustion prémélangée propageant un front de flamme, les flammes 1D laminaires de prémélanges sont adaptées. De telles flammes peuvent être calculées dans l'espace physique en calculant $N_k + 1$ équations (N_k équations pour les espèces et une pour l'enthalpie ou la température). Pour chaque espèce, on résout :

$$\rho_0 S_L \frac{\partial Y_k}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x} \right) + \dot{\omega}_k \quad (2.14)$$

$$Y_k(x \leftrightarrow -\infty) = Y_k^{unburnt}(\phi) \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial x}(x \leftrightarrow -\infty) = 0 \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial x}(x \leftrightarrow +\infty) = 0 \quad (2.17)$$

Le calcul et le stockage de ces éléments en fonction de la variable d'avancement est à la base du modèle FPI, acronyme de *Flamelet Prolongation of ILDM*, (Gicquel (1999), Gicquel et al. (2000)) et du modèle FGM, acronyme de *Flamelet Generated Manifold*, de van Oijen et al. (2001). L'introduction d'une dimension supplémentaire pour la richesse du mélange permet de prendre en compte dans une tabulation bidimensionnelle les variations liées à la composition initiale du mélange. Cependant, le calcul du système d'équation décrit plus haut n'est possible que dans les limites de flammabilité : lorsque le mélange est trop pauvre ou trop riche, aucune combustion ne peut avoir lieu. De plus, ce type d'approche néglige les effets de diffusion suivant la fraction de mélange, chaque flammelette étant calculée pour une richesse différente (Fiorina et al. (2005a)).

Malgré ces limitations, cette approche a été étendue à la prise en compte d'autres paramètres comme les pertes thermiques (Fiorina et al. (2003)). La prise en compte des interactions chimie-turbulence avec ce type de tabulation a, quant à elle, été effectuée par l'intégration de fonctions de densité de probabilité présumées dans le modèle FPI-PCM (Vervisch et al. (2004), Fiorina et al. (2005b)), ou plus récemment par filtrage direct des flammes laminaires dans un contexte LES avec le modèle F-TACLES (Vicquelin et al. (2009), Fiorina et al. (2010)).

2.2.3 Auto-allumage dans un mélange homogène

Lorsque les gradients spatiaux sont négligeables devant le terme source chimique des espèces, l'auto-allumage (ou l'allumage forcé) d'un mélange homogène peut être décrit par le système :

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \dot{\omega}_k \quad (2.18)$$

$$Y_k(t=0) = Y_k^{unburnt}(\phi) = Y_k^{unburnt}(Z) \quad (2.19)$$

Les solutions de ce système, fonction du temps, peuvent alors être tabulées en fonction de la variable d'avancement Y_C , et ce pour peu qu'une correspondance univoque existe entre le temps et Y_C . Ce type d'approche a été utilisé pour reproduire l'auto-allumage de mélanges, la fraction de mélange ayant été introduite pour reproduire les variations liées à la composition initiale du mélange, comme pour le modèle FPI (Embouazza (2005), Galpin et al. (2008)).

2.2.4 Réacteur partiellement ou parfaitement mélangé

Très similaire à la tabulation de calcul d'auto-allumage de mélanges homogènes, la tabulation de réacteur partiellement ou parfaitement mélangé a aussi été utilisée pour reproduire des phénomènes d'auto-allumage, ou une cinétique chimique dite lente (Fichet (2008)). La prise en compte des compositions initiales se fait grâce à la fraction de mélange, et un nouveau paramètre de tabulation est utilisé dans le cas des réacteurs partiellement prémélangés : le temps de résidence. Dans certains cas, une variable de dilution α est introduite pour caractériser le mélange entre des gaz frais et des gaz brûlés (Duwig et al. (2007)).

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \dot{\omega}_k \quad (2.20)$$

$$Y_k(t=0) = \alpha(Y_k|_{\alpha=1} - Y_k^{unburnt}|_{\alpha=0}) + Y_k^{unburnt}|_{\alpha=0} \quad (2.21)$$

Dans le cadre de la simulation de la combustion sans flamme, ce type d'approche a été utilisé à plusieurs reprises pour reproduire la structure et l'évolution de la combustion, que ce soit en RANS (Mancini et al. (2007), Schütz et al. (2008), Schaffel et al. (2009)) ou en LES (Duwig et al. (2008)). Les avantages de cette

tabulation sont effectivement attrayants, tant en terme de facilité de calcul et de stockage des solutions qu'en terme de description de la cinétique chimique, qui dépend alors intrinsèquement du temps physique.

2.2.5 Combustion non-prémélangée

Pour capturer un phénomène de combustion non-prémélangée, il est naturel de s'attacher à tabuler des flammelettes de diffusion. Celles-ci font intervenir des informations sur l'évolution de la cinétique chimique et sur l'intensité du mélange via la fraction de mélange et le taux de dissipation scalaire de mélange $\chi_Z = 2D(\frac{\partial z}{\partial x_i} \frac{\partial z}{\partial x_i})$ (Peters (1984)) :

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{1}{2} \rho \chi_Z \frac{1}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_k \quad (2.22)$$

$$Z(x \leftrightarrow -\infty) = 0 \quad (2.23)$$

$$Z(x \leftrightarrow +\infty) = 1 \quad (2.24)$$

Ce système, écrit dans l'espace de la fraction de mélange, contient une information sur la structure spatiale des grandeurs chimiques via χ_Z . La tabulation des solutions de la forme stationnaire de ces équations a été utilisée à de nombreuses reprises en RANS (par exemple par Pitsch and Peters (1998)) et en LES (par exemple par Kempf et al. (2002)) pour reproduire des flammes jets turbulentes. Pour capturer des phénomènes d'extinction et de ré-allumage, Pierce and Moin (2004) ont tabulé la totalité des solutions des équations stationnaires en introduisant la variable d'avancement Y_C . Enfin, pour décrire les phénomènes d'auto-allumage, plusieurs groupes de recherche ont utilisé les solutions des équations 2.22 (Zhang et al. (1995), Chang et al. (1996), Vicquelin (2010), Ihme and See (2010b)).

De nombreuses extensions ont été apportées à la tabulation de ce type d'élément, notamment pour prendre en compte les pertes thermiques (Ihme and Pitsch (2008), Carbonell et al. (2009), Mueller and Pitsch (2012)).

2.2.6 Discussion sur les différences de trajectoires chimiques dans l'espace des phases

Les éléments présentés dans les sous-sections 2.2.2 à 2.2.5 permettent de décrire les trajectoires chimiques des espèces dans un espace des phases généralement défini par (Z, Y_C) . Cependant, d'une approche à l'autre, les trajectoires sont différentes en raison de deux points majeurs :

- La diffusion d'espèce entre le combustible et l'oxydant : c'est la diffusion suivant la fraction de mélange Z . Les flammelettes de prémélange et les éléments 0D négligent cet effet.
- La diffusion d'espèce entre les gaz frais et les gaz brûlés à richesse donnée : c'est la diffusion suivant la variable d'avancement Y_C . Effecti-

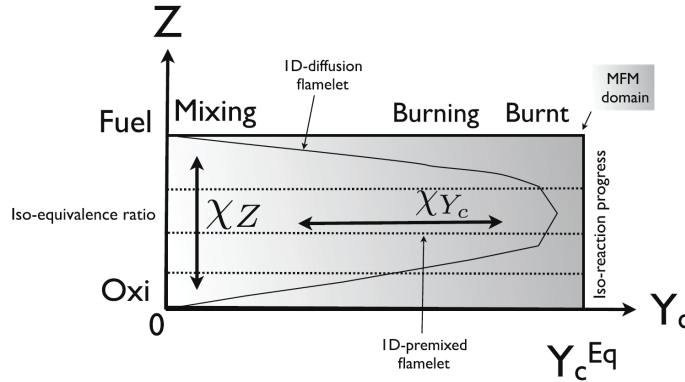


FIGURE 2.1 – Schéma des flammelettes multidimensionnelles $Z - Y_C$ dans l'espace d'état (Nguyen et al. (2010)).

vement, la diffusion de chaleur et d'espèce affecte les trajectoires chimiques. Cet aspect, pris en compte dans les flammelettes de prémélange, est négligé dans les éléments 0D et les flammelettes de diffusion.

Par conséquent, ces éléments ne sont *a priori* adaptés qu'à des archétypes de régime de combustion. Cependant, dans des configurations non-prémélangées réalistes, un prémélange partiel des réactifs peut être observé. Récemment, des éléments multidimensionnels prenant en compte les diffusions sur Z et Y_C ont été proposés par Nguyen et al. (2010). Ces éléments peuvent être décrits par 5 paramètres de contrôle (Z , Y_C et trois taux de dissipation scalaire) en résolvant des équations spécifiques³ :

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \frac{\partial Y_k}{\partial Y_C} \dot{\omega}_C = \frac{\rho \chi_{Y_C}}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Y_C^2} + \frac{\rho \chi_Z}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + 2 \frac{\rho \chi_{Z, Y_C}}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z \partial Y_C} + \dot{\omega}_k \quad (2.25)$$

Ce type d'élément offre une flexibilité accrue car il tend asymptotiquement vers des flammes de prémélange pures ou des flammes de diffusion pures. La représentation de ces éléments est fournie Fig. 2.1. Bien que séduisant dans le cadre de la simulation de combustion partiellement prémélangée, la tabulation de ces éléments pour modéliser des régimes de combustion nécessitant la prise en compte d'une dimension supplémentaire pour les pertes thermiques et/ou une deuxième variable d'avancement n'est pas triviale. Enfin, l'extension de ce type d'approche à la simulation aux grandes échelles de la turbulence est difficile car le nombre de paramètres de contrôle est trop important.

3. On ne donne ici que l'équation relative à une espèce k pour illustrer les dépendances aux 5 paramètres de contrôle. Notons de plus que les auteurs ont proposé une formulation générale d'éléments multidimensionnels pour un nombre quelconque de paramètres de contrôle.

2.3 Tabulation de flammelettes à contre-courant non-prémélangées

Présentée succinctement en section 2.2.5, la tabulation de flammelettes laminaires de diffusion a été intensivement utilisée pour simuler la combustion non-prémélangée. En raison des constatations invoquées dans le chapitre 1 au paragraphe 1.6, ce travail de thèse se base sur une telle tabulation via l'approche FPV développée initialement par [Pierce and Moin \(2004\)](#). Cette section s'attache à décrire plus précisément les flammelettes utilisées et leur calcul.

2.3.1 Structure de flamme dans l'espace de fraction de mélange

Pour des nombres de Damköhler élevés (chimie rapide devant les temps de mélange) ou pour des énergies d'activation suffisamment importantes, les réactions chimiques et les transferts thermiques ont lieu dans des couches minces. Si la taille caractéristique de cette couche est inférieure aux échelles de la turbulence environnante, les structures turbulentes ne peuvent pas pénétrer la zone de réaction et détruire la structure locale de la flamme. L'effet de la turbulence est alors limité à la déformation et à l'étirement de la flamme : on parle alors de régime de flammelettes. Dans les écoulements fortement turbulents, pour lesquels les temps caractéristiques de convection et de diffusion sont comparables aux temps chimiques, les effets hors-équilibre deviennent importants et doivent être pris en compte.

La structure d'une flamme dans un régime de flammelettes peut être décrite localement par les équations de flammelettes. Les équations mono-dimensionnelles de flammelettes laminaires de diffusion peuvent s'établir à partir des équations de conservation des espèces et de l'énergie (ou de la température) en introduisant un système de coordonnées localement associé à une iso-surface de mélange stœchiométrique. En choisissant la fraction de mélange comme première dimension (perpendiculaire à la surface stœchiométrique) et deux directions alignées à la surface, un changement de variable peut être opéré sur les équations de conservation d'espèces et d'énergie.

Dans une flamme laminaire à contre-courant, les changements normaux à la surface stœchiométrique sont de première importance comparés aux changements dans les autres directions. En supposant des nombres de Lewis d'espèces k constants, Le_k , les équations de flammelettes transitoires pour les fractions massiques d'espèces et pour la température s'écrivent alors [Pitsch and Peters \(1998\)](#); [Peters \(2000\)](#) :

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{\rho \chi_Z}{2} \frac{1}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \rho \dot{\omega}_k \quad (2.26)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1 \rho \chi_Z}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \sum_{k=1}^N \frac{\rho h_k \dot{\omega}_k}{c_p} + \frac{\rho \chi_Z}{2} \frac{1}{c_p} \frac{\partial c_p}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} + \sum_{k=1}^N \frac{\rho \chi}{2} \frac{c_{pk}}{c_p} \frac{1}{Le_k} \frac{\partial Y_k}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} \quad (2.27)$$

avec les conditions aux limites suivantes :

$$Y_k(Z = 0) = Y_k^{oxydant} \quad T(Z = 0) = T^{oxydant} \quad (2.28)$$

$$Y_k(Z = 1) = Y_k^{fuel} \quad T(Z = 1) = T^{fuel} \quad (2.29)$$

où ρ , $\dot{\omega}_k$, h_k et c_{pk} sont respectivement la densité, le terme source de l'espèce k , l'enthalpie de l'espèce k et la capacité calorifique massique de l'espèce k . On a introduit ici le taux de dissipation scalaire $\chi_Z = 2D_Z(\frac{\partial z}{\partial x_i} \frac{\partial z}{\partial x_i})$, où $D_Z = \frac{\lambda}{\rho c_p}$ est la diffusivité moléculaire. Une expression analytique du paramètre χ_Z peut être obtenue comme solution d'un problème mono-dimensionnel de mélange. Dans ce cas là, [Peters \(1983\)](#) a en effet montré que le taux de dissipation scalaire peut s'écrire :

$$\chi_Z = \chi_{Z_{st}} \exp(2([\text{erfc}^{-1}(2Z_{st})]^2 - [\text{erfc}^{-1}(2Z)]^2)) \quad (2.30)$$

Ce paramètre, qui dépend intrinsèquement des conditions de l'écoulement, peut aussi être modélisé comme une fonction de la fraction de mélange z et de l'étiement a via [Peters \(2000\)](#) :

$$\chi_Z = \frac{a}{\pi} \exp(-2[\text{erf}^{-1}(2Z - 1)]^2) = aF(Z) \quad (2.31)$$

En introduisant le taux de dissipation scalaire à la stœchiométrie $\chi_{Z_{st}} = \chi_{(Z=Z_{st})}$, on a :

$$\chi_Z = \chi_{Z_{st}} \frac{F(Z)}{F(Z_{st})} \quad (2.32)$$

Avec cette formulation, le taux de dissipation scalaire à la stœchiométrie devient un paramètre à fixer pour calculer la solution des équations [2.26](#) et [2.27](#).

En faisant l'hypothèse de Lewis unitaire pour toute espèce (on invite le lecteur à se référer à l'annexe [A](#) pour l'ensemble des hypothèses de modélisation effectuées sur les équations générales de conservation), les équations de flammelettes de diffusion s'écrivent (avec les mêmes conditions aux limites que pour eq. [2.26](#) et eq. [2.27](#)) :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\chi_Z}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial Z^2} = \dot{\omega} \quad (2.33)$$

où $\psi = (Y_1, \dots, Y_{N_k}, T)^T$ et $\dot{\omega} = (\dot{\omega}_{Y_1}, \dots, \dot{\omega}_{N_k}, \dot{\omega}_T)^T$ est le vecteur de taux de réactions. Sous forme stationnaire, l'écriture réduite de ce système devient :

$$-\frac{\chi_Z}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial Z^2} = \dot{\omega} \quad (2.34)$$

Les solutions des équations eq. [2.34](#), appelées "courbes en S", sont calculées avec le solveur dédié FLAMEMASTER [Pitsch \(1998\)](#). Deux points de rebroussement peuvent apparaître (le taux de dissipation scalaire d'extinction χ_q et d'allumage

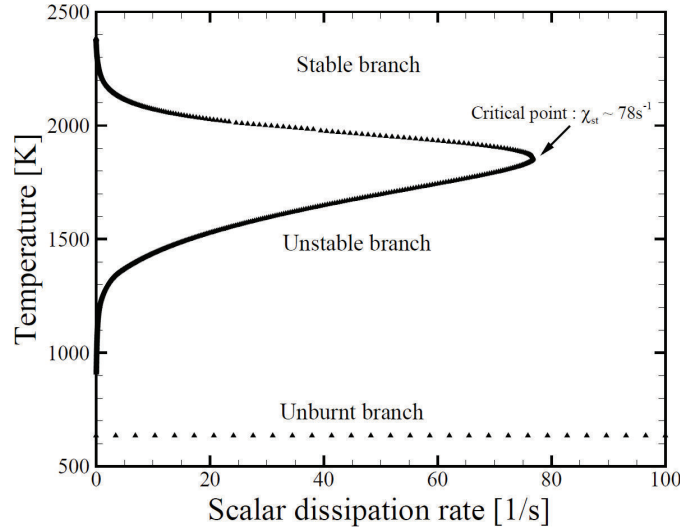


FIGURE 2.2 – Solutions des équations de flammelettes de diffusion en fonction du taux de dissipation scalaire pour une combustion méthane-air à la stœchiométrie (la flammelette initiale utilisée est mise en lumière en enlevant autour d'elle des points de calculs). L'air est préchauffé à 673 K.

χ_{ig}). Bien que des estimations analytiques de χ_q existent (Cuenot and Poinso (1996), Peters (2000)), la résolution numérique de ces points n'est pas triviale en prescrivant $\chi_{Z_{st}}$. Pour calculer la totalité des solutions, une méthode de continuation à pseudo-longueur d'arc est alors préférée Giovangigli and Smooke (1987). Avec cette méthode, une flammelette initiale doit être donnée, et la longueur de la courbe en S est le paramètre imposé, le taux de dissipation scalaire de référence $\chi_{Z_{st}}$ devenant une valeur propre du problème.

Trois branches de solution différentes apparaissent (Fig.2.4(a)) :

- la branche stable, s'étendant de l'équilibre (taux de dissipation scalaire nul, pas de diffusion) au point critique de taux de dissipation scalaire d'extinction χ_q ;
- la branche instable, s'étendant de χ_q au taux de dissipation scalaire d'allumage χ_{ig} ;
- la branche non-brûlée, caractérisant un mélange pur entre l'oxydant et le combustible.

Trois solutions peuvent exister pour un taux de dissipation scalaire donné, et chacune présente des distributions des grandeurs chimiques fort différentes (Fig. 2.3). Une conséquence directe est l'impossibilité d'utiliser le taux de dissipation scalaire $\chi_{Z_{st}}$ pour caractériser univoquement les solutions à une fraction de mélange donnée. Plusieurs approches ont été développées pour paramétrer

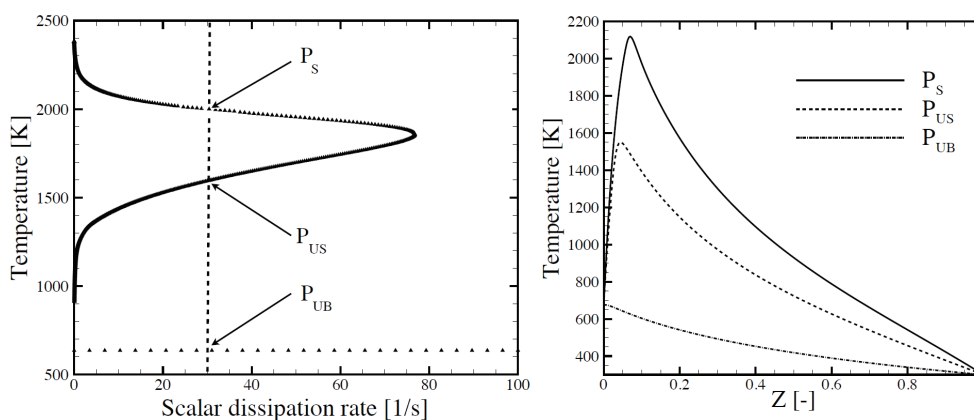


FIGURE 2.3 – Illustration de solutions en trois points différents (P_S , P_{US} , P_{UB}) pour $\chi_Z = 30 \text{ s}^{-1}$: localisation des points sur la courbe en S (gauche) ; répartition de la température en fonction de la fraction de mélange pour ces trois points.

les solutions des équations 2.34.

2.3.2 Modèle de flammelette stationnaire

Négliger l'évolution temporelle du taux de dissipation scalaire dans l'équation 2.34 impose que la structure de flamme réagit instantanément aux changements de taux de dissipation scalaire. Sous cette hypothèse, et en se limitant à la branche stable de la courbe en S , une paramétrisation naturelle des grandeurs chimiques ψ est :

$$\psi = \psi(Z, \chi_{Z_{st}}) \quad (2.35)$$

Ces grandeurs peuvent donc être tabulées en fonction de ces deux paramètres. Ce type de tabulation est très intéressant d'un point de vue industriel, puisqu'il permet de décrire une chimie détaillée pour un coût très faible. Cependant, les restrictions imposées par les différentes hypothèses effectuées dans le cadre de cette tabulation peuvent être trop contraignantes pour simuler de manière fine un régime de combustion complexe, notamment si les effets instationnaires sont importants.

Mell et al. (1994) ont analysé la contribution du terme instationnaire des équations 2.33 par simulation numérique directe et ont proposé un critère permettant de quantifier la validité de l'hypothèse de stationnarité des équations. Dans le même ordre d'idée, Cuenot and Poinso (1994) ont développé un diagramme spectral dans lequel les régions pour lesquelles cette hypothèse est valide sont identifiées. Pour l'hypothèse de stationnarité du taux de dissipation scalaire, Pitsch et al. (1998) comparent les temps lagrangien de flammelettes aux temps caractéristiques de diffusion pour déterminer si le mélange est rapide devant le temps lagrangien : le cas échéant, une flammelette peut répondre très

rapidement aux changements de χ_Z , et l'historique de la flammelette est de peu d'importance.

Une autre limitation du modèle de flammelettes laminaires stationnaires *classique* est son incapacité à capturer un décrochage de flamme, des phénomènes d'extinction et de ré-allumage. Cela peut mener à de larges erreurs sur la prédiction de l'écoulement et, par conséquent, sur la prédiction des polluants. En fait, cette limitation est en majeure partie imposée par la restriction de l'espace d'état couvert par la branche stationnaire de la courbe en S. Au-delà du taux de dissipation scalaire d'extinction χ_q , aucune solution n'est ici tabulée. En effet, même si la branche de gaz non-brûlé correspond bien à une solution physique, son inclusion dans le modèle de flammelettes laminaires mène irrémédiablement à des sauts importants de température et de densité et donc à des instabilités numériques. Notons de plus que des variations rapides de taux de dissipation scalaire en dehors de la zone $\chi_{Z_{st}} \in [0; \chi_q]$ n'entraînent pas nécessairement l'extinction de la flamme (Sripakagorn et al. (2004)). Pour pallier cette problématique, différentes études ont été menées. On peut par exemple citer la tabulation d'une solution de flammelettes instationnaires qui s'éteint, que l'on ajoute à la tabulation de flammelettes stationnaires (Delhaye et al. (2008)). Dans ce cas-là cependant, une tabulation basée sur $\chi_{Z_{st}}$ n'est plus possible, et l'introduction de deux variables d'avancement devient nécessaire (Delhaye et al. (2009)).

2.4 Approche FPV (Flamelet-Progress Variable approach)

Initialement introduite par Pierce and Moin (2004), l'approche FPV a été développée pour s'affranchir :

- du caractère *mixed-is-burned* propre au modèle de flammelettes stationnaires ;
- de la modélisation du taux de dissipation scalaire $\tilde{\chi}_Z$ dans un calcul turbulent.

Ce modèle se base sur une tabulation de la totalité des solutions des équations de flammelettes 2.34 en fonction de la fraction de mélange et d'une variable d'avancement. Cette section décrit plus avant ce modèle, qui est à la base de ce travail de thèse.

2.4.1 Formalisme FPV

Pour s'affranchir de la dépendance du taux de dissipation scalaire de mélange χ_Z à la fraction de mélange Z et caractériser univoquement toutes les solutions des équations 2.34, Pierce (2001) ont introduit le paramètre de pro-

grès Λ . Toute flammelette qui s'éteint ou se rallume est alors projetée sur la courbe en S. Plusieurs définitions de ce paramètre de progrès sont possibles, bien que, par simplicité, une définition basée sur la variable d'avancement donnée en eq. 2.11 soit généralement utilisée. Ce paramètre de progrès Λ doit aussi être statistiquement indépendant de la fraction de mélange : cette propriété garantira une modélisation des interactions chimie-turbulence par des fonctions de densité de probabilité présumées plus aisées.

La variable d'avancement Y_C doit être définie de manière à être continue et monotone entre les gaz frais et les gaz brûlés. Y_C peut être déterminé par la résolution d'un problème de minimisation (Ihme (2007), Ihme et al. (2012)), en notant que la variable d'avancement doit :

- être le plus monotone possible, *ie* que les gradients de Y_C doivent être les plus faibles possibles pour discriminer précisément l'avancement de réaction ;
- les profils d'espèces et de température doivent être les plus lisses possible en fonction de Y_C ;

Nous nous intéresserons ici principalement à une combustion méthane-air. Dans ce cas de figure, une définition adaptée de Y_C est :

$$Y_C = Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2} + Y_{H_2O} \quad (2.36)$$

Cette formulation de Y_C sera gardée tout au long de ce manuscrit, sauf mention contraire.

Une définition adaptée de Λ est alors donnée par :

$$\Lambda = Y_C|_{Z\phi^*} \quad (2.37)$$

où $Y_C|_{Z\phi^*}$ est la valeur de la variable d'avancement évaluée à la fraction de mélange correspondante à la richesse ϕ^* . L'illustration de cette définition est donnée Fig. 2.4 (la courbe en S originelle est reproduite à nouveau pour comparer les évolutions de T et de Λ).

De cette manière, toute grandeur chimique ψ est alors fonction de la fraction de mélange et du paramètre de progrès :

$$\psi = \mathcal{F}_\psi(Z, \Lambda) \quad (2.38)$$

En traçant ces fonctions, et notamment la température en fonction de Λ , on peut vérifier la correspondance univoque existante entre une solution de flammelette et Λ à une fraction de mélange donnée (Fig. 2.5). Il est intéressant de noter que dans cette représentation, les différentes branches caractéristiques des courbes en S couvrent des plages de paramètre de progrès fort différentes. Dans la figure 2.5, les points correspondants à la flammelette initiale, au taux de dissipation scalaire d'extinction, et les différentes branches sont illustrées. Cela met en

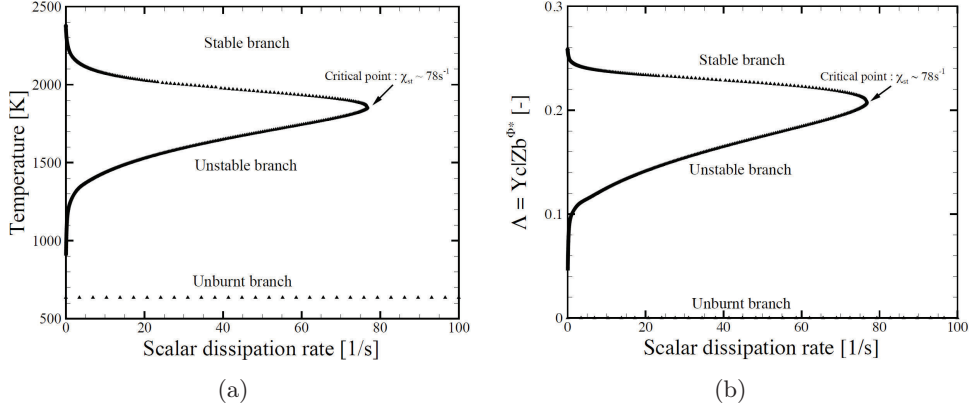


FIGURE 2.4 – (a) : Température ; (b) : paramètre de progrès Λ en fonction du taux de dissipation scalaire à la stœchiométrie.

avant le *regroupement* des solutions de flammelettes stationnaires de la branche stable pour les valeurs élevées de Λ : la discrétisation de la base de données devra tenir compte de cette propriété pour assurer une bonne précision dans cette zone.

En principe, une équation de transport peut être résolue pour Λ (Ihme (2007)). Toutefois, cette équation présente des termes croisés difficiles à modéliser dans le cadre d'une simulation d'écoulements turbulents. On utilisera par conséquent la variable d'avancement, caractérisée par une équation de transport de scalaire réactif classique, pour coupler la table thermochimique avec le solveur utilisé pour réaliser des calculs 3D.

L'équation 2.37 permet de relier la variable d'avancement au paramètre de progrès dans l'espace complet de fraction de mélange :

$$Y_C = \mathcal{F}_{Y_C}(Z, \Lambda) \quad (2.39)$$

Si la fonction \mathcal{F}_{Y_C} est inversible, on peut alors écrire :

$$\Lambda = \mathcal{F}_{Y_C}^{-1}(Z, Y_C) \quad (2.40)$$

On rappelle ici que Λ doit être défini de façon à identifier de manière univoque chaque solution des équations de flammelettes, et ce, pour une fraction de mélange donnée. Si le paramètre de progrès est correctement défini, les scalaires ψ peuvent donc s'écrire :

$$\psi = \mathcal{G}_{Y_C}(Z, Y_C) = \mathcal{F}_\psi(Z, \mathcal{F}_{Y_C}^{-1}(Z, Y_C)) \quad (2.41)$$

Cette formulation permet de récupérer toutes les informations sur les scalaires tabulés nécessaires au couplage avec un code de calcul LES (température, densité, viscosité dynamique, termes sources) et au post-traitement dans ce même code (fractions massiques d'espèces, taux de dégagement de chaleur,...) pour tout niveau de fraction de mélange et de variable d'avancement (Fig. 2.6).

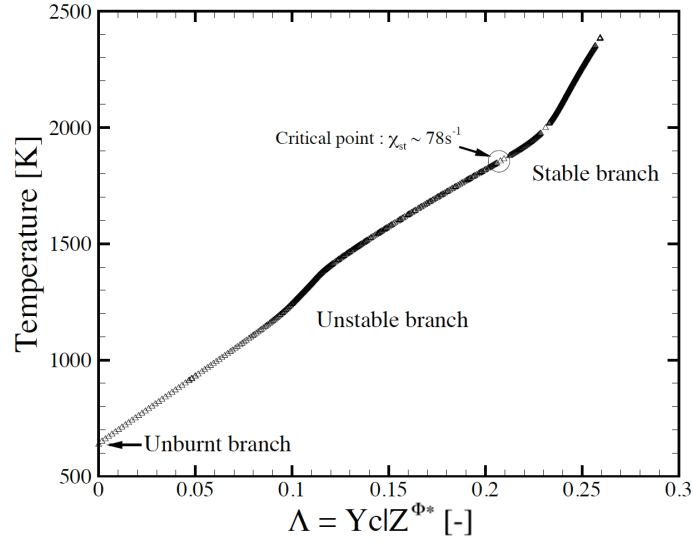


FIGURE 2.5 – Température en fonction du paramètre de progrès Λ à la stœchiométrie.

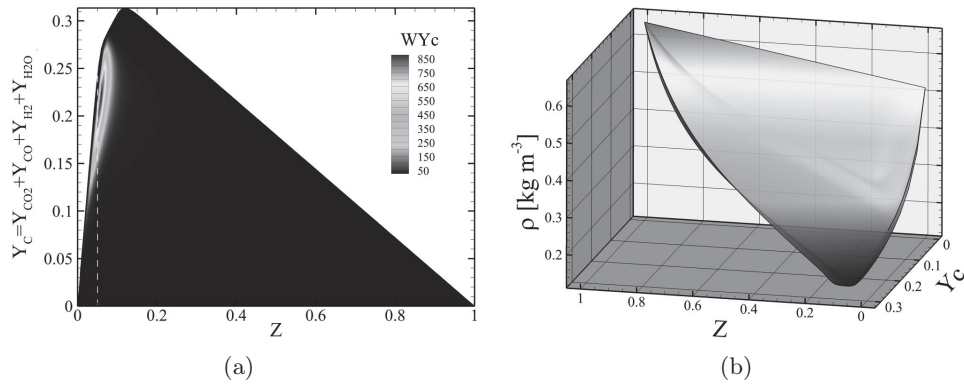


FIGURE 2.6 – Distribution de grandeurs thermochimiques dans l'espace (Z, Y_C) . (a) : terme source de la variable d'avancement en représentation bidimensionnelle ; (b) : densité en représentation tridimensionnelle.

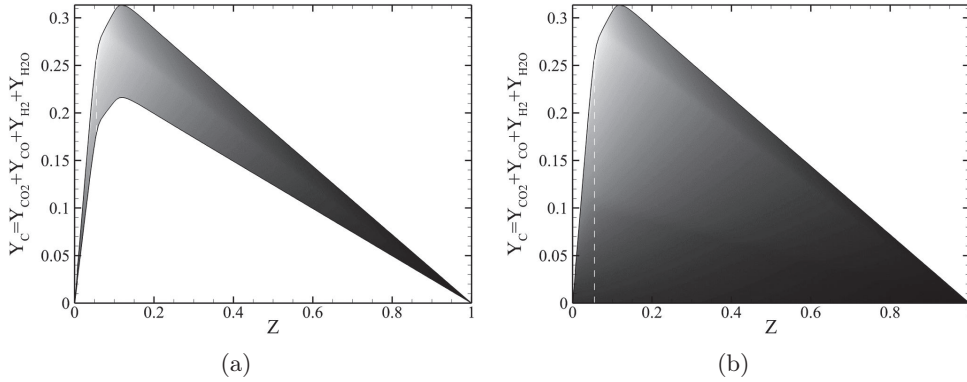


FIGURE 2.7 – Distribution de la température pour une combustion méthane-air en fonction de la variable d'avancement Y_C et de la fraction de mélange Z . L'iso-ligne de stœchiométrie est illustrée par un trait blanc vertical. (a) : Modèle de flammelettes stationnaires; (b) : Modèle FPV

2.4.2 Analyse de l'approche FPV

L'avantage de cette formulation par rapport au modèle de flammelettes stationnaires tabulant la branche $\chi_{Z_{st}} \in [0; \chi_q]$ est que l'introduction du paramètre de progrès permet de décrire des phénomènes locaux d'extinction et de ré-allumage (Ihme et al. (2005)). En outre, le passage d'un état brûlé à une extinction complète se fait sans saut de densité et de température. Cela est clairement visible en projetant les solutions du modèle de flammelettes stationnaires dans le même espace de tabulation que celui du modèle FPV (Fig. 2.7). De plus, en l'absence de propagation d'un front de flamme, cette modélisation rend possible la prédiction d'une combustion partiellement prémélangée. Enfin, cette approche est simple à coupler à un solveur LES et ne demande pas beaucoup de ressources informatiques.

Pour aller plus loin dans l'analyse du modèle FPV, il est intéressant de décrire l'impact de la tabulation de la branche instable de la courbe en S. En effet, cet état ne correspond pas forcément à un état physique. Par exemple, dans le cas d'une extinction de flamme due à un étirement trop fort dans un écoulement turbulent, le taux de dissipation scalaire de mélange réel χ_Z^R (qui ne dépend globalement que des gradients de Z) est différent de celui utilisé dans le modèle FPV. Pierce (2001), puis Ihme and See (2010b) ont interprété ce résultat en donnant l'argument que le modèle FPV pouvait se comparer à un modèle de flammelettes instationnaires pour lequel le terme instationnaire correspond à un terme de relaxation de la solution du modèle FPV vers la solution stationnaire des équations de flammelettes de diffusion.

2.5 Prise en compte des pertes thermiques avec une approche FPV

Les pertes thermiques sont un élément fondamental à prendre en compte pour simuler des configurations industrielles. Elles peuvent avoir lieu par rayonnement ou conducto-convection aux parois. Elles sont favorisées pour des temps de résidence longs, temps pour lesquels la combustion peut être considérée comme stationnaire. Cette propriété rend délicate la prise en compte des pertes enthalpiques dans des modèles de flammelettes non-prémélangées, et plus particulièrement pour des flammelettes stationnaires. Pour développer ce point, il est intéressant de comparer les temps caractéristiques liés au rayonnement, à la cinétique chimique et au temps lagrangien de flammelette (Ihme and Pitsch (2008)).

Pour une flamme jet turbulente non-confinée, le temps lagrangien de flammelette peut être calculé en suivant la méthode de Pitsch and Steiner (2000) :

$$\tau_u(x, t) = \int_0^x \frac{1}{\langle \tilde{u}_{\tilde{z}|\tilde{z}=z_{st}} \rangle(x', t)} dx' \quad (2.42)$$

où $\langle \tilde{u}_{\tilde{z}|\tilde{z}=z_{st}} \rangle$ est la vitesse axiale azimuthalement moyennée sur des iso-surfaces de fraction de mélange à la stœchiométrie. Le temps caractéristique de formation d'espèces majoritaires peut quant à lui s'écrire :

$$\tau_C(x, t) = \left. \frac{\Delta Y_C}{\dot{\omega}_{Y_C}} \right|_{Z_{st}} \quad (2.43)$$

où $\dot{\omega}_{Y_C}$ est le terme source de la variable d'avancement Y_C . Enfin, le temps caractéristique de rayonnement peut être estimé par (Pitsch et al. (1998)) :

$$\tau_r(x, t) = \left. \frac{\rho C_p \Delta T}{\dot{q}_r} \right|_{Z_{st}} \quad (2.44)$$

où C_p est la capacité calorifique à pression constante et \dot{q}_r le taux de pertes thermiques radiatives. Les incréments ΔY_C et ΔT sont définis comme étant la différence entre la solution de la flammelette instationnaire (equation 2.33) et de la flammelette stationnaire (equation 2.34) pour la variable d'avancement et la température. Ainsi, τ_C et τ_r peuvent être interprétés comme les temps nécessaires à relaxer une flammelette instationnaire vers une solution stationnaire. Pour comparer les échelles de temps, deux nombres sans dimension sont introduits :

$$Da_C = \frac{\tau_u}{\tau_C} \quad ; \quad Ra = \frac{\tau_u}{\tau_r} \quad (2.45)$$

Ces nombres et leur évolution sont illustrés Fig. 2.8 dans le cadre d'une simulation LES. La configuration expérimentale est la flamme D de Sandia (Barlow

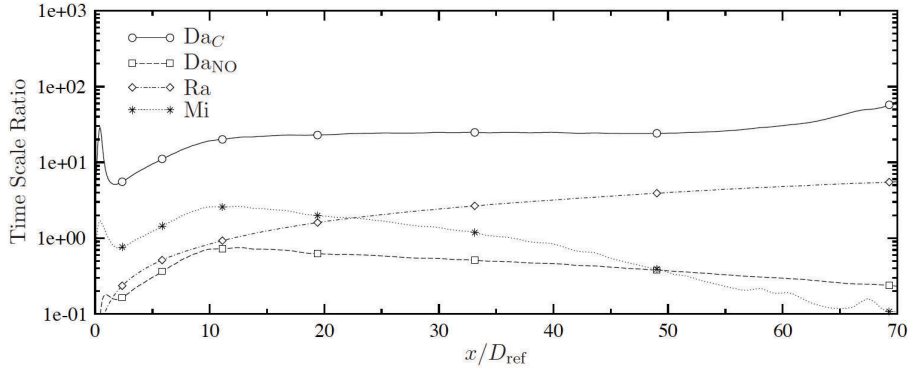


FIGURE 2.8 – Rapports des temps caractéristiques définis eq. 2.45 le long de l'axe de symétrie de la flamme, obtenus par calcul de flammelette instationnaire dans des conditions relatives à la flamme D de Sandia (Ihme and Pitsch (2008)). La courbe Mi est ici représentative du rapport entre le temps lagrangien de flammelette et le temps caractéristique de diffusion.

(1996), Masri et al. (1996)). Ces nombres sont évalués à partir d'un calcul de flammelette instationnaire et le temps lagrangien de flammelette est obtenu à partir de la moyenne temporelle de la vitesse tirée de la LES, selon la méthode proposée par Pitsch and Steiner (2000). Ra augmente de façon monotone à mesure que l'on s'éloigne de l'injection. Puisque τ_r est supérieur à τ_u jusqu'à environ douze diamètres de l'injection, le rayonnement peut y être considéré négligeable. Cependant, plus en aval de l'écoulement, l'accroissement de Ra se fait de plus en plus faible, et le temps caractéristique radiatif devient comparable au temps lagrangien : le rayonnement devient effectif pour des temps de résidence longs.

En calculant le rapport entre Da_C et Ra , on peut comparer les échelles de temps caractéristiques de la cinétique chimique et du rayonnement. L'échelle de temps du rayonnement est globalement dix fois plus importante que τ_C pour l'entièreté du domaine considéré. Par conséquent, alors que les espèces majoritaires ont atteint un état stationnaire, le rayonnement influence toujours l'enthalpie du mélange, entraînant une diminution progressive et lente de la température. Aussi, en incluant les effets radiatifs dans les équations de flammelettes stationnaires, on néglige cette dynamique lente, et à faibles taux de dissipation scalaire et donc pour des temps de résidence longs, les flammelettes s'éteignent.

Afin de pallier cette problématique, Ihme and Pitsch (2008) proposent d'inclure les pertes thermiques en calculant des flammelettes instationnaires soumises au rayonnement à partir de solutions initiales composées de flammelettes stationnaires adiabatiques. Ce modèle a été validé avec succès sur la flamme D de Sandia, et utilisé plus récemment par Mueller and Pitsch (2012). Bien qu'adapté à des simulations de flammes turbulentes non-confinées, ce modèle présente des limitations d'utilisation dans le cadre de la modélisation de la

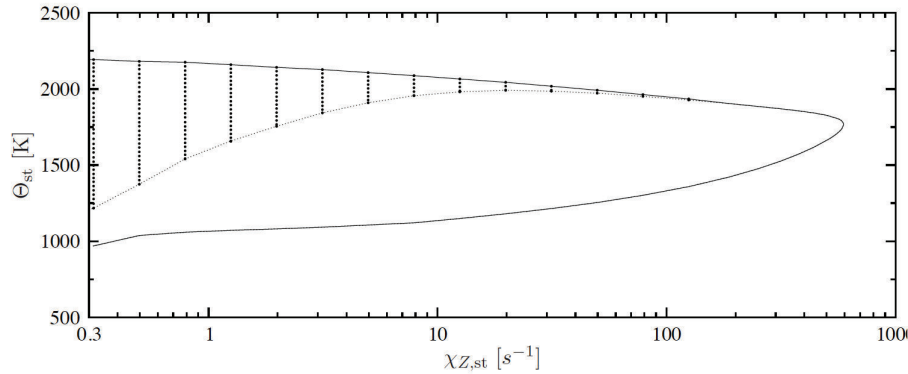


FIGURE 2.9 – Courbe en S dans des conditions relatives à la flamme D de Sandia. La courbe pleine correspond aux solutions des flammelettes stationnaires adiabatiques ; La courbe en pointillés correspond aux solutions des flammelettes stationnaires prenant en compte le rayonnement ; les symboles représentent les solutions de flammelettes instationnaires soumises au rayonnement (Thme and Pitsch (2008)).

combustion sans flamme. En effet, cela pose des problématiques de création de bases de données notamment en terme de coûts de génération pour des problèmes de dimensions élevées, mais cela limite aussi les pertes thermiques à des effets du rayonnement. À fort taux de dissipation scalaire, le rayonnement n'est pas actif puisque les temps de résidence associés sont très courts (Fig. 2.9). La température minimale atteinte pour un mélange après réaction est donc elle aussi limitée et n'est pas nécessairement cohérente avec la physique d'une configuration confinée à parois froides.

Par conséquent, pour inclure l'effet des pertes thermiques dans notre modélisation, une nouvelle approche devra être proposée.

2.6 Stockage de la base de données

La description d'une cinétique chimique détaillée par un jeu réduit de paramètres de contrôle est plus précise à mesure que le nombre de degrés de liberté augmente. Cependant, pour des nombres de dimension élevés, ou pour une tabulation très raffinée, le stockage et le traitement de la table peuvent devenir problématiques en terme de coût mémoire et de temps CPU.

Pour limiter les informations tabulées et accessibles en mémoire, Pope (1997) propose de construire la table en même temps que le calcul CFD. Cette technique, dite *In Situ Adaptive Tabulation* (ISAT), utilise un paramètre de contrôle d'erreur à prescrire : lorsque ce paramètre n'est pas atteint, les résultats déjà tabulés sont utilisés pour interpoler ou extrapoler une solution, et sinon, de nouveaux éléments sont calculés.

Une autre approche, qui connaît des développements récents, se base sur le caractère auto-similaire des flammes dans différentes configurations et applica-

tions. Ces propriétés intrinsèques aux flammelettes permettent de diminuer la taille de la base de données en modifiant la structure de la table. Initialement introduite par Ribert et al. (2006) dans un contexte laminaire, ce concept a été poussé plus avant dans un contexte turbulent (Veynante et al. (2008); Fiorina et al. (2009)) et pour différentes modélisations de phénomènes : injections multiples (Naudin et al. (2006)), dilution et pertes thermiques (Wang et al. (2010)), auto-allumage (Ribert et al. (2012)).

Enfin, Flemming et al. (2005) puis Ihme et al. (2008) ont introduit les réseaux de neurones artificiels (ANN pour *Artificial Neural Networks*) pour reproduire la tabulation avec une précision comparable ou accrue. L'étude et la viabilité de cette technique ont ensuite été développées pour optimiser la création des réseaux et contrôler l'erreur introduite (Ihme et al. (2009)). En terme d'ordre de grandeurs, cette approche est capable de transformer une table de 3,5 GB en un réseau de 0,7 MB, permettant ainsi une sauvegarde de mémoire extrêmement importante. Cependant, la création des ANN est délicate et peut prendre beaucoup de temps. De plus, l'estimation des grandeurs thermo-chimiques par ANN est trois à cinq fois plus longue qu'une interpolation tri-linéaire classique pour une table 3D. Toutefois, dans le cas d'une tabulation de dimension élevée, aucune analyse n'a encore été menée et il est difficile d'estimer l'efficacité de ces réseaux dans ces cas-là.

2.7 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons fait un inventaire des méthodes de tabulation usuelles. Dans ce travail, nous avons choisi de retenir l'utilisation du formalisme FPV. Toutefois, dans le cadre de la modélisation et de la simulation de la combustion MILD, une tabulation de dimension supérieure devra être développée et validée. Cela constitue l'objet des prochains chapitres.

Chapitre 3

Tabulation de la cinétique chimique pour la combustion diluée soumise à des pertes thermiques

Ce chapitre décrit en détail l'approche choisie pour prendre en compte les effets de la dilution et des pertes thermiques dans le modèle FPV. Tout d'abord, des hypothèses de modélisation sont formulées et justifiées pour permettre un développement du modèle. Le processus de génération des flammelettes est ensuite décrit, en portant un intérêt particulier sur les problématiques liées aux reformulations des conditions aux limites des flammelettes. Puis, deux nouveaux modèles de tabulation de complexité différente sont proposés et les paramètres de contrôle des systèmes explicités. Enfin, une analyse préalable de la structure des flammes laminaires diluées et soumises à des pertes thermiques est effectuée et montre la capacité de ces approches à capturer des phénomènes clés du régime de combustion sans flamme.

3.1 Introduction

Le modèle FPV, décrit plus tôt dans ce manuscrit, permet de prendre en compte à moindres coûts les effets d'une cinétique chimique détaillée en se basant sur une tabulation de solutions de flammelettes à contre-courant stationnaires. Dans le chapitre 1, nous avons émis l'hypothèse que cette approche pouvait être viable en combustion sans flamme si la variation de composition des réactifs due à la dilution y était intégrée.

Pour ce faire, des hypothèses de modélisation supplémentaires sont tout d'abord formulées au paragraphe 3.2. Puis, la génération des flammelettes diluées est discutée. Ensuite, une analyse préliminaire de flammelettes soumises

à divers niveaux de dilution est faite et on dégage des problématiques de caractérisation via l'approche FPV classique. Une reformulation des paramètres de contrôle est alors amenée. Enfin, ce chapitre s'attache à décrire sous divers angles la réponse de flammelettes soumises à des degrés de dilution et/ou de pertes thermiques variés.

3.2 Hypothèses de modélisation

Comme il a été montré précédemment, la combustion MILD est un régime de combustion où les réactifs sont massivement dilués par des produits de combustion et qui induit différents processus physiques parallèles. Pour une configuration confinée, trois processus couplés interviennent impliquant nombre de difficultés de modélisation :

- la combustion ;
- le mélange / la dilution des réactifs ;
- les échanges thermiques (rayonnement et/ou pertes thermiques aux murs dans le cas de parois refroidies).

La considération de ces aspects dans un modèle basé sur une tabulation de flammelettes de diffusion n'est pas triviale. Dans une approche de type FPV, la combustion et le mélange des réactifs évoluent suivant deux degrés de libertés, à savoir la fraction de mélange Z et la variable d'avancement Y_C . Néanmoins, en combustion MILD, la dilution a un rôle de première importance sur le développement de la chimie et doit être prise en compte. Cela impose qu'il faut prendre en compte de nouveaux degrés de liberté dans la génération et la tabulation des flammes laminaires.

Dans un cadre général, des gaz provenant de richesses différentes peuvent diluer les réactifs. Une conséquence directe est la possibilité qu'ont des poches de gaz brûlés chaudes, produites par un mélange pauvre, de réagir avec un jet de combustible frais. De plus, la dilution peut se faire à des taux différents du côté de l'oxydant et du côté du combustible. En outre, les réactifs peuvent être dilués par des produits de combustion ayant subi divers historiques d'échanges thermiques. En notant Z_i la fraction de mélange, α_i le taux de dilution, ϕ_i^D la richesse du diluant et β_i le défaut d'enthalpie associés à une condition aux limites d'une flamme de diffusion laminaire ($i = 1$ du côté oxydant et $i = 2$ du côté combustible), la figure 3.1 présente le nombre de degrés de liberté selon lesquels le vecteur $\boldsymbol{\psi} = (Y_1, \dots, Y_{N_k}, T)^\top$ peut évoluer. Clairement, la tabulation de $\boldsymbol{\psi}$ en fonction de ces paramètres est hors de portée : cela demanderait la génération d'un nombre bien trop important de flammelettes, mais poserait aussi d'évidents problèmes concernant la taille des bases de données, ainsi qu'une difficulté majeure à développer un modèle turbulent.

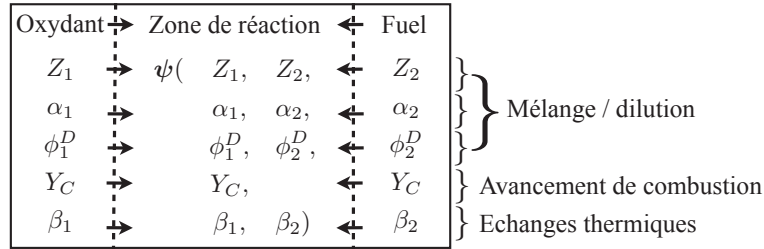


FIGURE 3.1 – Schéma des variables de contrôle d'une flamme laminaire de diffusion soumise à de la dilution et à des pertes thermiques dans un cadre général.

Un certain nombre d'hypothèses de modélisation doivent être formulées pour diminuer la complexité inhérente à l'inclusion de dimensions supplémentaires pour la dilution et les pertes thermiques dans notre méthode de tabulation de la cinétique chimique. En particulier, nous travaillerons sur la composition du diluant et sa distribution dans les gaz frais, ainsi que sur la modélisation des pertes thermiques pour diminuer le nombre de degrés de liberté autorisés.

3.2.1 Composition du diluant

Il est important de caractériser correctement la composition du diluant pour déterminer l'espace de variation de mélange des réactifs. Dans les configurations confinées, la dilution se fait par recirculation massive due à l'entraînement provoqué par un ou plusieurs jets (Wunning and Wunning (1997)). Nous considérerons donc que la combustion MILD est équivalente à un processus impliquant trois fluides dont l'un est créé au sein de la chambre. Au vu de l'homogénéité du mélange en aval de l'écoulement, on considère que les réactifs injectés dans la chambre de combustion sont parfaitement mélangés en aval de l'écoulement, et donc à richesse globale ϕ_G .

De plus, les temps de résidence importants rencontrés dans les configurations à combustion sans flamme, ainsi que l'absence de fluctuation de mélange et de température en aval de l'écoulement, tendent à prouver que les diluants sont à un état d'équilibre avant d'être mélangés aux réactifs (hors espèces lentes comme le NO). Il sera donc supposé que le diluant est à l'équilibre thermodynamique. Cela est similaire à l'approche développée par Wang et al. (2010) dans le cadre de la tabulation de flammelettes de prémélange diluées.

Avec ces hypothèses, la combustion MILD est similaire aux systèmes à trois injections, comme le JHC de Dally et al. (2002). Un schéma de ce type de configuration est donné Fig. 3.2. Pour ces configurations, des formalismes particuliers utilisant une tabulation d'éléments mono-dimensionnels laminaires ont été introduits (Hasse and Peters (2005); Naudin et al. (2006); Ihme et al. (2012)). Ces derniers emploient tous un système de deux fractions de mélange permettant de caractériser le mélange entre les trois fluides. Cela aboutit à un espace de variation de mélange bidimensionnel (Fig. 3.2). En combustion MILD, ce même

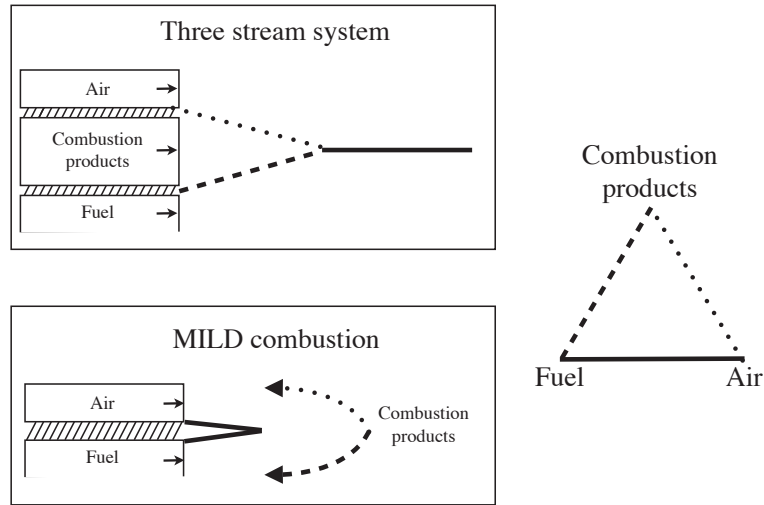


FIGURE 3.2 – Schématisation du modèle idéal d’une configuration tri-injection (haut gauche), d’une combustion MILD (bas gauche) et espace de variation de mélange (droite)

espace doit être couvert pour prédire le mélange du diluant avec les réactifs.

Cependant, contrairement aux configurations où le diluant est issu d’une alimentation externe, on s’intéresse ici aux cas où le diluant est créé dans la chambre de combustion (Fig. 3.2). Aussi, le diluant doit être caractérisé par un scalaire réactif, et le formalisme utilisé pour des systèmes tri-injections exposé par Hasse and Peters (2005) ou plus récemment par Naudin et al. (2006) ou Ihme et al. (2012) n’est plus valable.

3.2.2 Présence des réactifs dans les gaz frais

Comme expliqué dans le chapitre 1, différentes méthodes de dilution sont employées pour établir un régime de combustion sans flamme. Lorsque la configuration est caractérisée par une injection centrale de combustible entourée d’injection(s) d’air, le(s) jet(s) d’air entraîne(nt) une grande quantité de produits de combustion, favorisant une dilution du comburant (Wunning and Wunning (1997)). Au contraire, lorsque la configuration présente une injection centrale d’air entourée d’injections de combustible de faible quantité de mouvement, introduits directement dans les zones de recirculation, un mélange entre le combustible pur et le diluant est privilégié (Weber et al. (1999), Tsuji et al. (2003)). De manière plus générique cependant, la dilution peut jouer sur n’importe quel jet de réactif.

La littérature offre peu d’informations sur le comportement des flammes laminaires non-prémélangées soumises à des variations de composition et de température des conditions aux limites dans le cadre de combustion sans flamme. Choi and Katsuki (2002) ont montré une forte diminution du NO lors de la di-

lution de l'entrée d'air ou de combustible par des produits de combustion. Une étude similaire mais plus récente de Hamdi et al. (2009) a confirmé ces conclusions, et étendu l'analyse à l'influence de l'étirement de la flamme. Une étude plus poussée sur le comportement instationnaire des flammelettes en fonction des niveaux de dilution a été menée par Abtahizadeh et al. (2012). Ces derniers ont montré la forte dépendance des temps d'auto-allumage des flammelettes à l'intensité de la dilution, mais aussi à la formulation des conditions aux limites. En effet, trois différentes approches peuvent être adoptées :

- la dilution du comburant ;
- la dilution simultanée du combustible et du comburant ;
- la dilution du combustible.

La méthode la plus adaptée à la modélisation du processus de combustion dans une configuration doit idéalement dépendre de sa géométrie et de la topologie de l'écoulement. La méthode de dilution appliquée à la formulation des conditions aux limites des flammelettes tabulées montrant des différences de comportement des flammelettes, et notamment à haut niveau de dilution, il est ici choisi de diluer simultanément et avec le même taux de dilution les deux conditions aux limites du système d'équations qui régissent les flammelettes à contre-courant. Cette hypothèse est cohérente avec la simulation CFD des chapitres 5 et 6 dans laquelle, en sous-maille, on néglige les fluctuations de diluant : ce dernier est fixé et égal du côté oxydant et du côté combustible.

3.2.3 Échanges thermiques

Les pertes thermiques par rayonnement ou conducto-convection dans une configuration confinée diminuent la température des gaz chauds. Dans le chapitre 2, nous avons mis en avant les limitations de méthodes déjà développées pour la simulation de configurations opérant en régime de combustion sans flamme. Dans le cas particulier de la combustion confinée fortement diluée, une autre approche peut être considérée : les pertes thermiques peuvent être prises en compte via une variation de la température ou de l'enthalpie du diluant (Wang et al. (2010), Abtahizadeh et al. (2012)).

En fait, la nature des pertes thermiques appliquées aux flammelettes tabulées n'importe pas dans l'espace des compositions (Fiorina et al. (2003)). Cette propriété permet de diluer des flammelettes avec un diluant qui peut avoir n'importe quelle température. Cependant, cela présuppose aussi qu'il ne peut y avoir de pertes thermiques sans dilution ou présence de gaz brûlés. Cette hypothèse est cohérente avec le fait que les diminutions de températures liées aux pertes thermiques sont importantes pour des temps de résidence longs, et donc pour une combustion déjà fortement initiée.

Deux modèles seront ici développés. Une première approche consistera à

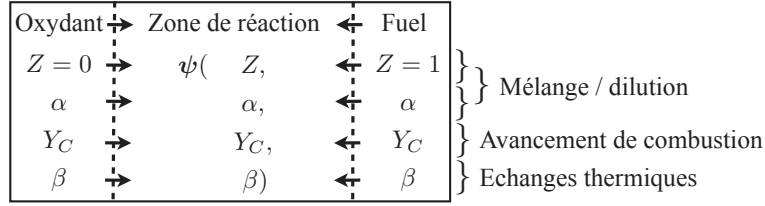


FIGURE 3.3 – Schéma des variables de contrôle d’une flamme laminaire de diffusion soumise à de la dilution et à des pertes thermiques avec les hypothèses de modélisation effectuées.

prendre en compte les variations de température du diluant. La deuxième approche constituera un cas particulier de la première, en supposant que la température du diluant est fixée (comme dans l’étude de [Abtahizadeh et al. \(2012\)](#)).

3.2.4 Résumé des hypothèses : degrés de liberté autorisés

Un certain nombre d’hypothèses simplificatrices ont été formulées pour permettre la tabulation des grandeurs thermo-chimiques en fonction d’un nombre restreint de paramètres. En particulier, on suppose que le diluant est issu d’une combustion à richesse constante, que le taux de dilution est le même du côté combustible et du côté comburant, et que l’on relie les pertes thermiques au défaut d’enthalpie du diluant. En notant Z la fraction de mélange, α le taux de dilution et β le défaut d’enthalpie du diluant, la figure 3.3 présente le nombre de degrés de liberté selon lequel le vecteur $\psi = (Y_1, \dots, Y_{N_k}, T)^\top$ peut évoluer.

3.3 Génération de flammelettes stationnaires diluées

En considérant les hypothèses effectuées précédemment, les équations de flammelettes stationnaires à contre-courant mono-dimensionnelles s’écrivent, en notant $\psi = (Y_1, \dots, Y_{N_k}, T)^\top$ et $\dot{\omega}$ le vecteur $(\dot{\omega}_{Y_1}, \dots, \dot{\omega}_{Y_{N_k}}, \dot{\omega}_T)^\top$:

$$-\frac{\chi Z}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial Z^2} = \dot{\omega} \quad (3.1)$$

avec les conditions aux limites associées :

$$\psi(Z = 0) = \psi^{Ox} \quad (3.2)$$

$$\psi(Z = 1) = \psi^F \quad (3.3)$$

où les exposants F et Ox symbolisent respectivement les conditions limites côté combustible et côté oxydant. Pour prendre en compte des variations de composition et d’enthalpies liées à la dilution par des produits de combustion, on propose dans cette section une reformulation des conditions aux limites de l’équation eq. 3.1.

3.3.1 Définitions - Formulation des conditions limites de flammelettes stationnaires

Les conditions aux limites de flammelettes diluées sont fonction des paramètres de dilution α et de pertes thermiques β :

$$\psi(Z = 0) = \psi^{Ox}(\alpha, \beta) \quad (3.4)$$

$$\psi(Z = 1) = \psi^F(\alpha, \beta) \quad (3.5)$$

où les exposants F et Ox symbolisent respectivement les conditions limites côté combustible et côté oxydant.

La définition de α et de β sont implicitement imposées par les hypothèses effectuées précédemment :

- α est défini comme le rapport de masse entre les gaz frais non dilués et le diluant dans l'injection d'air et de fuel des flammelettes laminaires, nul en l'absence de diluant et unitaire lorsqu'un mélange est saturé de diluant ;
- β est défini comme le défaut d'enthalpie du diluant nul lorsque l'enthalpie du diluant est égale à celle obtenue en l'absence de perte thermique, et égal à un pour des pertes thermiques maximales.

En notant Y_k^D la fraction massique de l'espèce k dans le diluant pur, obtenue par un calcul à l'équilibre à richesse globale du système, et \mathcal{H}^D l'enthalpie totale du diluant, ces définitions imposent :

$$Y_k^F(\alpha, \beta) = \alpha(Y_k^D(\beta) - Y_k^F|_{\alpha=0; \beta=0}) + Y_k^F|_{\alpha=0; \beta=0} \quad (3.6)$$

$$\mathcal{H}^F(\alpha, \beta) = \alpha(\mathcal{H}^D(\beta) - \mathcal{H}^F|_{\alpha=0; \beta=0}) + \mathcal{H}^F|_{\alpha=0; \beta=0} \quad (3.7)$$

$$Y_k^{Ox}(\alpha, \beta) = \alpha(Y_k^D(\beta) - Y_k^{Ox}|_{\alpha=0; \beta=0}) + Y_k^{Ox}|_{\alpha=0; \beta=0} \quad (3.8)$$

$$\mathcal{H}^{Ox}(\alpha, \beta) = \alpha(\mathcal{H}^D(\beta) - \mathcal{H}^{Ox}|_{\alpha=0; \beta=0}) + \mathcal{H}^{Ox}|_{\alpha=0; \beta=0} \quad (3.9)$$

avec

$$\mathcal{H}^D(\beta) = \beta(\mathcal{H}^D|_{\beta=1} - \mathcal{H}^D|_{\beta=0}) + \mathcal{H}^D|_{\beta=0} \quad (3.10)$$

où l'enthalpie minimale du diluant $\mathcal{H}^D|_{\beta=1}$ est calculée à partir de la température minimale T_{min}^D que ce dernier peut atteindre et des fractions massiques d'espèces à l'équilibre pour cette température $Y_k^D|_{T_{min}^D}$:

$$\mathcal{H}^D|_{\beta=1} = \int_{T_0}^{T_{min}^D} C_p dT + \sum_k \Delta h_{fk}^0 Y_k^D|_{T_{min}^D} \quad (3.11)$$

où T_0 est la température de référence (dans cette étude égale à 298 K). La spécification de la température minimale T_{min}^D , qui a été définie comme la température atteinte à richesse globale pour des pertes thermiques *maximale* doit

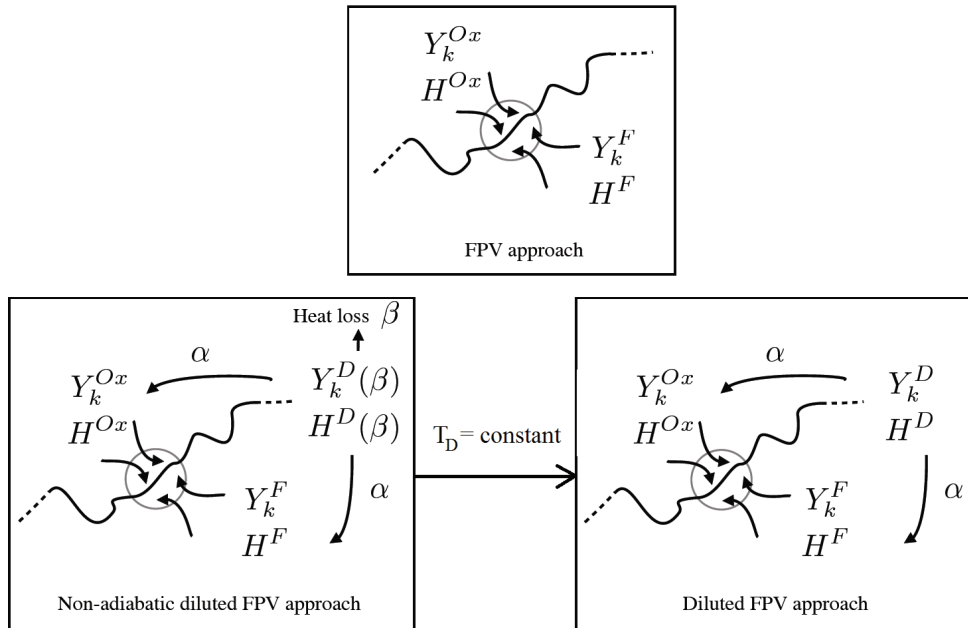


FIGURE 3.4 – Schéma récapitulatif des différentes contraintes imposées sur la température et les espèces des conditions aux limites utilisées pour générer les flammelettes à contre-courant. L’approche FPV est présentée en haut. En bas à gauche, l’approche NADFPV (pour Non-Adiabatic Diluted Flamelet Progress Variable approach) introduit le paramètre de dilution α , et le défaut d’enthalpie du diluant β qui caractérise les pertes thermiques. Dans le cas simplifié où le diluant est supposé à température constante, on définit l’approche dite DFPV (pour Diluted Flamelet Progress Variable approach), illustrée en bas à droite.

être prescrite. Cette température doit être suffisamment faible pour permettre de couvrir l’ensemble des possibilités de pertes thermiques subies par un mélange. Cependant, il faut garder à l’esprit que si la température minimale du diluant est très faible, la discrétisation utilisée sur le paramètre β doit avoir un nombre suffisant de points pour garantir une précision fine dans la tabulation. La connaissance *a priori* des pertes thermiques globales dans une configuration est alors utile pour prescrire T_{min}^D .

Notons que la définition du paramètre β donnée eq. 3.10 est indépendante de la fraction de mélange, de l’avancement des réactions chimiques et du niveau de dilution. β n’est effectivement défini que par rapport à l’enthalpie du diluant pur. Cette propriété apportera des simplifications pour la prise en compte des interactions chimie-turbulence.

Cela correspond à une tabulation de dimension 4 pour laquelle la dilution et les pertes thermiques peuvent évoluer différemment en temps et en espace : cette approche sera dorénavant appelée NADFPV, pour *Non-Adiabatic Diluted Flamelet Progress Variable approach*. Un résumé des notations et des dépendances des conditions aux limites de flammelettes employées est fourni Fig. 3.4.

Une autre approche simplifiée, similaire à celle développée dans l'étude de [Abtahizadeh et al. \(2012\)](#), peut aussi être considérée : on peut en effet supposer que la température du diluant est constante et inférieure à la température adiabatique obtenue à richesse globale (Fig. 3.4). Cette approche fait ainsi l'hypothèse que la dilution et les pertes thermiques sont des phénomènes parfaitement équivalents en temps et en espace. Cette simplification est séduisante puisqu'elle simplifie la génération et la tabulation des flammelettes laminaires. En effet, le paramètre β y est fixé, et la tabulation ne dépend plus que des 3 paramètres (Z, χ_Z, α) . Cette modélisation, nommée DFPV (pour *Diluted FPV approach*), introduit une hypothèse forte dont les effets sont pour l'instant inconnus. Ce chapitre donnera des éléments de comparaison entre cette méthode simplifiée et l'approche plus globale NADFPV proposée.

3.3.2 Réactivité des conditions limites

Le système d'équations 3.6-3.9 permet de prendre en compte indépendamment une variation de composition et d'énergie des réactifs. Cependant, pour des niveaux de dilution importants, ces mélanges peuvent devenir réactifs. En particulier, du côté fuel, la présence d'oxygène excédentaire dans le diluant pouvant *a priori* entraîner un auto-allumage du mélange, ou des températures élevées menant à une dissociation du méthane. Ces évolutions peuvent complexifier la génération des flammelettes, en introduisant des échelles de temps cinétiques variées. Dans ce travail, nous ne considérerons pas l'évolution instationnaire des conditions aux limites des flammelettes. Nous évaluons ici l'erreur introduite par cette hypothèse.

Afin de quantifier le caractère hors-équilibre des conditions aux limites, on peut calculer l'évolution temporelle des espèces et de la température avec les équations 0D suivantes, résolues avec le package CHEMKIN ([Kee et al. \(1985\)](#)) :

$$\rho \partial_t Y_k = \rho \dot{\omega}_k \quad (3.12)$$

$$\rho \partial_t T = \rho \dot{\omega}_T \quad (3.13)$$

de conditions initiales suivantes :

$$Y_k|_{t=0} = \alpha(Y_k|_{\alpha=1} - Y_k|_{\alpha=0}) + Y_k|_{\alpha=0} \quad (3.14)$$

$$\mathcal{H}|_{t=0} = \alpha(\mathcal{H}^D - \mathcal{H}|_{\alpha=0}) + \mathcal{H}|_{\alpha=0} \quad (3.15)$$

Les conditions d'injections choisies sont celles de la configuration de [Verissimo et al. \(2011\)](#), qui sera par ailleurs simulée dans le chapitre suivant ¹. Ces données sont fournies Tab. 3.1. Connaissant la richesse $\phi_G = 0.588$ associée à cette configuration, la composition du diluant peut être calculée. Elle est donnée pour deux températures différentes imposées Tab. 3.2.

1. Dans ce chapitre, tous les calculs sont effectués sous les conditions d'injections de cette même configuration.

	Fuel	Oxydant
Température [K]	300,0	673,0
Y_{CH_4}	1,0	0,0
Y_{O_2}	0,0	0,23
Y_{N_2}	0,0	0,77

TABLE 3.1 – Compositions et températures des entrées de combustible et de comburant de la configuration de *Verissimo et al. (2011)*.

	$T_1 = 1910,0$ [K]	$T_2 = 1470,0$ [K]
Y_{O_2}	$9,00.10^{-2}$	$9,03.10^{-2}$
Y_{N_2}	0,744	0,744
Y_{CO_2}	$9,06.10^{-2}$	$9,07.10^{-2}$
Y_{H_2O}	$7,39.10^{-2}$	$7,43.10^{-2}$
Y_{CO}	$1,23.10^{-4}$	$6,05.10^{-7}$
Y_{OH}	$6,56.10^{-4}$	$2,97.10^{-5}$

TABLE 3.2 – Composition du diluant pour deux températures imposées : la température adiabatique de combustion T_1 à cette richesse, et une température T_2 refroidie. Les autres espèces sont omises pour plus de clarté.

Dans le cas de la dilution de l'air, aucune réaction majeure n'intervient (non illustré ici). Cela est dû au fait que le diluant est pauvre (il n'y a pas de combustible présent dans le diluant à l'équilibre) et que la différence de température entre les gaz frais et le diluant n'est pas aussi importante que du côté fuel, en raison du préchauffage de l'air. Ce comportement a été vérifié pour différentes richesses du diluant ($\phi_G = 0,77$ et $\phi_G = 1$).

Du côté combustible cependant, pour des niveaux de dilution importants, une modification de la température et des fractions massiques d'espèces est obtenue (Fig. 3.5). Ce changement est lié aux interactions entre le méthane et l'oxygène contenu dans le diluant et aux réactions endothermiques de dissociation de méthane à haute température. Au vu de ces résultats, l'hypothèse de non-équilibre du mélange diluant-réactif aux conditions limites peut être remise en cause. Pour des richesses de diluants différentes, ($\phi_G = 0,77$ et $\phi_G = 1$), ce type d'évolution à forts niveaux de dilution se retrouve. Prendre en compte ces effets dans la tabulation impose l'inclusion d'une dimension spécifique au temps de mélange entre le diluant et les réactifs avant combustion.

Malgré tout, deux points sont à noter pour étayer la faible importance d'une hypothèse de non-équilibre de ces mélanges. Tout d'abord, la figure 3.5 montre que la réactivité des conditions aux limites de flammes se fait pour des valeurs du paramètre de dilution α très élevées ($\alpha > 0,7$ dans ce cas-là) et s'initie pour des temps de plus en plus courts à mesure que la dilution augmente. Pour une dilution inférieure à 90%, ces temps peuvent être considérés longs devant les temps de résidence rencontrés dans la configuration de *Verissimo et al. (2011)*,

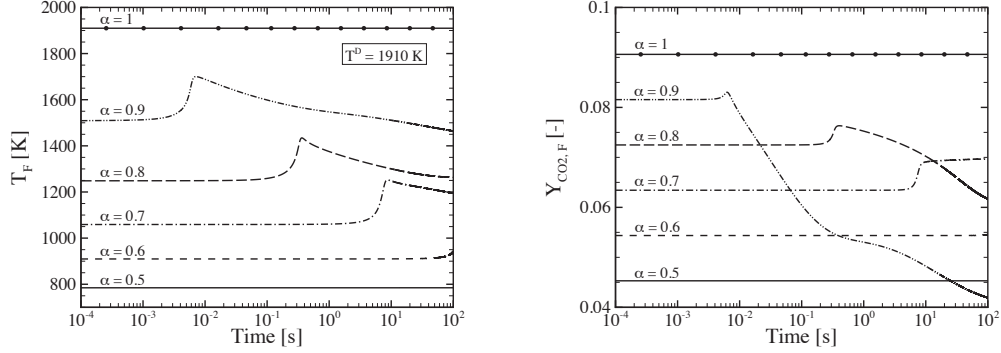


FIGURE 3.5 – Évolution temporelle de la température (gauche) et de la fraction massique de CO_2 (droite) dans l'entrée de combustible pour différents niveaux de dilution α . La richesse globale du diluant est $\phi_G^D = 0.588$ et sa température $T^D = 1910$ K. La représentation des résultats est arrêtée à 10^2 secondes pour décrire une gamme d'échelle de temps pertinente dans un contexte de simulations de configurations industrielles.

pour laquelle le temps de résidence global peut être estimé à $\tau_{res} = 0,059$ seconde (rapport du volume de la chambre sur le débit volumique d'injection des réactifs). En conséquence, prendre une condition d'équilibre pour ces cas reviendrait à faire intervenir des temps de résidence physiquement irréalistes dans la tabulation. Ensuite, si on abaisse la température du diluant, ce qui revient à augmenter les pertes thermiques, à une dilution élevée, la réponse des conditions aux limites se fait bien plus lentement (Fig. 3.6). Ceci est une conséquence directe de l'écriture de la loi d'Arrhenius, les températures d'activation de certaines réactions n'étant pas atteintes. Cela se remarque sur la température aussi bien que sur les espèces, leurs variations ayant lieu sur des échelles de temps de l'ordre du dixième de seconde.

Étant donné que les pertes thermiques doivent physiquement être plus importantes pour des niveaux de dilution (et donc des temps de résidence) élevés, l'hypothèse de non-équilibre des conditions aux limites des équations de flammelette est valable. Cette hypothèse sera retenue dans ce travail. Une erreur est introduite pour des niveaux de dilution élevés et lorsque la combustion est adiabatique ou soumise à de faibles pertes thermiques, mais elle peut être considérée négligeable pour des configurations confinées.

3.3.3 Problématique de caractérisation - Influence de la dilution

À ce stade de l'étude, la résolution de l'équation eq. 3.1 peut se faire en prescrivant un taux de dissipation scalaire de référence χ_{ref} , une valeur du paramètre de dilution α et du défaut d'enthalpie β . La figure 3.7 illustre la distribution de la température en fonction de la fraction de mélange Z pour différents niveaux de dilution et pour $\beta = 0$ ($T^D = T^D|_{adia}$). Le schéma de

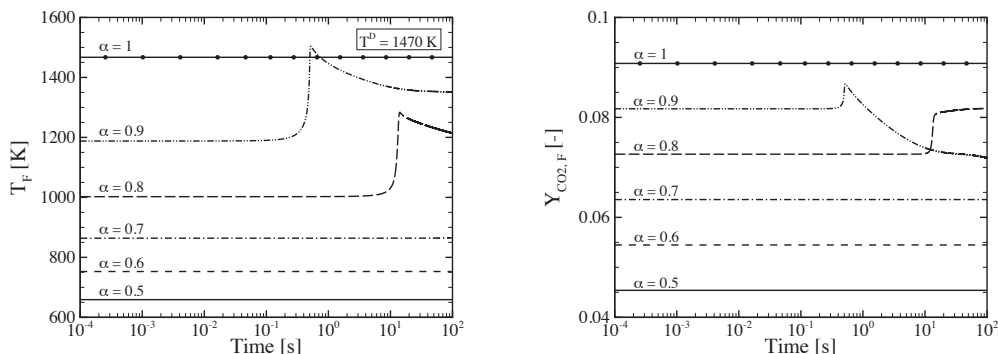


FIGURE 3.6 – Évolution temporelle de la température (gauche) et de la fraction massique de CO_2 (droite) dans l'entrée de combustible pour différents niveaux de dilution α . La richesse globale du diluant est $\phi_G^D = 0,588$ et sa température $T^D = 1470$ K. La représentation des résultats est arrêtée à 10^2 secondes pour représenter une gamme d'échelle de temps pertinente dans un contexte de simulations de configurations industrielles.

cinétique chimique utilisé est le GRI 3.0 (Smith et al.)². Dans cette sous-section, le diluant est composé de gaz brûlés à l'équilibre issus d'un mélange à richesse $\phi_G^D = 0,588$.

Plusieurs points sont à noter concernant la structure de flamme en régime stationnaire pour des valeurs croissantes du paramètre α . En premier lieu, l'ajout de gaz brûlés dans les injections de fuel et d'oxydant entraîne une augmentation progressive de la température maximale. Cela est dû aux variations d'enthalpie introduites par la dilution des conditions aux limites, qui sont illustrées Fig. 3.8.

De plus, les profils de température présentent des pentes de moins en moins prononcées. Cela est à mettre en relation avec le dégagement de chaleur, dont le maximum diminue lors de la raréfaction des réactifs (Fig. 3.9) et avec l'augmentation de température des conditions aux limites. Le dégagement de chaleur maximal intervient pour les mêmes fractions de mélange que les pics de température. De plus, pour des niveaux de dilution supérieurs à $\alpha = 0,7$, la zone pyrolytique caractérisée par un dégagement de chaleur négatif disparaît. Cela est en accord avec les observations faites en régime de combustion MILD par de Joannon et al. (2007) et de Joannon et al. (2009).

Pour expliquer la localisation des pics de température et de dégagement de chaleur, qui ont lieu aux alentours de la stœchiométrie pour chaque niveau de dilution, on peut calculer la fraction de mélange à la stœchiométrie en fonction du paramètre de dilution α . Pour simplifier ce développement, on suppose que les flammes exhibent une structure de type Burke-Schumann, pour laquelle la

2. Différents schémas cinétiques ont été testés dans ce chapitre, notamment le GRI 2.0 de Bowman et al. (1995), et les conclusions tirées se sont avérées être les mêmes.

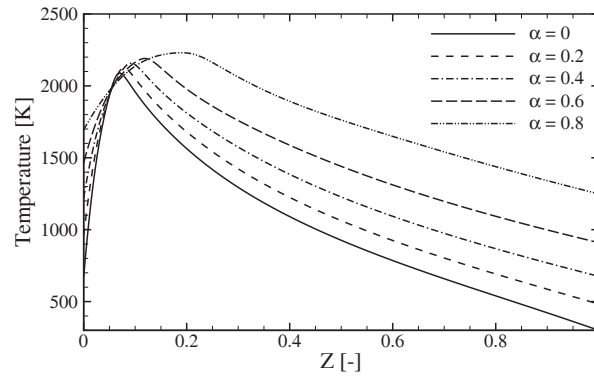


FIGURE 3.7 – *Température en fonction de la fraction de mélange pour différents niveaux de dilution. Le taux de dissipation scalaire de référence est ici fixé à $\chi_{ref} = 30 \text{ s}^{-1}$ et le paramètre β a une valeur nulle.*

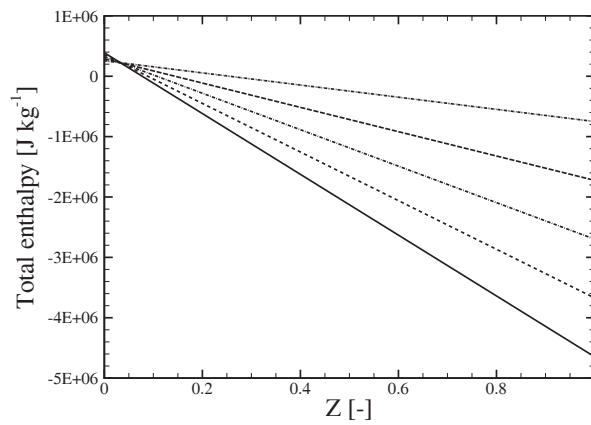


FIGURE 3.8 – *Enthalpie en fonction de la fraction de mélange pour différents niveaux de dilution. La correspondance entre les styles de courbes et les niveaux de dilution est indiquée Fig. 3.7.*

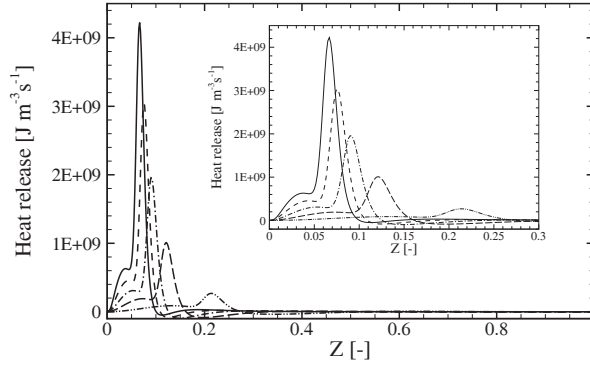


FIGURE 3.9 – Dégagement de chaleur en fonction de la fraction de mélange pour différents niveaux de dilution. La correspondance entre les styles de courbes et les niveaux de dilution est indiquée Fig. 3.7.

fraction de mélange à la stœchiométrie est donnée par :

$$Z_{st} = \frac{1}{1 + \frac{sY_{F,0}}{Y_{O_x,0}}} \quad (3.16)$$

où s est le coefficient stœchiométrique et où $Y_{F,0}$ et $Y_{O_x,0}$ dénotent respectivement la fraction massique de combustible et celle d'oxydant contenue dans l'injection de fuel (respectivement d'oxydant). On a par construction :

$$Y_{F,0} = \alpha(Y_F^D - Y_{F,0}|_{\alpha=0}) + Y_{F,0}|_{\alpha=0} \quad Y_{O_x,0} = \alpha(Y_{O_x}^D - Y_{O_x,0}|_{\alpha=0}) + Y_{O_x,0}|_{\alpha=0} \quad (3.17)$$

En supposant que le diluant est issu d'une combustion globalement pauvre, et qu'il n'y a pas de combustible dans l'oxydant, on peut réduire ces équations à :

$$Y_{F,0} = (1 - \alpha)Y_{F,0}|_{\alpha=0} \quad Y_{O_x,0} = (1 - \alpha)Y_{O_x,0}|_{\alpha=0} + \alpha Y_{O_x}^D \quad (3.18)$$

Par conséquent, en utilisant ces relations, on peut réécrire la fraction mélange à la stœchiométrie en fonction du paramètre de dilution α :

$$Z_{st} = \frac{1}{1 + \frac{s(1 - \alpha)Y_{F,0}|_{\alpha=0}}{(1 - \alpha)Y_{O_x,0}|_{\alpha=0} + \alpha Y_{O_x}^D}} \quad (3.19)$$

En changeant la composition des injections de réactifs, la dilution modifie la location de la stœchiométrie dans l'espace de fraction de mélange (Fig. 3.10). Il peut être noté qu'un point singulier apparaît pour un niveau de dilution maximal, l'espace de fraction de mélange se réduisant à un unique point qui définit le diluant pur. Cette évolution de la zone de stœchiométrie explique le déplacement du pic de température et de dégagement de chaleur vers des fractions de mélange de plus en plus élevées. L'augmentation sensible de température

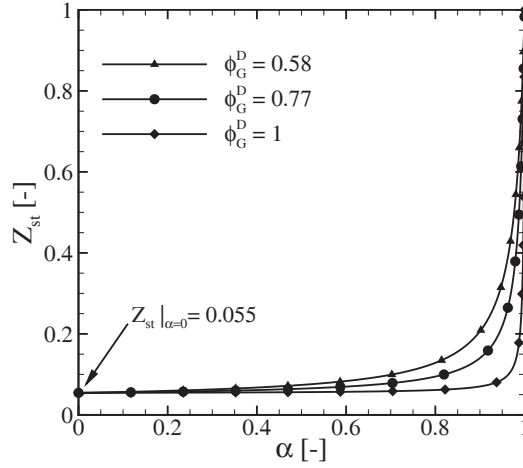


FIGURE 3.10 – Fraction de mélange à la stœchiométrie en fonction du niveau de dilution α pour des valeurs différentes de richesse globale du diluant ϕ_G^D . On considère ici une combustion méthane-air.

entre les différents cas de la figure 3.7 est, quant à elle, imputable au gain de température des conditions aux limites par dilution.

De plus, et il s'agit d'une conséquence directe de la prescription du taux de dissipation scalaire de référence, l'intensité du processus de diffusion est modifiée par la dilution. On rappelle ici la formulation adoptée pour la distribution du taux de dissipation scalaire :

$$\chi_Z(Z) = \chi_{Z,st} \exp \left\{ 2 \left([\operatorname{erfc}^{-1}(2Z_{st})]^2 - [\operatorname{erfc}^{-1}(2Z)]^2 \right) \right\} \quad (3.20)$$

La distribution du taux de dissipation scalaire est affectée par la modification de la valeur de la fraction de mélange à la stœchiométrie, puisque l'on prescrit avant calcul d'une flammelette la valeur de $\chi_{Z,st}$ dans l'équation 3.20. On note qu'une diminution globale de χ_Z pour chaque fraction de mélange est obtenue lorsque l'on trace χ_Z en fonction de Z à $\chi_{Z,st}$ imposé (Fig. 3.11). Cet effet se retrouve sur la variable d'avancement, pour laquelle on observe une distribution en fonction de Z différente pour chacun des niveaux de dilution (Fig. 3.12(a)).

La diminution des gradients sur la fraction de mélange de la combustion avec la dilution se retrouve aussi sur la distribution des espèces (Fig. 3.12). La variable d'avancement en fonction de la fraction de mélange devient en effet de plus en plus homogène, tout comme la distribution de fraction massique de OH, signifiant un élargissement de la zone de réaction, caractéristique de la combustion sans flamme.

Bien que la comparaison de ces flammelettes reste pertinente pour étudier la structure de flamme à un niveau de dilution α fixé, les différences soulevées sur la modification de la fraction de mélange à la stœchiométrie, la répartition du taux du dissipation scalaire et de la variable d'avancement mettent en avant la difficulté de caractériser de manière univoque ces flammelettes au sein d'une

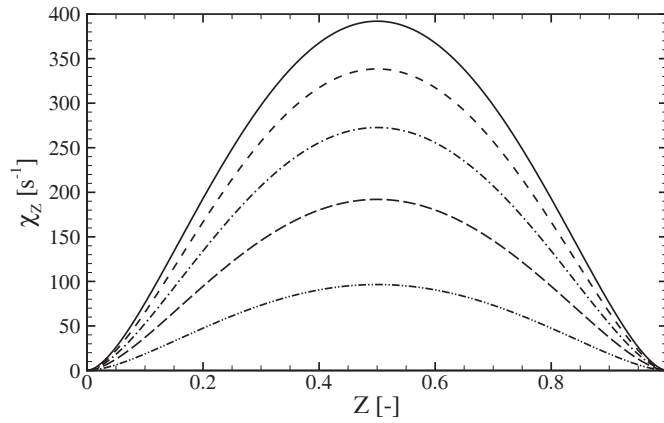


FIGURE 3.11 – Distribution du taux de dissipation scalaire en fonction de la fraction de mélange Z pour différents niveaux de dilution à $\chi_{Z,st} = 30 \text{ s}^{-1}$. La légende détaillée est indiquée Fig. 3.7.

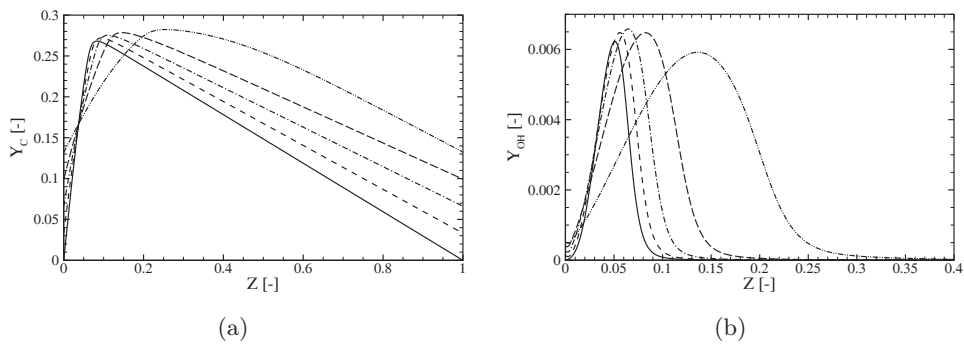


FIGURE 3.12 – (a) : Variable d'avancement Y_C en fonction de la fraction de mélange pour différents niveaux de dilution; (b) : fraction massique de OH en fonction de la fraction de mélange pour différents niveaux de dilution. La légende détaillée est indiquée Fig. 3.7.

structure de données. En effet, dans l'optique d'utiliser une approche FPV, les paramètres de contrôle classiques doivent être redéfinis. La description d'un jeu de variables dynamiques assurant une caractérisation unique de chaque flammelette pour tout niveau de dilution et/ou de pertes thermiques et/ou d'avancement de réaction est donnée dans le chapitre suivant.

3.4 Extension de l'approche FPV - Paramètres de contrôle

À ce stade, toute grandeur thermochimique ψ est fonction de $(Z, \chi_Z, \alpha, \beta)$. Ces paramètres de contrôle ne peuvent pas être directement décrits par des équations de transport spécifiques. Afin de développer une approche FPV adaptée, les quatre dimensions nécessaires à la description univoque des champs scalaires sont explicitées ci-après.

3.4.1 Caractérisation du mélange

Pour deux niveaux distincts de dilution α , le scalaire passif Z introduit pour décrire le mélange dans les équations de flammelettes stationnaires ne conserve pas la richesse locale du mélange. Pour illustrer cette propriété, on peut introduire la richesse du mélange $\phi = sY_{F,0}/Y_{Ox,0}$ où s est le coefficient stœchiométrique et $Y_{F,0}$ (respectivement $Y_{Ox,0}$) la fraction massique de fuel (respectivement d'oxydant) présente avant combustion. L'expression des conditions aux limites de flammelettes exprimée eqs. 3.6 et 3.8 permet de calculer ϕ pour chaque fraction de mélange. On rappelle que par construction, on a :

$$Y_{F,0} = \alpha(Y_F^D - Y_{F,0}|_{\alpha=0}) + Y_{F,0}|_{\alpha=0} \quad Y_{Ox,0} = \alpha(Y_{Ox}^D - Y_{Ox,0}|_{\alpha=0}) + Y_{Ox,0}|_{\alpha=0}$$

et que dans le cas d'une combustion méthane-air, en supposant que le diluant est issu d'une combustion globalement pauvre, on peut réduire ces équations à :

$$Y_{F,0} = (1 - \alpha)Y_{F,0}|_{\alpha=0} \quad Y_{Ox,0} = (1 - \alpha)Y_{Ox,0}|_{\alpha=0} + \alpha Y_{Ox}^D$$

par conséquent, la richesse ϕ se réécrit :

$$\phi = \frac{s(1 - \alpha)Y_{F,0}|_{\alpha=0}}{(1 - \alpha)Y_{Ox,0}|_{\alpha=0} + \alpha Y_{Ox}^D} \quad (3.21)$$

Les fractions massiques $Y_{F,0}|_{\alpha=0}$ et $Y_{Ox,0}|_{\alpha=0}$ des mélanges non dilués peuvent s'écrire dans l'espace de fraction mélange dans le cas d'une combustion méthane-air :

$$Y_{F,0}|_{\alpha=0} = ZY_{CH_4}|_{\alpha=0, Z=1} \quad (3.22)$$

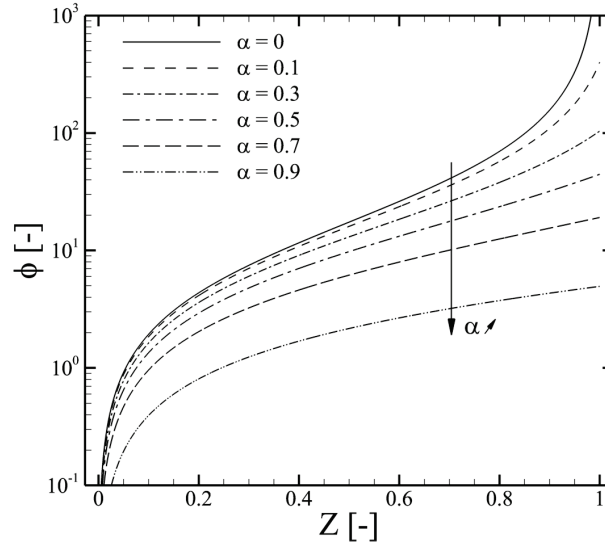


FIGURE 3.13 – Richesse ϕ en fonction de la fraction de mélange Z pour différents niveaux de dilution calculée à partir de l'équation 3.24. Le diluant est issu d'une combustion pauvre et $Y_{O_2}^D = 0,09$.

$$Y_{O_x,0}|_{\alpha=0} = 0,23 - ZY_{O_2}|_{\alpha=0,Z=0} \quad (3.23)$$

Avant combustion, une relation existe donc entre la fraction de mélange et la richesse, et s'obtient en intégrant les équations 3.22 et 3.23 dans l'égalité 3.21 :

$$\phi = \frac{s(1-\alpha)ZY_{CH_4}|_{\alpha=0,Z=1}}{(1-\alpha)(0,23 - ZY_{O_2}|_{\alpha=0,Z=0}) + \alpha Y_{O_x}^D} \quad (3.24)$$

Cette relation illustre bien le fait que la fraction de mélange Z n'est plus un scalaire passif et ne conserve pas la richesse d'un mélange, puisque pour une valeur de Z , ϕ évolue avec α (Fig. 3.13).

Aussi, l'utilisation d'une fraction de mélange assurant une correspondance univoque avec la richesse du mélange lui est préférable. Comme il a été vu au chapitre 2, les fonctions définies à partir des fractions massiques d'éléments sont régies par des équations de transport de scalaires passifs. Toutefois, la normalisation de ces fonctions doit ici être reformulée pour assurer qu'elles restent des scalaires passifs. Ces fonctions ne conservent cette propriété que lorsqu'elles sont normalisées par rapport aux conditions d'injections **non diluées** :

$$\xi = Y_e$$

$$Z_B = \frac{\xi - \xi_{\alpha=0}^{O_x}}{\xi_{\alpha=0}^F - \xi_{\alpha=0}^{O_x}} \quad (3.25)$$

où Y_e est la fraction massique de l'élément e . Notons que la formulation de Bilger de la fraction de mélange peut aussi être utilisée si cette normalisation particulière est appliquée, raison pour laquelle nous choisissons \mathcal{Z}_B comme nomenclature pour décrire la fraction de mélange.

Cette formulation a l'avantage majeur de conserver la richesse d'un mélange. De plus, en l'absence d'effets de diffusion différentielle, une relation simple existe entre \mathcal{Z}_B et Z , du fait du mélange linéaire sur les fractions massiques décrit eq. 3.6 et 3.8 :

$$Z = \frac{\mathcal{Z}_B - \mathcal{Z}_B^-(\alpha)}{\mathcal{Z}_B^+(\alpha) - \mathcal{Z}_B^-(\alpha)} \quad (3.26)$$

où $\mathcal{Z}_B^-(\alpha)$ (respectivement $\mathcal{Z}_B^+(\alpha)$) est la valeur minimale (respectivement maximale) de \mathcal{Z}_B pour le niveau de dilution α . En utilisant les équations eq. 3.6 et 3.8, il est possible d'exprimer les limites d'évolution de la fraction de mélange \mathcal{Z}_B . En notant $\mathcal{Z}_B^{\phi_G}$ la valeur de la fraction de mélange obtenue à richesse globale (et donc égale à celle du diluant), on a :

$$\mathcal{Z}_B^-(\alpha) = \alpha \mathcal{Z}_B^{\phi_G} \quad (3.27)$$

$$\mathcal{Z}_B^+(\alpha) = 1 - \alpha + \alpha \mathcal{Z}_B^{\phi_G} \quad (3.28)$$

Il vient alors :

$$Z = \frac{\mathcal{Z}_B - \alpha \mathcal{Z}_B^{\phi_G}}{1 - \alpha} \quad (3.29)$$

Cette formulation montre clairement la restriction de l'espace de composition des réactifs à un triangle combustible-comburant-diluant : à mesure que la dilution augmente, la variation de fraction de mélange \mathcal{Z}_B permise est diminuée, jusqu'au point singulier composé de diluant pur. La figure 3.14 illustre cette restriction. Il est intéressant de noter que cette formulation permet de conserver une précision dans la discrétisation de la fraction de mélange, le même nombre de points sur Z étant utilisé pour chaque niveau de dilution.

3.4.2 Caractérisation des effets hors équilibre

Le formalisme FPV décrit au chapitre 2 permet de s'affranchir de la dépendance des flammelettes au taux de dissipation scalaire de mélange χ_Z en introduisant le paramètre de progrès Λ , et de décrire toutes les solutions de l'équation 3.1. L'introduction d'une dimension spécifique à la dilution nécessite de vérifier deux propriétés pour tout couple (α, β) donné :

- le paramètre de progrès Λ doit identifier univoquement chaque solution des équations de flammelettes stationnaires ;
- la fonction \mathcal{F} qui à (\mathcal{Z}, Y_C) associe la fonction $\mathcal{G}(\mathcal{Z}, \Lambda)$ doit être bijective.

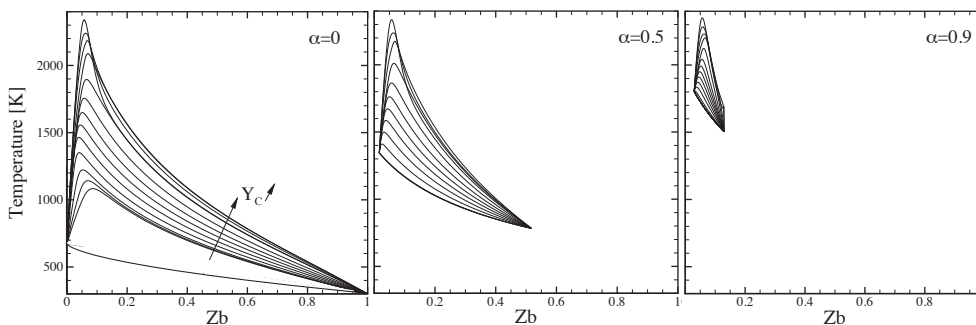


FIGURE 3.14 – Répartition de la température dans l'espace de fraction de mélange Z_B de l'état non-brûlé jusqu'à l'état de quasi-équilibre (flammelette très peu étirée) pour différents niveaux de dilution.

Le paramètre de progrès est généralement évalué à la stœchiométrie dans le modèle FPV. Cependant, cette évaluation n'est plus adéquate pour une tabulation type DFPV ou NADFPV, puisque les limites de mélange évoluent avec la dilution. En effet, en utilisant l'équation 3.29, et en considérant que le diluant est forcément issu de mélange pauvre, la restriction suivante est imposée pour toute grandeur thermochimique ψ : pour tout $Z_B > Z_B^{\phi_G}$ et pour tout $\alpha > \frac{1-Z_B}{1-Z_B^{\phi_G}}$ il n'existe aucune fonction de $[\Lambda^- ; \Lambda^+] \times [0 ; 1] \times [0 ; 1]$ dans \mathbb{R} qui associe au triplet (Λ, α, β) la grandeur thermochimique ψ .

La définition du paramètre de progrès est donc modifiée de manière à être utilisable dans n'importe quelle condition de diluant : elle est évaluée au seul point de la fraction de mélange pour laquelle α varie entre 0 et 1, à savoir la fraction de mélange à richesse globale $Z_B^{\phi_G}$:

$$\Lambda = Y_C|_{Z_B^{\phi_G}} \quad (3.30)$$

Les solutions de l'équation 3.1 pour la température sont présentées en Fig. 3.15(a). L'étude de l'évolution de la température pour des niveaux de dilution différents sera effectuée en section 3.5. Pour chacune de ces évolutions, on peut vérifier l'unicité des solutions pour toute valeur du paramètre de progrès Λ (Fig. 3.15(b)). Ce caractère invariant avec la dilution peut être validé pour tout paramètre β . Par conséquent, pour une fraction de mélange à richesse globale, le formalisme FPV reste valable.

La vérification analytique de la bijectivité de la fonction \mathcal{G} , qui associe à tout couple (Z_B, Λ) la fonction $\mathcal{F}(Z_B, Y_C)$, est délicate. Cependant, pour des niveaux de dilution et de pertes thermiques fixés, on peut vérifier cette propriété dans l'espace discret en s'assurant que toute surface définie par une grandeur thermochimique dans (Z_B, Y_C) n'admet pas de points de rebroussement (Fig. 3.16(a)). Cette vérification systématique a permis de montrer que la définition de la variable d'avancement choisie est plus adaptée que celle définie par $Y_C = Y_{CO_2} + Y_{CO}$, des points de rebroussement ayant été identifiés pour

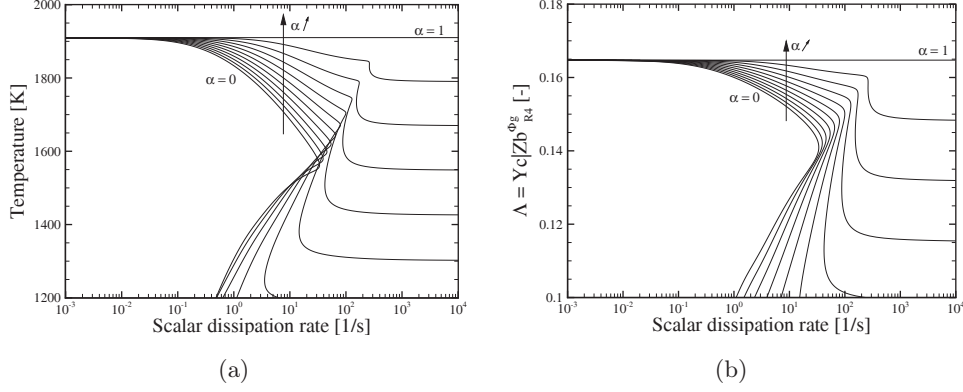


FIGURE 3.15 – (a) : Température en fonction du taux de dissipation scalaire de mélange pour différents niveaux de dilution ; (b) : Variable de progrès Λ en fonction du taux de dissipation scalaire de mélange pour différents niveaux de dilution. Les résultats sont illustrés pour une richesse de diluant $\phi_G = 0.588$, aucune perte thermique n'étant appliquée à ce dernier.

cette dernière.

Bien qu'une tabulation directe des solutions de flammelette soit possible en fonction de Y_C comme dans une formulation FPV classique, les bornes minimales et maximales de la variable d'avancement sont des fonctions du niveau de dilution. Afin de faciliter la lecture et le traitement de toute grandeur tabulée tout en gardant une précision optimale dans la base de données, il est préférable d'utiliser une variable d'avancement normalisée \mathcal{C} (Fig. 3.16(b))³ :

$$\mathcal{C} = \frac{Y_C - Y_C^{fresh}(\mathcal{Z}_B, \alpha, \beta)}{Y_C^{burnt}(\mathcal{Z}_B, \alpha, \beta) - Y_C^{fresh}(\mathcal{Z}_B, \alpha, \beta)} \quad (3.31)$$

L'introduction de ce mapping conforme fait intervenir les états non-brûlés et de quasi-équilibre des flammelettes : respectivement Y_C^{fresh} et Y_C^{burnt} . Ces variables de normalisation sont tabulées en fonction des variables dynamiques restantes et permettent de garantir la cohérence de la tabulation sur la variable d'avancement en fonction de la dilution et des pertes thermiques.

3.5 Structure de flamme en régime dilué

Maintenant que les paramètres de contrôle de la tabulation sont explicités, et qu'ils permettent d'identifier univoquement chaque flammelette, cette section s'attache à décrire l'impact de la dilution sur l'évolution des champs scalaires tabulés. À nouveau, les conditions d'injections seront celles explicitées

3. Cette normalisation est similaire à celle effectuée dans le modèle FPI (Fiorina et al. (2003), Fiorina et al. (2005b))

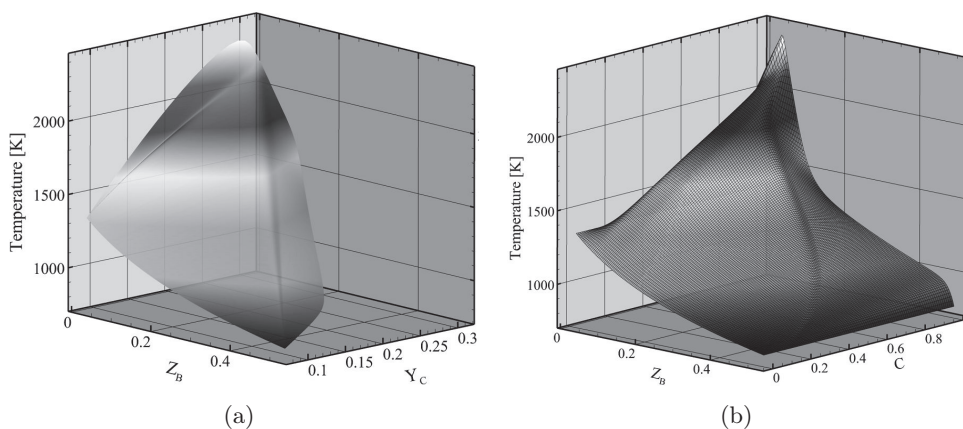


FIGURE 3.16 – (a) : Température en fonction de la fraction de mélange Z_B et de la variable d’avancement Y_C pour $\alpha = 0,5$ et $\beta = 0$; (b) : Température en fonction de la fraction de mélange Z_B et de la variable d’avancement normalisée C pour $\alpha = 0,5$ et $\beta = 0$. Le maillage utilisé est représenté à droite.

Tab. 3.1. Pour cette étude, 11 points ont été utilisés dans les directions α et β . Connaissant la richesse globale d’une configuration, cela revient à calculer 11×11 courbes en S, résultants au calcul d’approximativement 10^5 flammelettes stationnaires. Bien que le nombre de flammelettes à calculer soit élevé, on peut tirer parti de l’indépendance des paramètres de dilution α et de pertes thermiques β et paralléliser le processus de génération : la création d’une telle table laminaire quadri-dimensionnelle s’effectue par exemple en 3 heures sur 16 processeurs, ce qui reste acceptable et abordable dans un cadre industriel.

Deux cas différents sont présentés ici : le cas où la température du diluant correspond à la température adiabatique de combustion, et un cas où la température a été diminuée de 440 K. Notons que les conclusions tirées dans cette section s’appliquent à des richesses et des températures de diluant différentes (résultats non illustrés ici pour éviter les redondances de graphiques).

3.5.1 Diluant à température adiabatique de combustion ($T^D = T^D|_{\beta=0}$)

Un exemple des solutions des équations de flammelettes est donné Fig. 3.17. À mesure que la dilution augmente, plusieurs caractéristiques se dégagent sur l’évolution de la température. L’état d’équilibre, qui correspond à un espace attracteur, est le même pour chaque courbe, la température du diluant étant dans ce cas-là la température adiabatique de combustion. Cependant, la distribution de la température en fonction du taux de dissipation scalaire de mélange évolue pour des niveaux de dilution différents. En effet, lorsque la dilution augmente, trois aspects sont à noter :

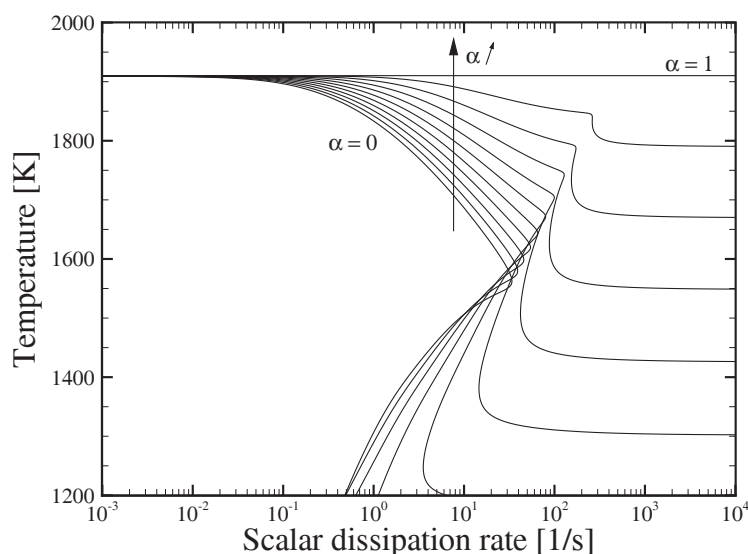


FIGURE 3.17 – Solutions des équations de flammelettes pour $Z_B = Z_B^{\phi_G}$ en fonction du taux de dissipation scalaire de mélange pour différents niveaux de dilution sans perte thermique.

- la branche non-brûlée de ces courbes en S présente une température croissante avec la dilution. Cela est en accord avec le fait que la dilution modifie la température des réactifs en apportant de la chaleur issue de la combustion ;
- un autre fait marquant est la disparition progressive de la branche instable de ces solutions pour une dilution croissante. Les points critiques de taux de dissipation scalaire de mélange d’allumage et d’extinction finissent par se confondre, comme expliqué par [Oberlack et al. \(2000\)](#) ;
- enfin, une extension notable de la branche stable de ces courbes est observable pour des niveaux de dilution élevés.

Ces aspects permettent d’ores et déjà de retrouver des phénomènes propres à la combustion MILD. En effet, si la dilution est suffisante, la combustion peut être stabilisée même en présence de forts taux de dissipation scalaire de mélange, tout en présentant une augmentation de température significativement inférieure à un cas non dilué. Pour préciser l’importance de la prise en compte de la dilution, une description relative à l’avancement de réaction est cependant nécessaire.

En traçant l’évolution de la température et des espèces en fonction de la variable d’avancement, l’effet de la dilution sans perte thermique sur les trajectoires chimiques peut être mis en avant (Fig. 3.18). Pour chacune des grandeurs thermochimiques, et pour des valeurs de la variable d’avancement élevées, les

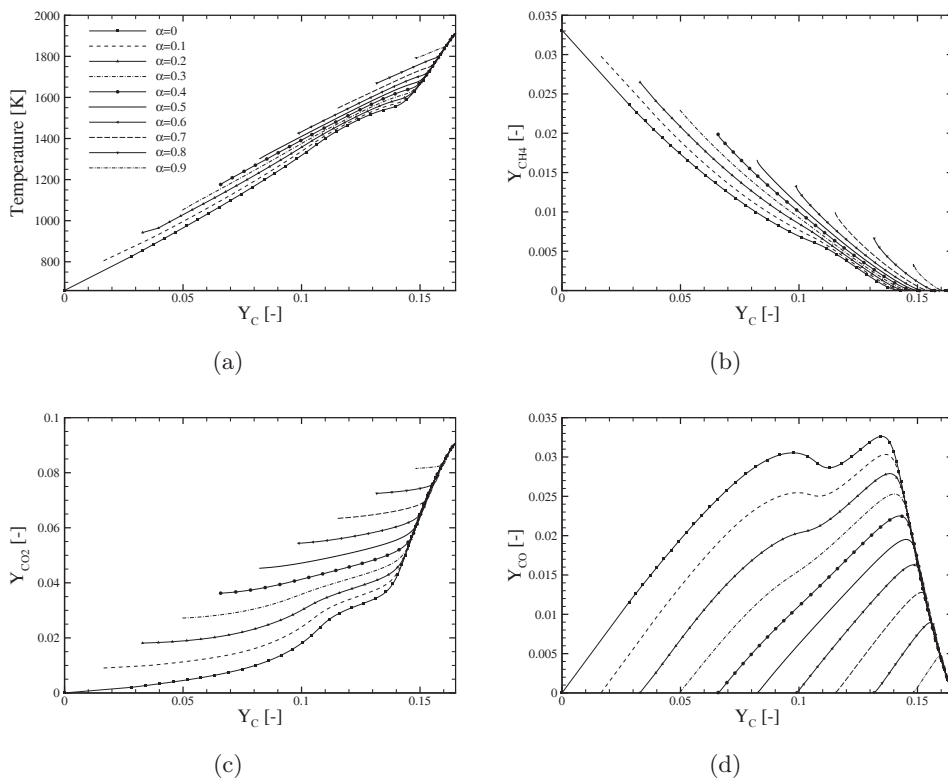


FIGURE 3.18 – Champs scalaires à richesse globale $\phi_G = 0,588$ en fonction de la variable d'avancement Y_C pour plusieurs niveaux de dilution. La température du diluant est la température adiabatique de combustion $T^D = 1910$ K. (a) : Température ; (b) : Y_{CH_4} ; (c) : Y_{CO_2} ; (d) : Y_{CO}

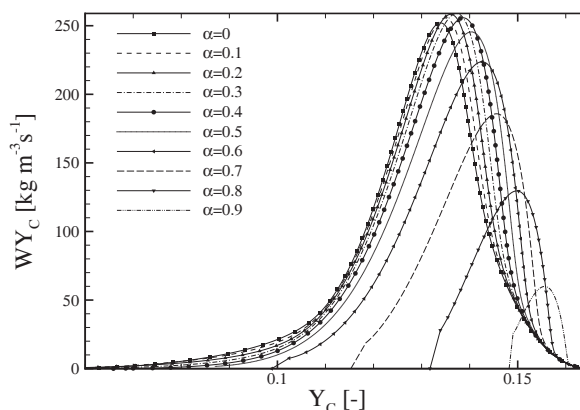


FIGURE 3.19 – Taux de réaction de la variable d’avancement en fonction de la variable d’avancement pour les conditions exposées Fig. 3.18. Le style des courbes est décrit Fig. 3.18(a).

trajectoires convergent vers un espace attracteur. Le point de variable d’avancement maximal est le même pour chaque niveau de dilution, à savoir l’équilibre. Par conséquent, la dilution est une dimension nécessaire si la cinétique chimique présente un fort caractère hors-équilibre, ce qui est *a priori* le cas en combustion sans flamme. Un point intéressant à noter est la diminution de la fraction massique maximale de CO pour une dilution croissante, ainsi que le déplacement du pic de Y_{CO} vers des valeurs croissantes de Y_C . Cette cinétique particulière est retrouvée en combustion sans flamme, régime pour lequel les émissions de monoxyde de carbone sont très faibles (voir Chapitre 1).

Cette modification de la cinétique chimique se retrouve sur les termes sources d’espèces, et joue donc sur l’évolution du terme source de la variable d’avancement (Fig. 3.19). Le maximum de terme source est obtenu pour des valeurs de variable d’avancement de plus en plus élevées pour une dilution croissante. Il est obtenu pour des taux de dissipation scalaire de mélange critiques d’extinction (lorsque la dilution est très importante, ce pic apparaît dans la zone de variation maximale de température par rapport à χ_Z , c’est-à-dire proche du taux de dissipation scalaire d’extinction). De plus, la valeur maximale de $\dot{\omega}_{Y_C}$ croît jusqu’à $\alpha = 0,3$ puis décroît lorsque plus de diluant est présent. Ce phénomène peut s’expliquer par le fait qu’à des niveaux de dilution faibles, le diluant a un rôle de catalyseur, puisqu’il apporte de l’énergie thermique, alors que pour des niveaux de dilution élevés, la raréfaction des réactifs non-brûlés entraîne irrémédiablement une diminution de la réactivité maximale du mélange. Les trajectoires différentes de $\dot{\omega}_{Y_C}$ en fonction de Y_C mettent à nouveau en lumière l’importance de la prise en compte de la dilution pour une chimie hors-équilibre. Bien que la dilution influence de manière significative l’évolution d’un mélange dans l’espace des phases, divers comportements sont observables. Aussi, pour une espèce stable et quasi neutre comme le dioxyde de carbone, le

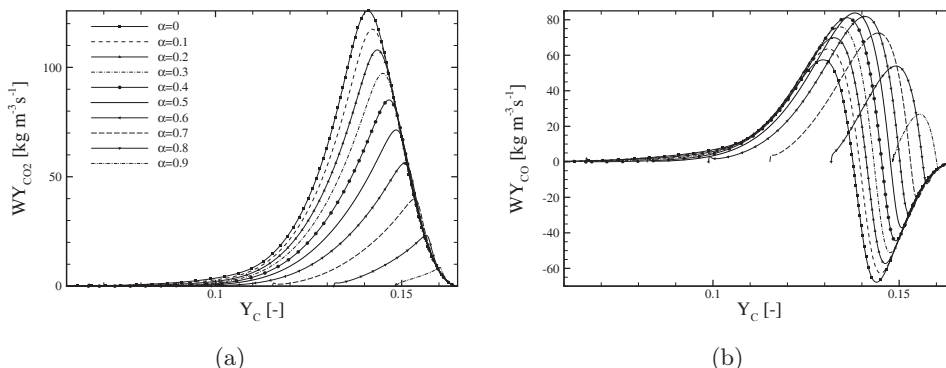


FIGURE 3.20 – Taux de réaction d’espèces en fonction de la variable d’avancement pour les conditions exposées Fig. 3.18. (a) : espèce CO_2 ; (b) : espèce CO

diluant ne joue qu’un rôle limité, en diminuant la quantité de réactifs pouvant être brûlés (Fig. 3.20(a)). En revanche, le monoxyde de carbone, qui n’évolue *a priori* pas de façon monotone avec l’avancement des réactions, présente un taux de réaction qui réagit de la même manière que $\dot{\omega}_{Y_C}$ (Fig. 3.20(b)). Le diluant a effectivement sur le CO un double effet : il favorise les réactions de production/destruction du CO en apportant de l’énergie thermique au mélange, avant de freiner la cinétique chimique en diminuant les quantités de réactifs.

3.5.2 Diluant avec pertes thermiques ($T^D < T^D|_{\beta=0}$)

Lorsque la température du diluant est différente de celle obtenue par une combustion adiabatique, le comportement des espèces chimiques avec la dilution est modifié. Ici, la température du diluant est diminuée de $440K$, et une analyse similaire à celle de la sous-section 3.5.1 est conduite. Notons que ce cas de figure est un cas particulier de l’approche NADFPV, où β est fixé, mais constitue une description complète du modèle DFPV, pour lequel on rappelle que la température du diluant est fixée.

La température des gaz avant combustion augmente avec la dilution, mais l’espace attracteur pour la température devient mono-dimensionnel (Fig. 3.21(a)). La température de fin de combustion est en effet décroissante quand la dilution croît, conséquence de la diminution d’enthalpie du mélange avec la dilution. Cette dernière n’entraîne cependant pas de changement d’évolution des espèces dans l’espace des phases. En effet, pour des espèces stables comme le CH_4 ou encore le CO_2 , mais aussi pour des espèces moins stables comme le CO , ce changement est très peu marqué et les trajectoires en fonction de Y_C sont similaires à celles obtenues quand le diluant est à température adiabatique (Fig. 3.21(b) à Fig. 3.21(d)). Pourtant, les termes sources, et donc la vitesse de la cinétique chimique, sont affectés.

La dilution perd effectivement sa capacité à rendre plus réactif le mélange

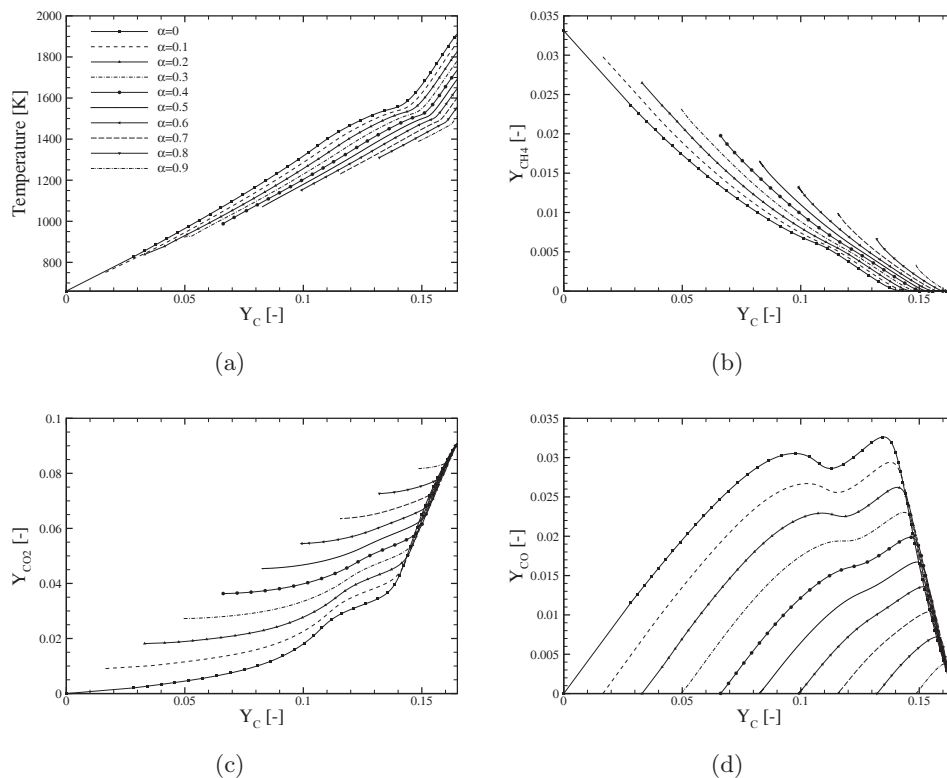


FIGURE 3.21 – Champs scalaires à richesse globale $\phi_G = 0,588$ en fonction de la variable d'avancement Y_C pour plusieurs niveaux de dilution. La température du diluant est de $T^D = 1470$ K. (a) : Température ; (b) : Y_{CH_4} ; (c) : Y_{CO_2} ; (d) : Y_{CO}

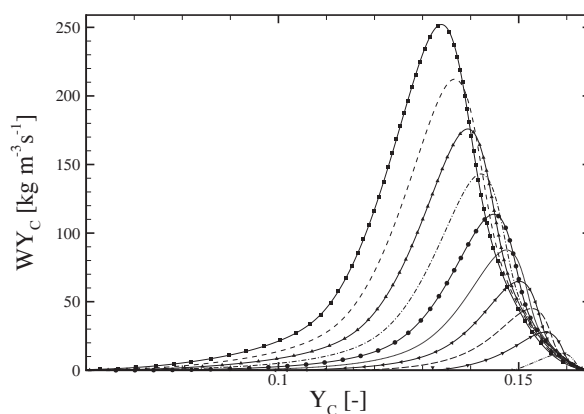


FIGURE 3.22 – Taux de réaction de la variable d'avancement en fonction de la variable d'avancement pour les conditions exposées Fig. 3.21. Le style des courbes est décrit Fig. 3.21(a).

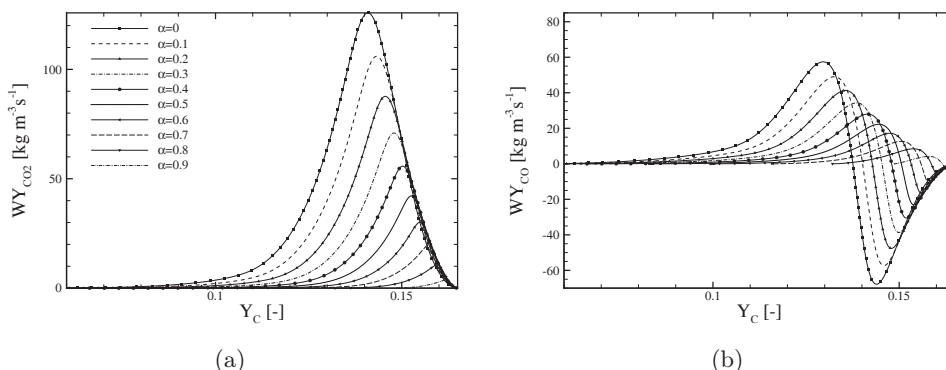


FIGURE 3.23 – Taux de réaction d’espèces en fonction de la variable d’avancement pour les conditions exposées Fig. 3.21. (a) : espèce CO_2 ; (b) : espèce CO . Les échelles sont les mêmes que pour la figure 3.20 afin de faciliter la comparaison des courbes.

si des pertes thermiques ont été appliquées au mélange (Fig. 3.22). Le pic maximal du taux de réaction de la variable d’avancement diminue en effet pour des niveaux de dilution croissants. Il est en outre translaté vers des zones de variables d’avancement de plus en plus élevées. Cet aspect se justifie à nouveau par la perte d’enthalpie lorsque la dilution augmente, et se retrouve sur les taux de réaction d’espèces (Fig. 3.23(a) et Fig. 3.23(b)). Pour un diluant refroidi, la dilution ralentit la combustion, en translatant les zones réactives vers des zones de faibles taux de dissipation scalaire de mélange.

3.5.3 Trajectoires potentielles - Compétition entre les phénomènes de dilution et de pertes thermiques

Le refroidissement de la température du diluant peut modifier le comportement de la cinétique chimique. Cependant, en fixant la température du diluant, deux effets sont en compétition : le changement de composition initiale du mélange et d’énergie totale.

La figure 3.24 présente plusieurs cas de solutions de flammelettes sujettes à différents niveaux de dilution pour des températures T^D différentes. Indépendamment du niveau de pertes thermiques appliqué au diluant, la température avant combustion pour une richesse donnée augmente avec la dilution, bien que la différence $\Delta T|_{C=0} = T|_{C=0}^{\alpha=1} - T|_{C=0}^{\alpha=0}$ entre les températures des cas dilués et saturés en diluant diminue lorsque la température du diluant diminue. Cela est directement imputable au fait que plus le diluant est refroidi, plus l’énergie du mélange décroît. Pour cette même raison, la différence entre les températures de fin de combustion $\Delta T|_{C=1} = T|_{C=1}^{\alpha=0} - T|_{C=1}^{\alpha=1}$ augmente si la température du diluant diminue. Pour chaque cas de la figure 3.24, on note aussi une disparition progressive de la branche instable des courbes avec la dilution. Cet effet, conséquence de la raréfaction des réactifs avec la dilution, montre à nouveau le

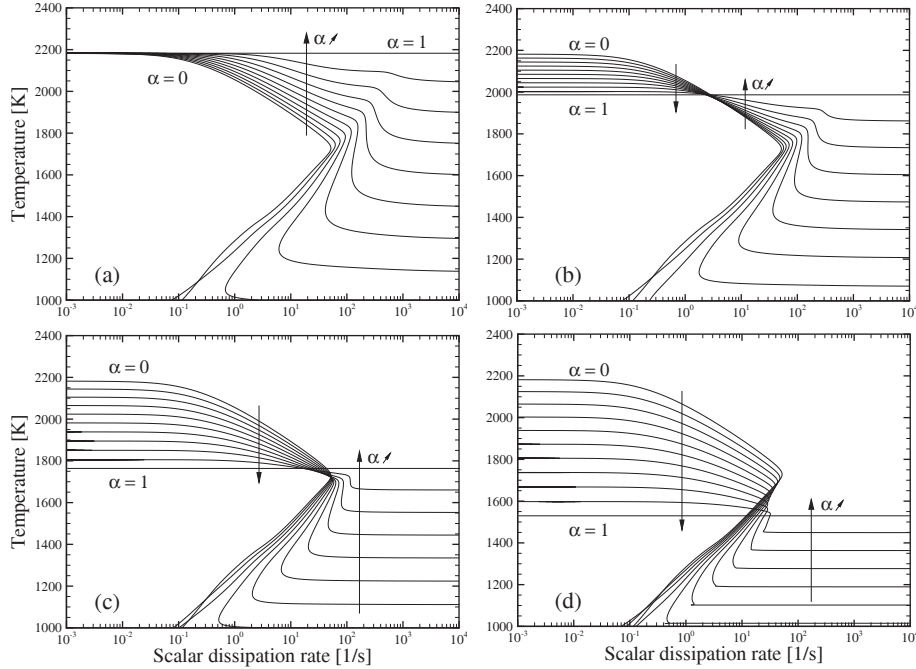


FIGURE 3.24 – Solutions des équations de flammelettes pour $Z_B = Z_B^{\phi_G}$ en fonction du taux de dissipation scalaire de mélange pour différents niveaux de dilution α dont la croissance est signifiée par les flèches. La richesse du diluant est ici de 0,77. (a) : $T^D = T_{\beta=0}^D = 2190$ K; (b) : $T^D = 1987$ K; (c) : $T^D = 1766$ K; (d) : $T^D = 1530$ K

caractère "MILD" de la combustion au sens de Oberlack et al. (2000) lorsque la dilution devient importante.

Bien que des comportements similaires puissent être observés, une différence majeure entre les résultats obtenus est à signaler. Il s'agit en effet de la localisation du taux de dissipation scalaire de mélange d'extinction χ_Z^q . Ce dernier est modifié par la dilution et par les pertes thermiques. Comme expliqué précédemment, sans perte thermique, la combustion s'homogénéise et est rendue possible pour de forts taux de dissipation scalaire pour peu que la dilution soit suffisamment importante. Plus précisément, dans ce cas particulier, l'apport d'énergie thermique au mélange permet à la cinétique chimique de se produire, bien que les réactifs soient injectés très rapidement dans la zone de réaction. Cependant, si la température du diluant est diminuée, deux comportements peuvent être observés :

- à faible niveau de pertes thermiques, χ_Z^q croît avec la dilution, stabilisant la combustion par apport d'énergie thermique ;
- si les pertes thermiques dépassent un certain seuil, χ_Z^q diminue lorsque la dilution augmente, et la branche stable des solutions des équations

de flammelettes se restreint de plus en plus.

À fortes pertes thermiques donc, le rôle catalyseur du diluant est perdu, et la cinétique chimique devient limitante : l'énergie apportée dans la zone de réaction n'est pas suffisante pour maintenir la combustion lorsque les réactifs sont injectés rapidement.

Ce double effet peut se retrouver par la formulation générale du taux de dissipation scalaire d'extinction donnée par [Peters \(2000\)](#) :

$$\chi_{st}^q = \frac{\mathcal{Z}_{B|st}^2 (1 - \mathcal{Z}_{B|st})^2}{\tau_c^p} \quad \text{avec} \quad \tau_c^p = \frac{\delta}{s_L} \quad (3.32)$$

où δ est l'épaisseur et s_L la vitesse de flamme laminaire correspondant à une flamme de prémélange obtenue pour des conditions d'injections semblables. Bien qu'évaluée à la stœchiométrie et ne donnant qu'une approximation de χ_{st}^q , cette équation illustre la relation entre les flammes de prémélange et les flammes de diffusion laminaires, et permet de faire un lien avec l'étude de [Wang et al. \(2010\)](#). Les auteurs mentionnés indiquent, dans une analyse portée sur la réponse de flammes de prémélange laminaires à de la dilution et des pertes thermiques, que la vitesse de flamme laminaire diminue avec le facteur β (assimilable au paramètre β introduit ici), alors que l'épaisseur thermique et l'épaisseur de la zone de réaction augmentent avec β .

En définitive, l'obtention d'un régime de combustion type MILD est autant conditionnée par la dilution que par les pertes thermiques. Bien qu'une dilution prononcée est nécessaire pour atteindre ce régime, les pertes thermiques jouent aussi un rôle crucial dans le comportement des flammes.

3.6 Impacts des pertes thermiques

Jusque-là, on a considéré l'effet de la dilution sans perte thermique d'une part, et les effets de diminution d'enthalpie liés à l'augmentation de la quantité d'un diluant refroidi d'autre part. Pour discriminer les effets de dilution et de pertes thermiques, une analyse du comportement des flammelettes en fonction des pertes thermiques pour une quantité de diluant fixe est menée dans cette section.

À niveau de dilution fixé, les pertes thermiques ont un effet sur l'évolution des flammelettes parfaitement opposé aux effets de dilution mentionnés préalablement (Fig. 3.25). Logiquement, la température des gaz frais diminue avec β , tout comme la température de fin de combustion. De plus, à mesure que les pertes d'enthalpie se font plus intenses, on observe une diminution de χ_Z^q et la branche instable des solutions de l'équation 3.1 est favorisée. Cet effet, à nouveau compatible avec l'équation 3.32, peut provoquer une déstabilisation plus aisée de la combustion avec l'apparition de phénomènes d'extinction et d'allumage. Dans un cas extrême où les pertes thermiques sont trop importantes

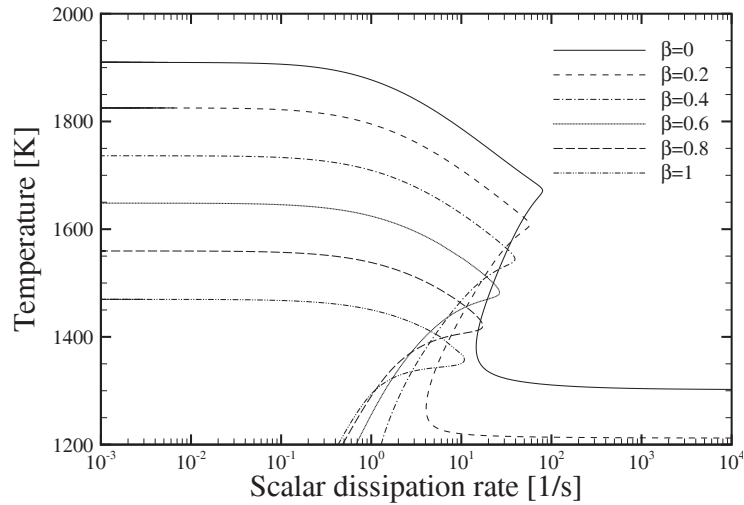


FIGURE 3.25 – Solutions des équations de flammelettes pour $Z_B = Z_B^{\phi_G}$ et $\alpha = 0,5$ en fonction du taux de dissipation scalaire de mélange pour différents niveaux de pertes thermiques β . La température minimale du diluant est de $T_{\beta=1}^D = 1000$ K.

(par exemple pour des configurations à parois refroidies), l'obtention d'un régime de combustion MILD au sens de Oberlack et al. (2000) est par conséquent soit conditionnée par un niveau de dilution très élevé, soit tout simplement inatteignable.

Pour préciser l'analyse, on peut s'intéresser aux trajectoires des scalaires tabulées en fonction de la variable d'avancement. Comme on peut s'y attendre, aucun espace attracteur n'existe pour l'évolution de la température avec Y_C (Fig. 3.26(a)). L'évolution d'espèces majoritaires comme le CH_4 ou encore le CO_2 en fonction de la variable d'avancement est en revanche relativement peu influencée par les pertes thermiques (Fig. 3.26(b)). Cependant, pour des espèces minoritaires ou moins stables, la variation de pertes thermiques a un impact plus prononcé (Fig. 3.26(c) et 3.26(d)). En se focalisant sur le monoxyde de carbone, aucun aspect auto-similaire avec β n'est observable. Une étude approfondie de ce processus chimique est hors de portée de ce travail dans la mesure où il est fortement dépendant du schéma cinétique employé (les conclusions restent cependant les mêmes). Très récemment cependant, Ihme et al. (2012), dans un contexte de simulation de la combustion MILD, ont fait état de la forte dépendance du CO au OH. Ce dernier étant fortement influencé par les pertes thermiques, il peut être avancé que des schémas cinétiques plus détaillés comme le GDFKin[®]3.0 (Bakali et al. (2006)) donneraient des résultats d'évolution sensiblement différents. Aucune conclusion ne sera par conséquent tirée sur les différences de formes du CO en fonction de Y_C pour différents niveaux de β .

En outre, les pertes thermiques diminuent la réactivité du mélange. Cela est

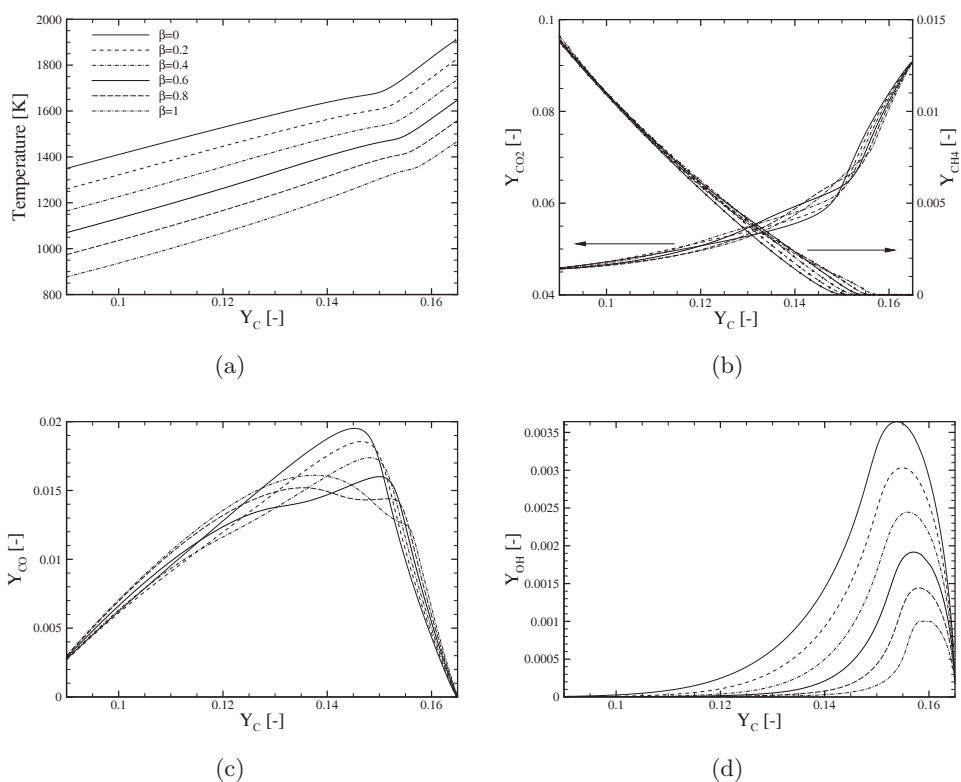


FIGURE 3.26 – Champs scalaires à richesse globale $\phi_G = 0,588$ diluée à 50% ($\alpha = 0,5$) en fonction de la variable d'avancement Y_C pour plusieurs niveaux de pertes thermiques. La température minimale du diluant est de $T_{\beta=1}^D = 1000$ K. (a) : Température; (b) : Y_{CH_4} et Y_{CO_2} ; (c) : Y_{CO} ; (d) : Y_{OH}

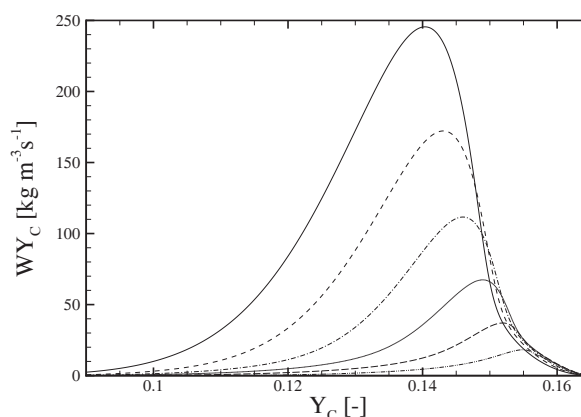


FIGURE 3.27 – Taux de réaction de la variable d’avancement en fonction de la variable d’avancement pour les conditions exposées Fig. 3.26(a). Le style des courbes est décrit Fig. 3.26(a).

β	$Y_{CO}^{\phi_G}$	$Y_{CO_2}^{\phi_G} - Y_{CO_2}^{\phi_G} _{\beta=0}$	$Y_{O_2}^{\phi_G} - Y_{O_2}^{\phi_G} _{\beta=0}$
0,0	$1,23 \cdot 10^{-4}$	0,0	0,0
0,5	$6,05 \cdot 10^{-7}$	$7,98 \cdot 10^{-4}$	$3,33 \cdot 10^{-4}$
1	$1,24 \cdot 10^{-11}$	$7,99 \cdot 10^{-4}$	$3,49 \cdot 10^{-4}$

TABLE 3.3 – Fraction massique de CO et différence de fraction massique de CO₂ et de O₂ entre un cas adiabatique et les cas refroidis pour différentes valeurs du paramètre de pertes thermiques β . La richesse du diluant est de $\phi_G = 0,58$ et la température pour β de $T^D = 1000$ K.

visible sur des marqueurs de réaction comme le OH (Fig. 3.26(d)), et sur le terme source de la variable d’avancement (Fig. 3.27). Cela est une conséquence directe de la formulation de la loi d’Arrhénius. La perte d’enthalpie à dilution fixe aura pour effet de retarder la réaction, et diminuera aussi son intensité.

Enfin, les pertes thermiques vont influencer les valeurs à l’équilibre des espèces. La fraction massique de CO est donnée Tab. 3.3. Le monoxyde de carbone est fortement influencé par la température de fin de combustion. En comparaison, le dioxyde de carbone ou l’oxygène varient moins en masse. Pour capturer l’évolution de ces espèces majoritaires, la différence de fraction massique entre un cas adiabatique et les cas refroidis sont donnés Tab. 3.3. Ainsi, ces espèces varient peu, leur évolution restant du même ordre de grandeur que celle du CO, bien qu’en pourcentage leur fraction massique reste bien plus stable.

Il est important de noter que par formulation, le modèle DFPV ne prend en compte qu’une enthalpie totale pour une richesse et un niveau de dilution donnés. Avant de comparer le modèle DFPV avec le modèle plus complexe NADFPV, il est intéressant de s’attarder sur des considérations *a priori* de trajectoires des grandeurs thermochimiques dans l’espace des phases. Cela est

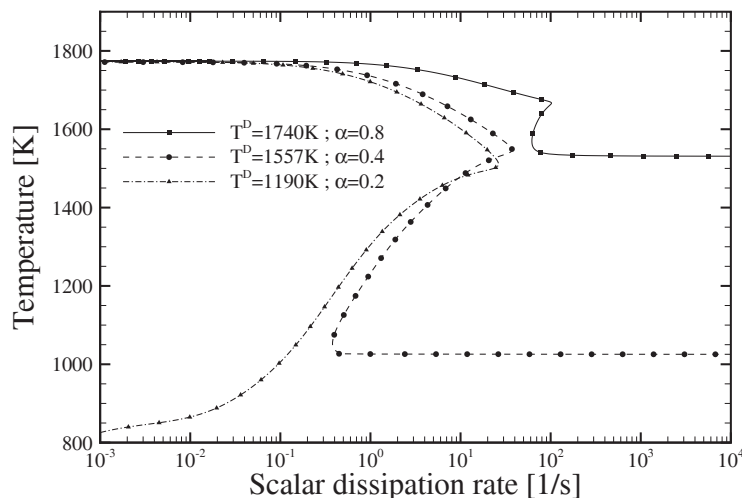


FIGURE 3.28 – Solutions des équations de flammelettes pour $\mathcal{Z}_B = \mathcal{Z}_B^{\phi_G}$ en fonction du taux de dissipation scalaire de mélange pour différents couples (α, β) donnant la même température de fin de combustion. Ici seuls trois sets de solutions ont été tracés pour plus de lisibilité.

effectué dans la section suivante.

3.7 Éléments de comparaison *a priori* des modèles DFPV et NADFPV

Le modèle NADFP introduit plus de complexité que le modèle DFPV en dissociant les effets de dilution et de perte d'énergie d'un mélange. Ainsi, il permet de prendre en compte un nombre plus important de trajectoires dans l'espace des phases. Afin de préciser l'importance des trajectoires négligées par le modèle DFPV, un cas de figure particulier peut retenir notre attention : le cas où la température de fin de combustion est semblable pour des niveaux de dilution et de pertes thermiques différents. Ce cas de figure peut en effet se présenter en sortie de configuration ou encore aux parois, si la température y est imposée.

La prescription d'une température pour un couple $(\mathcal{C}, \mathcal{Z}_B)$ donné permet de retrouver l'ensemble des couples (α, β) par un processus de tri itératif. Pour restreindre l'analyse à des couples d'intérêt, on se limite ici à un cas où on impose $(\mathcal{C} = 1, \mathcal{Z}_B = \mathcal{Z}_B^{\phi_G})$. Un exemple de solution obtenue pour une température de fin de combustion de $T|_{\mathcal{C}=1, \mathcal{Z}_B=\mathcal{Z}_B^{\phi_G}} = 1775$ K est donné en Fig. 3.28. Le choix de $T|_{\mathcal{C}=1, \mathcal{Z}_B=\mathcal{Z}_B^{\phi_G}}$ n'est pas anodin, et correspond à la température maximale obtenue pour la configuration de [Verissimo et al. \(2011\)](#) pour deux richesses globales différentes ($\phi_G = 0, 58$ et $\phi_G = 0, 77$).

Comme on peut l'observer, les courbes en S présentées sont foncièrement différentes dans leurs caractéristiques. Celles-ci sont listées ci-après :

- la température initiale, ou avant combustion ;
- taux de dissipation scalaire d'extinction ;
- taux de dissipation scalaire d'allumage.

Ces trois caractéristiques varient fortement d'une condition de génération à l'autre. Pour une température du diluant de 1740 K, 80% de diluant est nécessaire à l'obtention de la température de fin de combustion prescrite. Pour ces conditions, la différence de température $\Delta T = T|_{C=1} - T|_{C=0}$ est minimale, et le taux de dissipation scalaire d'extinction χ_q a la valeur la plus élevée. Ainsi, dans ce cas spécifique, proche d'une évolution caractéristique de la combustion MILD, la combustion est homogénéisée et possible pour des injections de réactif à haute vitesse. À l'extrême inverse, pour une température du diluant de 1190 K, seulement 20% de diluant est nécessaire. Dans ce cas-là, la combustion est beaucoup plus sensible aux variations de taux de dissipation scalaire, puisqu'elle montre une branche instable prononcée, ainsi qu'une valeur de χ_q significativement plus faible que dans le cas précédent. D'autre part, la différence de température ΔT est beaucoup plus importante, indiquant en définitive une divergence de l'état de combustion MILD.

Par construction, le modèle DFPV ne peut prendre en compte qu'une seule de ces trajectoires, via la prescription de la température du diluant T^D . Dans la simulation d'une configuration, cette restriction peut entraîner un soufflage de flamme ou une dynamique singulièrement différente de la réalité. Le modèle NADFPV, quant à lui, permet de considérer toutes les évolutions possibles et s'affranchit donc de cette contrainte. On peut néanmoins signaler que ces différences sont importantes dans le cas d'une chimie fortement hors équilibre.

Les différences d'approches peuvent se préciser en étudiant l'évolution du terme source de la variable d'avancement dans l'espace des phases (Fig. 3.29). À nouveau, avec la variation des pertes thermiques et de la quantité de diluant en fonction des conditions de générations, des effets couplés apparaissent. La zone de réaction principale est décalée vers des valeurs de Y_C croissantes pour des températures de diluant décroissantes. Cela prouve à nouveau la différence de comportement des champs scalaires en fonction de la prescription du couple (α, β) . La localisation de la zone de réaction principale peut par conséquent être mal reproduite par le modèle DFPV si les effets hors-équilibre sont importants.

Ce type de comportement se retrouve aussi sur les espèces, bien que les valeurs à l'équilibre soient très sensiblement les mêmes (Fig. 3.30). La mauvaise prescription de la température du diluant dans le cas d'une utilisation du modèle DFPV peut en effet mener à une sur-prédiction de la fraction massique de monoxyde de carbone, et donc à une estimation erronée de CO_2 .

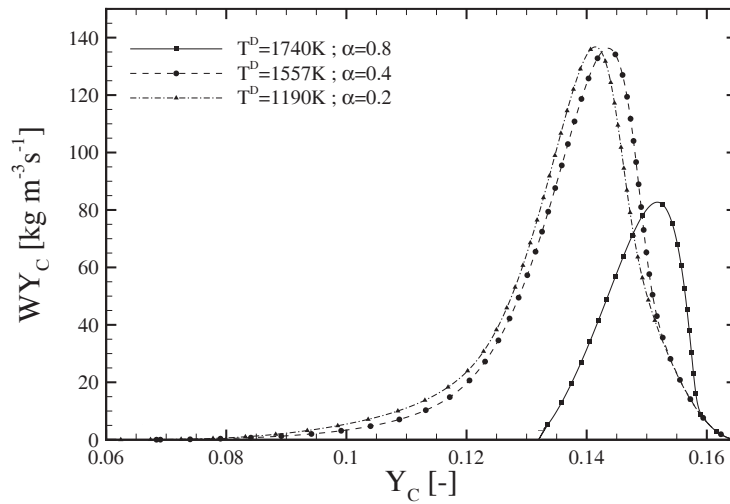


FIGURE 3.29 – Taux de réaction de la variable d'avancement en fonction de Y_C pour des conditions de génération différentes (similaires à celles de la figure 3.28).

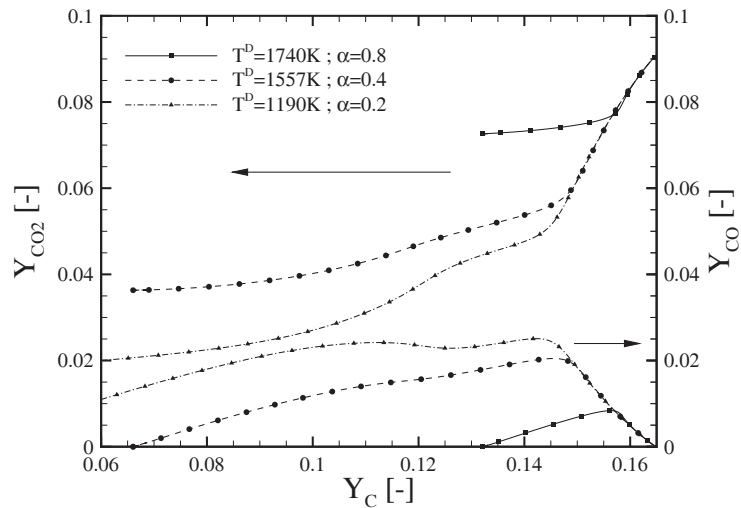


FIGURE 3.30 – Évolution des espèces CO et CO_2 en fonction de Y_C pour des conditions de génération différentes (similaires à celles de la figure 3.28).

Paramètres de contrôle	
DFPV	NADFPV
Z, \mathcal{C}, α	$Z, \mathcal{C}, \alpha, \beta$

TABLE 3.4 – Paramètres utilisés pour la tabulation dans une structure de données et les variables dynamiques de couplage employées dans un code CFD pour les deux modèles développés.

Bien que l'on puisse mettre en évidence les différences entre les deux modèles développés, on ne sait pas quelles trajectoires chimiques sont privilégiées en pratique. En particulier, le caractère fortement hors-équilibre de la combustion MILD reste à déterminer, tout comme les trajectoires privilégiées. Une discussion *a posteriori* sera fournie dans les chapitres relatifs aux simulations aux grandes échelles de la turbulence des configurations de [Castela et al. \(2012\)](#) et de [Verissimo et al. \(2011\)](#).

3.8 Conclusion

Dans ce chapitre, une tabulation de flammes laminaires non-prémélangées mélangées à un diluant soumis à différentes pertes thermiques a été discutée. En premier lieu, des hypothèses de modélisation ont été formulées sur l'évolution de la température et de la composition du diluant. Le processus de génération des flammelettes a ensuite été décrit, en attachant une importance particulière aux hypothèses de modélisation effectuées.

Puis, deux approches ont été développées pour caractériser des processus clés de la combustion sans flamme. Introduisant deux dimensions supplémentaires au modèle FPV, le modèle NADFPV permet de dissocier les effets de dilution purs des effets de pertes thermiques. Le modèle DFPV, pour lequel on fait l'hypothèse simplificatrice qu'il ne peut y avoir de dilution sans changement d'enthalpie totale d'un mélange, permet la prise en compte d'effets de dilution et de pertes thermiques en ne privilégiant qu'une trajectoire dans l'espace des phases pour une richesse donnée. Les deux approches sont caractérisées par des paramètres de contrôle différents. Ces derniers sont listés Tab. 3.4.

Ce chapitre est ensuite consacré à l'analyse des réponses des flammelettes générées à différents cas de dilution et de pertes thermiques. Les comportements spécifiques des champs scalaires avec ces deux nouvelles dimensions ont été mis en avant. On a montré en particulier l'importance de la prise en compte de la dilution des réactifs pour une chimie fortement hors-équilibre. Enfin, le modèle DFPV a été comparé au modèle NADFPV. La dissociation des effets de dilution et des pertes thermiques dans ce dernier permettent *a priori* une localisation plus fine de la zone de réaction principale, ainsi qu'une dynamique de combustion plus exacte.

Le couplage de ces méthodes de tabulation avec un code de calcul sera abordé

au chapitre suivant.

Chapitre 4

Couplage de la tabulation avec les équations de conservation

Dans ce chapitre, le couplage des tables thermo-chimiques de type NADFPV ou DFPV avec un code CFD est exposé. Les relations de couplage entre les variables transportées et les paramètres de contrôle sont données. Ensuite, ce couplage est étendu à un formalisme LES, sous l'hypothèse d'écoulement à faible nombre de Mach. Un modèle de création de diluant est développé et les interactions chimie-turbulence sont prises en compte via des fonctions de densité de probabilités présumées, pour lesquelles des hypothèses basées sur les comportements observés en combustion sans flamme sont mises en œuvre.

4.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, les paramètres de contrôle d'une tabulation prenant en compte la dilution et les pertes thermiques ont été exposés. À présent, le couplage d'une telle tabulation avec un code de calcul doit être discuté. Pour cela, des relations de passage sont nécessaires entre les paramètres de contrôle et des variables pouvant être calculées dans un solveur des équations de Navier-Stokes. En particulier, les calculs des paramètres de dilution α et de pertes thermiques β , ainsi que les équations de transport des variables de couplage associées doivent être donnés.

Puis, dans un contexte de simulations aux grandes échelles de la turbulence, le filtrage des équations est effectué. Le développement du modèle de combustion turbulent, pour lequel les interactions chimie-turbulence doivent être prises en compte, introduit des termes non-fermés à modéliser. Dans ce chapitre, nous verrons comment faire cela au moyen de fonctions de densité de probabilités (PDF) présumées en tirant parti d'hypothèses basées sur les comportements observés en combustion sans flamme.

4.2 Relations de passage

Dans un écoulement laminaire, le calcul de la fraction de mélange Z_B et de la variable d'avancement Y_C dans un code de calcul est direct, pour peu que le terme source de Y_C soit fourni dans une table¹. Une tabulation en fonction de ces deux paramètres est possible, mais elle entraîne forcément l'utilisation de mappings non-conformes, ce qui rend la gestion (recherches, interpolations, ...) de la base de données chimique délicate. Cela est d'autant plus vrai en prenant en compte la dilution, qui change les bornes minimales et maximales de ces deux variables, comme il a été montré dans le chapitre précédent.

Pour pouvoir traiter la table thermochimique aisément et précisément, il est en fait plus intéressant de travailler avec une base orthonormée. En effet, l'algorithme nécessaire à l'interpolation d'une grandeur dans une telle base est facile à mettre en œuvre et elle est peu coûteuse en temps de calcul. Cela devient particulièrement séduisant lorsque les bases de données sont de tailles conséquentes. De plus, elle facilite également la prise en compte des interactions chimie-turbulence par PDF présumées, comme il sera montré par la suite.

Par conséquent, l'architecture de la table reposera, pour un niveau de dilution et de perte thermique fixé, sur une tabulation en fonction de la fraction de mélange Z et de la variable d'avancement normalisée \mathcal{C} , qui varient toujours entre 0 et 1. Ces deux grandeurs d'entrées sont construites à partir des équations :

$$Z = \frac{Z_B - \alpha Z_B^{\phi_G}}{1 - \alpha} \quad (4.1)$$

et

$$\mathcal{C} = \frac{Y_C - Y_C^{fresh}(Z_B, \alpha, \beta)}{Y_C^{burnt}(Z_B, \alpha, \beta) - Y_C^{fresh}(Z_B, \alpha, \beta)} \quad (4.2)$$

Lorsque α vaut un, la fraction de mélange Z de l'équation 4.1 n'est pas définie. Néanmoins, pour ce cas particulier, le vecteur $\boldsymbol{\psi} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_{N_k}, T)^\top = \boldsymbol{\psi}(Z_B, Y_C, \alpha, \beta)$ se réduit à $\boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{\psi}(\beta)$, et la valeur de Z peut donc être arbitrairement fixée.

Cette formulation suppose que le solveur peut fournir les paramètres de dilution α et de pertes thermiques β . Comme la paramétrisation de la table en fonction de ces deux paramètres est naturelle, il a été choisi de les conserver comme paramètres de contrôle et de les estimer en utilisant de nouvelles variables de couplage pouvant être évaluées par un code de calcul Navier-Stokes.

1. En principe, une équation de transport pour la variable d'avancement normalisée peut être dérivée, mais elle introduit des termes supplémentaires à modéliser. C'est une des raisons pour lesquelles on préfère transporter Y_C (Bray et al. (2005)).

4.2.1 Caractérisation de la dilution

Une relation analytique peut être développée entre α et la fraction de mélange \mathcal{Z}_B , l'enthalpie du mélange \mathcal{H} et le paramètre de perte thermique β en utilisant les définitions introduites par les équations 3.7 et 3.9 du chapitre 3 :

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^F(\alpha, \beta) &= \alpha(\mathcal{H}^D(\beta) - \mathcal{H}^F|_{\alpha=0;\beta=0}) + \mathcal{H}^F|_{\alpha=0;\beta=0} \\ \mathcal{H}^{Ox}(\alpha, \beta) &= \alpha(\mathcal{H}^D(\beta) - \mathcal{H}^{Ox}|_{\alpha=0;\beta=0}) + \mathcal{H}^{Ox}|_{\alpha=0;\beta=0}\end{aligned}$$

Cela mène à la relation :

$$\alpha = \frac{\mathcal{H}^F(\alpha, \beta) - \mathcal{H}^F|_{\alpha=0;\beta=0}}{\mathcal{H}^D(\beta) - \mathcal{H}^F|_{\alpha=0;\beta=0}} \quad \text{ou} \quad \alpha = \frac{\mathcal{H}^{Ox}(\alpha, \beta) - \mathcal{H}^{Ox}|_{\alpha=0;\beta=0}}{\mathcal{H}^D(\beta) - \mathcal{H}^{Ox}|_{\alpha=0;\beta=0}}$$

De la même manière, il est possible d'établir une relation analytique entre β et \mathcal{Z}_B , \mathcal{H} et α . On peut alors écrire :

$$\alpha = \mathcal{J}_1(\mathcal{Z}_B, \mathcal{H}, \beta) \tag{4.3}$$

$$\beta = \mathcal{J}_2(\mathcal{Z}_B, \mathcal{H}, \alpha) \tag{4.4}$$

en notant \mathcal{J}_1 et \mathcal{J}_2 des fonctions de passage. Le couplage apparent entre α et β est problématique, et la détermination univoque de ces paramètres dans un calcul d'écoulement est, en l'état, impossible car il y a plus d'inconnues que de variables.

En revanche, pour résoudre ce problème, il est possible de quantifier la dilution avec la connaissance de fractions massiques d'espèces contenues dans le diluant présentes **avant** combustion. On rappelle ici les équations relatives aux compositions des conditions aux limites des flammelettes stationnaires diluées :

$$Y_k^F(\alpha, \beta) = \alpha(Y_k^D(\beta) - Y_k^F|_{\alpha=0;\beta=0}) + Y_k^F|_{\alpha=0;\beta=0} \tag{4.5}$$

$$Y_k^{Ox}(\alpha, \beta) = \alpha(Y_k^D(\beta) - Y_k^{Ox}|_{\alpha=0;\beta=0}) + Y_k^{Ox}|_{\alpha=0;\beta=0} \tag{4.6}$$

Ces deux équations imposent que :

$$\alpha = \frac{Y_k^F(\alpha, \beta) - Y_k^F|_{\alpha=0;\beta=0}}{Y_k^D(\beta) - Y_k^F|_{\alpha=0;\beta=0}} = \frac{Y_k^{Ox}(\alpha, \beta) - Y_k^{Ox}|_{\alpha=0;\beta=0}}{Y_k^D(\beta) - Y_k^{Ox}|_{\alpha=0;\beta=0}} \tag{4.7}$$

Dans cette équation, les termes relatifs aux états non-dilués ($\alpha = 0$) disparaissent si l'espèce k considérée n'est pas présente dans le combustible ou le comburant purs. Par exemple, dans une combustion méthane-air, le CO_2 satisfait cette propriété, et on a :

$$\alpha = \frac{Y_{CO_2}^{Ox}(\alpha, \beta)}{Y_{CO_2}^D(\beta)} \tag{4.8}$$

De fait, il existe une correspondance univoque entre α et $Y_{CO_2}^{Ox}$ pour une valeur de β donnée, et la caractérisation des flammelettes par l'une ou l'autre de ces grandeurs est strictement équivalente (Fig. 4.1).

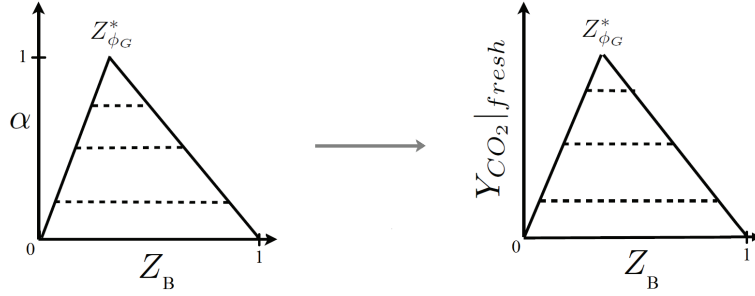


FIGURE 4.1 – gauche : Espaces d'états en fonction de (Z_B, α) . droite : Espaces d'états en fonction de $(Z_B, Y_{CO_2}^{fresh})$. Les flammelettes utilisées pour peupler l'espace sont illustrées par des lignes en traits discontinus.

Cette transformation peut s'appliquer à n'importe quelle combinaison linéaire d'espèces du moment qu'elles ne sont pas présentes dans le combustible et le comburant pur. Nous introduisons donc ici la **variable** de dilution $Y_{\mathcal{D}}$, définie comme combinaison linéaire d'espèces présentes avant combustion :

$$Y_{\mathcal{D}} = \sum_{\{a\}} Y_{\{a\}}(\alpha, \beta)|_{c=0} \quad (4.9)$$

où $\{a\}$ est le symbole d'espèce, ne pouvant pas être le symbole d'une espèce contenue dans les réactifs non-dilués. Avec cette notation, on a :

$$\alpha = \frac{Y_{\mathcal{D}}(\beta)}{Y_{\mathcal{D}}|_{\alpha=1}(\beta)} \quad (4.10)$$

En l'état, la dépendance de $Y_{\mathcal{D}}$ au paramètre β rend délicate l'estimation de α . Pour s'affranchir de cette difficulté, il peut être supposé que la dépendance au paramètre β de $Y_{\mathcal{D}}$ est négligeable. En faisant cette hypothèse, nous introduisons une erreur qui peut devenir très importante si $Y_{\mathcal{D}}$ est défini à partir d'espèces très sensibles aux pertes thermiques.

Pour définir de manière optimale $Y_{\mathcal{D}}$, c'est-à-dire pour que cette variable soit la moins sensible aux pertes thermiques, on peut résoudre un problème de minimisation consistant à trouver la combinaison linéaire d'espèces telle que $\frac{|Y_{\mathcal{D}}(\beta=0) - Y_{\mathcal{D}}(\beta=1)|}{Y_{\mathcal{D}}(\beta=0)}$ soit minimal. La Table 4.1 présente en pourcentage les résultats obtenus pour différentes combinaisons d'espèces. La température minimale choisie est ici de $T^D = 1000$ K. Au vu des résultats présentés, les choix de $\{Y_{CO_2}\}$ et de $\{Y_C\}$ pour $\{a\}$ semblent être les plus adaptés. La variable d'avancement est cependant nettement moins sensible aux pertes thermiques pour un cas où la richesse globale est de $\phi_G^D = 0,77$. Une différence approximative de 1,3% sera considérée négligeable pour la normalisation de $Y_{\mathcal{D}}$. En définitive, le paramètre de dilution α sera donc estimé par :

$$\alpha = \frac{Y_{\mathcal{D}}}{Y_{\mathcal{D}}|_{\alpha=1}} \quad \text{avec} \quad Y_{\mathcal{D}} = Y_C|_{c=0} \quad (4.11)$$

$\{a\}$	$\phi_G^D = 0,77$	$\phi_G^D = 0,588$
$\{Y_{CO_2}\}$	2,71	0,21
$\{Y_{CO_2}; Y_{H_2O}\}$	2,31	0,35
$\{Y_C\}$	1,33	0,27

TABLE 4.1 – Pourcentage de différence entre les cas adiabatiques et avec pertes thermiques ($T^D = 1000\text{ K}$) pour différentes définitions de la variable de dilution Y_D pour deux richesses différentes du diluant.

Au demeurant, cette formulation a l'avantage majeur que Y_D n'est pas réactif d'un point de vue chimique. En effet, bien que le diluant, ou Y_D , soit créé dans la chambre de combustion, il a été défini comme étant à l'équilibre. De plus, Y_D étant défini comme une combinaison linéaire d'espèces, il est convecté et diffusé de la même manière que Y_C . Une équation de transport spécifique peut donc être écrite pour cette variable à condition de prendre en compte sa création dans la chambre de combustion via une modélisation particulière de son terme source.

À nouveau, Y_D variant entre 0 et $Y_D|_{\alpha=1}$, une paramétrisation de la table en fonction du paramètre α est préférable. Ce dernier sera donc calculé au moyen de l'équation 4.11, le code de calcul CFD devant fournir Y_D .

4.2.2 Caractérisation des pertes thermiques - cas général

Une fois le niveau de dilution α connu, la fraction de mélange Z peut être estimée par l'équation 4.1. Il reste cependant à déterminer le paramètre de pertes thermiques β .

La température du diluant est fonction du paramètre β , défini uniquement comme étant le défaut d'enthalpie totale du diluant par rapport à celle obtenue à température adiabatique de combustion (eq. 3.10). Pour étendre la définition de β pour toute fraction de mélange, il est utile de tracer la répartition de l'enthalpie totale en fonction de l'enthalpie pour des niveaux différents de β et de α (Fig. 4.2).

La figure 4.2 illustre le fait que pour un niveau de dilution α_i donné, l'enthalpie est une fonction linéaire de Z_B , et ce pour chaque niveau de perte thermique β^2 .

L'enthalpie \mathcal{H} s'écrit pour tout niveau de dilution dans l'espace de fraction de mélange :

$$\mathcal{H}(Z, \alpha, \beta) = Z(\mathcal{H}^F(\alpha, \beta) - \mathcal{H}^{Ox}(\alpha, \beta)) + \mathcal{H}^{Ox}(\alpha, \beta) \quad (4.12)$$

Pour faciliter le développement, on rappelle ici les équations relatives aux en-

2. On rappelle ici que la diffusion différentielle est négligée.

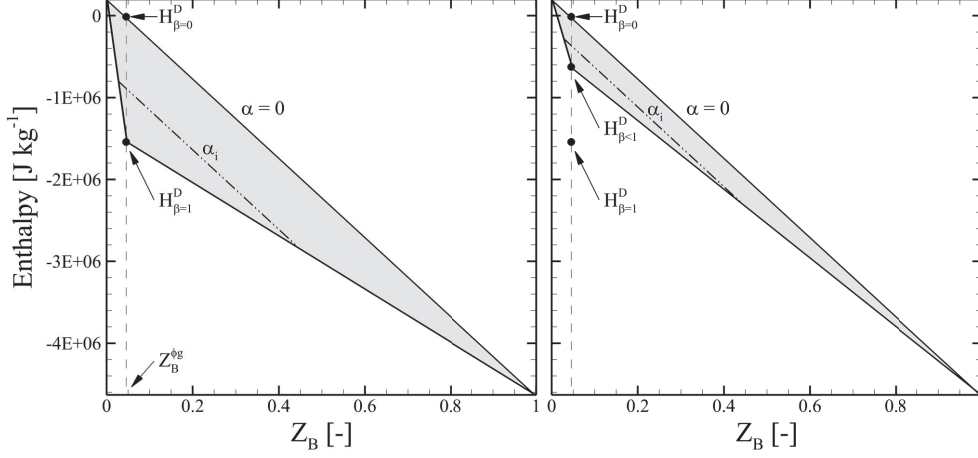


FIGURE 4.2 – Enthalpie totale en fonction de Z_B pour différents niveaux de α et de β . La température du diluant pour $\beta = 1$ est ici de $T^D = 1000$ K. L'espace grisé illustre l'espace des solutions tabulées. gauche : $\beta = 1$; droite : $\beta < 1$

thalpies des conditions aux limites des flammelettes stationnaires diluées :

$$\mathcal{H}^F(\alpha, \beta) = \alpha(\mathcal{H}^D(\beta) - \mathcal{H}^F|_{\alpha=0;\beta=0}) + \mathcal{H}^F|_{\alpha=0;\beta=0} \quad (4.13)$$

$$\mathcal{H}^{Ox}(\alpha, \beta) = \alpha(\mathcal{H}^D(\beta) - \mathcal{H}^{Ox}|_{\alpha=0;\beta=0}) + \mathcal{H}^{Ox}|_{\alpha=0;\beta=0} \quad (4.14)$$

En utilisant les équations 4.13 et 4.14 définissant l'enthalpie coté fuel \mathcal{H}^F et côté oxydant \mathcal{H}^{Ox} en fonction de la dilution dans l'équation 4.12, il vient :

$$\mathcal{H}(Z, \alpha, \beta) = Z(1 - \alpha)(\mathcal{H}_{\alpha=0}^F - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}) + \alpha(\mathcal{H}^D(\beta) - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}) + \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox} \quad (4.15)$$

On rappelle ici l'équation définissant β (eq. 3.10)

$$\mathcal{H}^D(\beta) = \beta(\mathcal{H}^D|_{\beta=1} - \mathcal{H}^D|_{\beta=0}) + \mathcal{H}^D|_{\beta=0}$$

En introduisant cette équation dans l'équation 4.15, il vient :

$$\beta = \frac{\mathcal{H} - (\mathcal{H}_{\alpha=0}^F - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox})(Z_B - \alpha Z_B^{\phi_G}) - (1 - \alpha)\mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox} - \alpha\mathcal{H}^D|_{\beta=0}}{\alpha(\mathcal{H}^D|_{\beta=1} - \mathcal{H}^D|_{\beta=0})} \quad (4.16)$$

Il est important de noter que l'équation 4.16 n'est définie que pour $\alpha \neq 0$. Nous avons effectivement supposé qu'il ne peut y avoir de perte thermique sans dilution. Par conséquent, lorsque $\alpha = 0$, on impose $\beta = 0$. Cette formulation du paramètre β fait intervenir trois variables : Z_B , α et \mathcal{H} . Elle traduit ainsi la dépendance de β à la richesse du mélange, au niveau de dilution et au défaut d'enthalpie.

En définitive, toute grandeur thermochimique ψ fonction des paramètres de contrôle (Z , \mathcal{C} , α , β) peut être décrite à partir de la connaissance des variables transportées Z_B , Y_C , Y_D et \mathcal{H} .

La Table 4.2 résume les équations de couplage utilisées dans le modèle NADPFV.

Équations de passage	
Dimension	NADFPV
Dilution	$\alpha = \frac{Y_D}{Y_D _{\alpha=1}}$
Mélange	$Z = \frac{Z_B - \alpha Z_B^{\phi_G}}{1 - \alpha}$
Avancement	$\mathcal{C} = \frac{Y_C - Y_C^f(Z_B, \alpha, \beta)}{Y_C^b(Z_B, \alpha, \beta) - Y_C^f(Z_B, \alpha, \beta)}$
Perte d'énergie	$\beta = \frac{\mathcal{H} - (\mathcal{H}_{\alpha=0}^F - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox})(Z_B - \alpha Z_B^{\phi_G}) - (1 - \alpha)\mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox} - \alpha\mathcal{H}^D _{\beta=0}}{\alpha(\mathcal{H}^D _{\beta=1} - \mathcal{H}^D _{\beta=0})}$

TABLE 4.2 – Équations de passage entre les paramètres de contrôle et les variables dynamiques de couplage pour le modèle NADFPV

4.2.3 Caractérisation des pertes thermiques - cas simplifié DFPV

Pour l'approche DFPV, présentée en Fig. 3.4, la dilution et les pertes thermiques sont supposées être un seul et même phénomène. On y néglige toute trajectoire ou tout historique de cinétique chimique particuliers qui pourraient avoir lieu avec une modification de la température du diluant pur. Dans ce cas-là, et si la température du diluant est différente de celle obtenue pour une combustion adiabatique, il existe une relation analytique entre l'enthalpie et le paramètre de dilution.

En suivant le même développement que précédemment, l'équation 4.15 se résume dans ce cas particulier où \mathcal{H}^D est constante :

$$\alpha = \frac{\mathcal{H} - Z_B(\mathcal{H}_{\alpha=0}^F - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}) - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}}{\mathcal{H}^D - Z_B^{\phi_G}(\mathcal{H}_{\alpha=0}^F - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}) - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}} \quad (4.17)$$

Cette relation illustre bien le rôle de la dilution dans le modèle DFPV : elle quantifie le défaut d'enthalpie du gaz. L'estimation du paramètre de dilution α peut en effet être calculé en connaissant la fraction de mélange et l'enthalpie totale, elles-mêmes calculées par des équations de transport spécifiques. Dans ce cas-là, toute grandeur thermochimique ψ fonction des paramètres de contrôle (Z, \mathcal{C}, α) peut être décrite à partir de la connaissance des variables transportées Z_B, Y_C et \mathcal{H} .

Le tableau 4.3 résume les équations de couplage utilisées dans le modèle DFPV.

4.3 Équations de transport des variables de couplage

Les données d'entrée de la table thermochimique sont obtenues par les relations de couplage exposées dans la section précédente. Pour cela, un solveur doit fournir les variables Z_B, Y_C, \mathcal{H} et Y_D . Elles sont évaluées grâce à la résolution

Équations de passage	
Dimension	DFPV
Mélange	$Z = \frac{Z_B - \alpha Z_B^{\phi_G}}{1 - \alpha}$
Avancement	$C = \frac{Y_C - Y_C^f(Z_B, \alpha)}{Y_C^b(Z_B, \alpha) - Y_C^f(Z_B, \alpha)}$
Dilution	$\alpha = \frac{\mathcal{H} - Z_B(\mathcal{H}_{\alpha=0}^F - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}) - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}}{\mathcal{H}^D - Z_B^{\phi_G}(\mathcal{H}_{\alpha=0}^F - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}) - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}}$

TABLE 4.3 – Équations de passage entre les paramètres de contrôle et les variables dynamiques de couplage pour le modèle DFPV

de leurs équations de transport³ :

$$\frac{\partial \rho Z_B}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Z_B) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z_B) \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial \rho Y_C}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_C) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_C) + \rho \dot{\omega}_c \quad (4.19)$$

$$\frac{\partial \rho \mathcal{H}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathcal{H}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla \mathcal{H}) - \dot{q}_R \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial \rho Y_{\mathcal{D}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_{\mathcal{D}}) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_{\mathcal{D}}) + \rho \dot{\Omega}_{\mathcal{D}} \quad (4.21)$$

Dans ces équations, les termes sources de la variable d'avancement et de la variable de dilution sont fournis par la table thermo-chimique. Bien que $\dot{\omega}_c$ soit déterminé pendant la génération des flammelettes, il reste à déterminer le terme source adéquat pour $Y_{\mathcal{D}}$.

4.4 Couplage avec un formalisme LES

La résolution des équations de transport précédentes n'est valable que pour des calculs laminaires ou pour des simulations numériques directes. Cependant, dans le cadre de la simulation de configurations industrielles, les écoulements sont généralement fortement turbulents et l'emploi de la DNS est prohibitif en terme de coût de calcul.

3. Nous invitons le lecteur à se référer aux annexes A.3 et A.4 pour une description des termes employés, la description des équations de conservation de quantité de mouvement et de la masse omises ici pour plus de clarté, ainsi que pour les hypothèses de modélisation associées.

Contrairement aux approches RANS, pour lesquelles on résout les équations moyennées stationnaires et où toutes les échelles de la turbulence doivent être modélisées, en simulation LES, les grandes structures turbulentes sont résolues en temps et en espace et seules les plus petites échelles, déterminées par la taille d'un filtre d'une échelle de coupure, sont modélisées. Cette méthode transforme les équations de Navier-Stokes en équations filtrées.

Dans ce contexte, une grandeur $\bar{\psi}$ est obtenue par le filtrage spatial de la grandeur laminaire ψ :

$$\bar{\psi} = \int \psi(\mathbf{x}') F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (4.22)$$

où F est une fonction de filtrage normalisée. Différentes fonctions de filtrage peuvent être utilisées pour calculer les champs scalaires filtrés. Cependant, ce filtrage devient implicite si l'on résout directement les équations de transport des variables filtrées. Pour des écoulements réactifs, et donc à densité variable, on définit les variables filtrées au sens de Favre $\tilde{\psi}$ par :

$$\bar{\rho}\tilde{\psi} = \int \rho(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' = \overline{\rho\psi} \quad (4.23)$$

et la variable ψ peut s'écrire comme une contribution résolue filtrée, et une partie non résolue :

$$\psi = \tilde{\psi} + \psi'' \quad (4.24)$$

4.4.1 Équations de transport filtrées

L'équation filtrée pour la quantité de mouvement s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}) = -\nabla \bar{P} + \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u}} \quad (4.25)$$

où le tenseur des contraintes laminaires est défini par :

$$\bar{\tau}_{i,j} = \bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\mu} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{i,j} \quad (4.26)$$

Le tenseur de contrainte de sous-maille $\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u}}$ introduit doit être modélisé. Il est défini par :

$$\tau_{\mathbf{u},i,j} = -\bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (4.27)$$

Il est estimé en introduisant la viscosité turbulente ν_t :

$$\tau_{\mathbf{u},i,j} - \frac{1}{3} \tau_{\mathbf{u},k,k} = 2\bar{\rho}\nu_t \left(\tilde{S}_{i,j} - \frac{\delta_{i,j}}{3} \tilde{S}_{k,k} \right) \quad (4.28)$$

avec

$$\tilde{S}_{i,j} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.29)$$

Comme exposé en détail par Sagaut (2006), la littérature offre une grande variété de modèles pour exprimer ν_t (voir, par exemple Germano et al. (1991), Vreman (2004), Nicoud et al. (2011)). Ici, le modèle WALE (Wall-Adapting Local Eddy-viscosity) développé par Nicoud and Ducros (1999) est retenu. Ce modèle a été développé de telle manière que la viscosité turbulente disparaisse aux abords des parois. Étant donné que l'on cherche à simuler des configurations confinées pour lesquelles, de plus, la modélisation de l'injection des réactifs peut être capitale, ce modèle apparaît comme un candidat de choix. Il est intéressant de noter que ce modèle permet de s'affranchir du coût d'une procédure dynamique. Des calculs avec le modèle de Smagorinsky en formulation dynamique ont été faits sur les configurations présentées plus tard dans ce manuscrit, et les résultats obtenus n'ont pas montré de différences notables. ν_t est calculé suivant l'expression :

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{i,j}^d s_{i,j}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{i,j} \tilde{S}_{i,j})^{5/2} + (s_{i,j}^d s_{i,j}^d)^{5/4}} \quad (4.30)$$

où $C_w = 0,4929$ est une constante de modélisation et

$$s_{i,j}^d = \frac{1}{2}(\tilde{g}_{i,j}^2 + \tilde{g}_{j,i}^2) - \frac{1}{3}\tilde{g}_{k,k}^2 \delta_{i,j}$$

avec

$$\tilde{g}_{i,j}^2 = \tilde{g}_{i,k} \tilde{g}_{k,j} \quad \text{et} \quad \tilde{g}_{i,j} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

Outre l'équation de continuité et de quantité de mouvement, les équations de transport données en section 4.3 de ce chapitre sont filtrées :

Fraction de mélange \tilde{Z}_B

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}_B}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Z}_B) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{Z}_B) - \nabla \cdot \tau_{Z_B} \quad (4.31)$$

Variable d'avancement \tilde{Y}_C

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_C}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_C) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{Y}_C) - \nabla \tau_{Y_C} + \bar{\rho} \tilde{\omega}_{Y_C} \quad (4.32)$$

Enthalpie $\tilde{\mathcal{H}}$ (en négligeant le terme puits dû au rayonnement)

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathcal{H}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathcal{H}}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{\mathcal{H}}) - \nabla \cdot \tau_{\mathcal{H}} \quad (4.33)$$

Variable de dilution \tilde{Y}_D

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_D}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_D) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \tilde{Y}_D) - \nabla \tau_{Y_D} + \bar{\rho} \tilde{\Omega}_D \quad (4.34)$$

Pour ces équations, le terme visqueux laminaire filtré est estimé par $\overline{\rho D \nabla \psi^*} = \bar{\rho} D \nabla \widetilde{\psi^*}$ (Poinsot and Veynante (2005)). Différents flux turbulents de sous-maillages à modéliser ont été introduits : τ_{Z_B} , τ_{Y_C} , $\tau_{\mathcal{H}}$ et $\tau_{Y_{\mathcal{D}}}$. Ils sont définis par les relations suivantes :

$$\tau_{Z_B} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i Z_B} - \widetilde{u_i} \widetilde{Z_B})$$

$$\tau_{Y_C} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i Y_C} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_C})$$

$$\tau_{\mathcal{H}} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i \mathcal{H}} - \widetilde{u_i} \widetilde{\mathcal{H}})$$

$$\tau_{Y_{\mathcal{D}}} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i Y_{\mathcal{D}}} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_{\mathcal{D}}})$$

Ces quatre termes sont modélisés en introduisant une diffusivité turbulente D_t , calculée à partir d'un nombre de Schmidt turbulent Sc_t :

$$\tau_{Z_B} = -\bar{\rho} D_t \nabla \widetilde{Z_B}$$

$$\tau_{Y_C} = -\bar{\rho} D_t \nabla \widetilde{Y_C}$$

$$\tau_{\mathcal{H}} = -\bar{\rho} D_t \nabla \widetilde{\mathcal{H}}$$

$$\tau_{Y_{\mathcal{D}}} = -\bar{\rho} D_t \nabla \widetilde{Y_{\mathcal{D}}}$$

Les nombres de Schmidt turbulents sont calculés par une procédure dynamique (procédure analogue à celle de Lilly (1992)). En définitive, les équations de transport filtrées résolues dans le code de calcul s'écrivent :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Z_B}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}} \widetilde{Z_B}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} (D + D_t) \nabla \widetilde{Z_B}) \quad (4.35)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Y_C}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}} \widetilde{Y_C}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} (D + D_t) \nabla \widetilde{Y_C}) + \bar{\rho} \widetilde{\omega}_{Y_C} \quad (4.36)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{\mathcal{H}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}} \widetilde{\mathcal{H}}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} (D + D_t) \nabla \widetilde{\mathcal{H}}) \quad (4.37)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Y_{\mathcal{D}}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{u}} \widetilde{Y_{\mathcal{D}}}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} (D + D_t) \nabla \widetilde{Y_{\mathcal{D}}}) + \bar{\rho} \widetilde{\Omega}_{\mathcal{D}} \quad (4.38)$$

Les derniers termes non fermés sont les deux termes source $\widetilde{\omega}_{Y_C}$ et $\widetilde{\Omega}_{\mathcal{D}}$. Du fait de la forte non-linéarité de ces termes, on a :

$$\widetilde{\omega}_{Y_C} \neq \omega_{Y_C}(\widetilde{Z_B}, \widetilde{Y_C}, \widetilde{\mathcal{H}}, \widetilde{Y_{\mathcal{D}}}) \quad (4.39)$$

Par conséquent, on se propose de modéliser $\widetilde{\omega}_{Y_C}$ au moyen de fonctions de densité de probabilités présumées et $\widetilde{\Omega}_{\mathcal{D}}$ avec un modèle explicité ci-après.

4.4.2 Fermeture du terme source de la variable de dilution

Comme il a été esquissé dans le paragraphe 4.2.2, $Y_{\mathcal{D}}$ n'est pas produit de la même manière que Y_C . En fait, son terme source ne peut pas être relié analytiquement à des taux de réaction d'espèces puisque cette variable est définie

comme un ensemble d'espèces chimiques à l'équilibre. Pourtant, il est produit au fur et à mesure des réactions chimiques au sein de la chambre de combustion.

Par définition, $Y_{\mathcal{D}}$ est composé de gaz brûlés à l'équilibre issus d'une combustion à la richesse globale. On développe ici un modèle empirique pour $\tilde{\Omega}_{\mathcal{D}}$ dans un contexte de simulation LES qui transforme les produits de réaction en diluant. Nous supposons que cette transformation s'opère dans les gaz brûlés ($\mathcal{C} = 1$) et pendant un temps très rapide.

Ce terme source s'écrit sous la forme :

$$\tilde{\Omega}_{\mathcal{D}} = \underbrace{\frac{1}{\tau}}_I \underbrace{(\widetilde{Y_{\mathcal{D}}^{eq}}(\tilde{\mathcal{Z}}_B) - \tilde{Y}_{\mathcal{D}})}_{II} \underbrace{e^{-\left(\frac{\tilde{\mathcal{Z}}_B - \mathcal{Z}_B^{\phi G}}{\sigma}\right)^2}}_{III} \underbrace{H_{(\mathcal{C}-1)}}_{IV} \quad (4.40)$$

Cette formulation fait apparaître le produit de quatre termes explicités ci-après :

- **I** : Ce terme correspond à un terme de relaxation, traduisant la transformation quasi-instantanée de gaz brûlés à l'équilibre en diluant. Dans ce travail, on estime ce temps par $\frac{1}{\Delta t}$, où Δt est le pas de temps de la simulation ;
- **II** : Ce terme correspond à la production de $\tilde{Y}_{\mathcal{D}}$ par rapport à sa valeur à l'équilibre. Il est nul lorsque le mélange est saturé en diluant, et maximal lorsque le mélange ne contient pas de diluant. En effet, $Y_{\mathcal{D}}^{eq}(\mathcal{Z}_B)$ est la valeur de $\tilde{Y}_{\mathcal{D}}$ lorsque la dilution est maximale pour une fraction de mélange donnée. $Y_{\mathcal{D}}$ est linéaire en fonction de \mathcal{Z}_B pour tout niveau de α . $Y_{\mathcal{D}}^{eq}(\mathcal{Z}_B)$ est donc donnée par les deux droites liant $Y_{\mathcal{D}}|_{\mathcal{Z}_B=0}$ et $Y_{\mathcal{D}}|_{\alpha=1}$, et $Y_{\mathcal{D}}|_{\alpha=1}$ et $Y_{\mathcal{D}}|_{\mathcal{Z}_B=1}$. Ce terme peut s'écrire directement sous la forme :

$$\widetilde{Y_{\mathcal{D}}^{eq}}(\tilde{\mathcal{Z}}_B) = \begin{cases} \frac{\tilde{\mathcal{Z}}_B Y_{\mathcal{D}}|_{\alpha=1}}{\mathcal{Z}_B^{\phi G}} & \text{si } \tilde{\mathcal{Z}}_B \leq \mathcal{Z}_B^{\phi G} \\ Y_{\mathcal{D}}|_{\alpha=1} - (\tilde{\mathcal{Z}}_B - \mathcal{Z}_B^{\phi G}) \frac{Y_{\mathcal{D}}|_{\alpha=1}}{1 - \mathcal{Z}_B^{\phi G}} & \text{si } \tilde{\mathcal{Z}}_B > \mathcal{Z}_B^{\phi G} \end{cases} \quad (4.41)$$

- **III** : La fonction gaussienne incluse ici, dont la valeur maximale (égale à l'unité) est centrée sur $\mathcal{Z}_B^{\phi G}$ permet de localiser la production du diluant. Idéalement, une distribution dirac devrait être utilisée, puisque le diluant est supposé être composé uniquement de gaz brûlés issus d'une combustion à richesse globale. Cependant, la discrétisation spatiale d'un domaine de calcul fait qu'en tout point du maillage, la valeur exacte de $\mathcal{Z}_B^{\phi G}$ est très rarement (ou n'est jamais) atteinte, et cela reste valable même en simulation de la combustion sans flamme, pour laquelle les variations de fraction de mélange sont très faibles en volume. De plus, en LES, on ne résout que des grandeurs filtrées, ce qui implique que

le mélange n'est pas toujours résolu. Différentes distributions peuvent être appliquées à la formulation de $\tilde{\Omega}_{\mathcal{D}}$ pour pallier cette problématique. Nous avons choisi ici une fonction gaussienne, puisqu'elle n'introduit pas de discontinuité sur la fraction de mélange. La valeur de la déviation standard σ apparaît comme une constante de modélisation à prescrire. En se basant sur les valeurs moyennes des fluctuations de fraction de mélange dans des simulations de configurations opérant en régime de combustion MILD, une valeur de $\sigma = 0,05$ a été choisie, ce qui permet de produire 90% de diluant lorsque $\tilde{Z}_B = Z_B^{\phi_G} \pm 0,002$. Notons que pour les simulations LES présentées dans les chapitres suivants, des variations de la valeur de σ entre 0,03 et 0,07 ont été faites, et aucune modification notable des grandeurs moyennes n'a été observée.

- **IV** : La fonction $H_{(\mathcal{C}-1)}$ est une fonction d'heaviside sur \mathcal{C} décentrée, qui ne vaut 1 que lorsque $\mathcal{C} = 1$. L'introduction de cette fonction dans la formulation de $\tilde{\Omega}_{\mathcal{D}}$ permet de ne produire du diluant que dans les gaz brûlés. On fait donc explicitement l'hypothèse que la production du diluant n'intervient qu'après tout processus de réaction chimique, en aval de l'écoulement.

Dans cette section, la modélisation du terme source du diluant a été présentée. Un certain nombre de simplifications et d'hypothèses ont été employées. Bien que cette formulation soit simple, elle reste cohérente avec le processus physique à modéliser, et constitue un premier pas vers la modélisation de la création du diluant dans l'enceinte d'une chambre de combustion.

4.4.3 Fermeture des termes source chimiques : fonctions de densité de probabilité

Les solutions de flammelettes stationnaires (la température T , les fractions massiques d'espèces Y_k , $\dot{\omega}_{Y_C}$...) soumises à de la dilution et à des pertes thermiques ont été initialement tabulées en fonction de Z , \mathcal{C} , α et β . À présent, ces solutions filtrées au sens de Favre doivent être calculées.

Pour décrire l'influence des états non-résolus en LES, on peut employer une fonction de densité de probabilité filtrée (Gao and O'Brien (1993)) $\tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*, \beta^*)$ telle que :

$$\tilde{\psi} = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \psi(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*, \beta^*) \tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*, \beta^*) dZ^* d\mathcal{C}^* d\alpha^* d\beta^* \quad (4.42)$$

où Z^* , \mathcal{C}^* , α^* , β^* sont respectivement des échantillons des variables spatiales pour la fraction de mélange, la variable d'avancement, le niveau de dilution et de pertes thermiques. \tilde{P} est quant à elle définie via la PDF jointe P :

$$\tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*, \beta^*) = \frac{\rho(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*, \beta^*)}{\bar{\rho}} P(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*, \beta^*) \quad (4.43)$$

Notons que \tilde{P} est une fonction du temps et de l'espace, ce que nous omettrons pour plus de lisibilité.

En principe, on peut résoudre une équation de transport pour \tilde{P} afin d'intégrer ensuite l'équation 4.42 pour calculer $\tilde{\psi}$ (Pope (1985)). En raison de la complexité de mise en œuvre et des coûts de calculs lourds qu'impose cette approche, elle ne sera pas considérée dans ce travail.

À la place, une approche basée sur des PDF présumées est adoptée pour évaluer l'intégrale de l'équation 4.42. De cette manière, en présumant la forme de \tilde{P} , cette intégrale peut être estimée avant le calcul LES et stockée dans une table. La forme de la PDF jointe est choisie parmi une famille de distribution, et paramétrée par un jeu fini de moments.

\tilde{P} est alors exprimée en introduisant la PDF conditionnelle $\tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^* |_{\beta^*})$:

$$\tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*, \beta^*) = \tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^* |_{\beta^*}) P(\beta^*) \quad (4.44)$$

où $P(\beta^*)$ est la PDF marginale du paramètre de pertes thermiques. Comme Z , \mathcal{C} et α sont par construction indépendants de β , on peut utiliser le théorème de Bayes et l'équation précédente peut s'écrire :

$$\tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*, \beta^*) = \tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*) P(\beta^*) \quad (4.45)$$

À nouveau, en introduisant la PDF conditionnée $P(Z^*, \mathcal{C}^* |_{\alpha^*})$ dans la PDF jointe $\tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*)$, on peut écrire :

$$\tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*, \beta^*) = \tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^* |_{\alpha^*}) P(\alpha^*) P(\beta^*) \quad (4.46)$$

Comme Z et \mathcal{C} sont indépendants de α par définition du paramètre de dilution, on a alors :

$$\tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*, \beta^*) = \tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*) P(\alpha^*) P(\beta^*) \quad (4.47)$$

Enfin, en introduisant la pdf conditionnée $P(\mathcal{C}^* |_{Z^*})$ dans la PDF jointe de l'équation précédente, on a :

$$\tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*, \beta^*) = \tilde{P}(Z^*) P(\mathcal{C}^* |_{Z^*}) P(\alpha^*) P(\beta^*) \quad (4.48)$$

De plus, si l'on suppose que \mathcal{C} est statistiquement indépendant de Z , on a en définitive :

$$\tilde{P}(Z^*, \mathcal{C}^*, \alpha^*, \beta^*) = \tilde{P}(Z^*) P(\mathcal{C}^*) P(\alpha^*) P(\beta^*) \quad (4.49)$$

Cette dernière hypothèse peut s'avérer fausse dans le cas où des phénomènes d'auto-allumage sont considérés (Vicquelin (2010)), ou que des phénomènes d'extinction et de ré-allumage sont importants (Ihme et al. (2005)).

Comme les phénomènes d'extinction et de ré-allumage de flamme ont *a priori* peu de chance de se produire en régime de combustion sans flamme, où la combustion est homogène, très stable et répartie sur un large volume, une distribution Dirac sera utilisée pour la PDF marginale de \mathcal{C} . De même, en considérant

que les fluctuations de diluant et de pertes thermiques sont faibles en régime de combustion MILD de par sa nature homogène, les PDF $P(\alpha^*)$ et $P(\beta^*)$ seront modélisées par des distributions Dirac. Bien que ces trois modélisations semblent fortement restrictives, il est important de préciser qu'elles sont ici formulées dans le cadre de la modélisation de la combustion sans flamme. De plus, la plupart des modèles de combustion turbulente utilisant des tabulations de flammelettes (de prémélange ou de diffusion) sont basés sur une hypothèse type $\alpha = \beta = 0$: l'introduction des paramètres de dilution et de pertes thermiques constitue, en comparaison, une amélioration notable.

La PDF d'un scalaire passif peut être estimée avec une distribution basée sur des fonctions beta (Girimaji (1992)). Cependant, Z n'est pas à proprement parler un scalaire passif, contrairement à \mathcal{Z}_B . Un changement de variable peut être opéré dans l'équation 4.42 afin de faire intervenir \mathcal{Z}_B en lieu et place de Z , en notant que :

$$dZ = \frac{d\mathcal{Z}}{d\mathcal{Z}_B} d\mathcal{Z}_B = \frac{1}{\mathcal{Z}_B^+ - \mathcal{Z}_B^-} d\mathcal{Z}_B \quad (4.50)$$

Les bornes de \mathcal{Z}_B (\mathcal{Z}_B^- et \mathcal{Z}_B^+) changeant avec la dilution, sa PDF pourra être exprimée par une distribution beta à 4 paramètres :

$$\beta(\mathcal{Z}_B; [\mathcal{Z}_B^-, \mathcal{Z}_B^+]) = \frac{1}{B(a, b)} \frac{(\mathcal{Z}_B - \mathcal{Z}_B^-)^{a-1} (\mathcal{Z}_B^+ - \mathcal{Z}_B)^{b-1}}{(\mathcal{Z}_B^+ - \mathcal{Z}_B^-)^{a+b-1}} \quad (4.51)$$

où $B(a, b)$ est une fonction beta complète, et où

$$a = \frac{(\tilde{\mathcal{Z}}_B - \mathcal{Z}_B^-)}{\mathcal{Z}_B^+ - \mathcal{Z}_B^-} \gamma, \quad b = \frac{(\mathcal{Z}_B^- - \tilde{\mathcal{Z}}_B)}{\mathcal{Z}_B^+ - \mathcal{Z}_B^-} \gamma, \quad \gamma = \frac{(\tilde{\mathcal{Z}}_B - \mathcal{Z}_B^-)(\mathcal{Z}_B^+ - \tilde{\mathcal{Z}}_B)}{\widetilde{\mathcal{Z}}_B^2} - 1 \quad (4.52)$$

Cette PDF est contrainte par les deux premiers moments statistiques de \mathcal{Z}_B :

$$\int_{\mathcal{Z}_B} \tilde{P}(\mathcal{Z}_B) d\mathcal{Z}_B = 1 \quad (4.53)$$

$$\int_{\mathcal{Z}_B} \mathcal{Z}_B \tilde{P}(\mathcal{Z}_B) d\mathcal{Z}_B = \tilde{\mathcal{Z}}_B \quad (4.54)$$

$$\int_{\mathcal{Z}_B} (\mathcal{Z}_B - \tilde{\mathcal{Z}}_B)^2 \tilde{P}(\mathcal{Z}_B) d\mathcal{Z}_B = \widetilde{\mathcal{Z}}_B^2 \quad (4.55)$$

Plutôt que de contraindre la PDF par la variance de \mathcal{Z}_B , dont les limites varient, il est préférable d'introduire le facteur de ségrégation $S_{\mathcal{Z}_B}$ défini par :

$$S_{\mathcal{Z}_B} = \frac{\widetilde{\mathcal{Z}}_B^2}{(\tilde{\mathcal{Z}}_B - \mathcal{Z}_B^-)(\mathcal{Z}_B^+ - \tilde{\mathcal{Z}}_B)} \quad (4.56)$$

Par conséquent, tout scalaire filtré $\tilde{\psi}$ peut être calculé à partir de :

$$\tilde{\psi} = \int_{\mathcal{Z}_B^-}^{\mathcal{Z}_B^+} \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \psi \beta(\mathcal{Z}_B; [\mathcal{Z}_B^-, \mathcal{Z}_B^+]) \delta(\mathcal{C} - \bar{\mathcal{C}}) \delta(\alpha - \bar{\alpha}) \delta(\beta - \bar{\beta}) d\mathcal{Z}_B d\mathcal{C} d\alpha d\beta \quad (4.57)$$

Cette relation peut être évaluée pour tout couple $(\widetilde{\mathcal{Z}}_B, \widetilde{\mathcal{Z}}_B^{n2})$. Cependant, l'équation 4.57 peut aussi s'exprimer avec une forme standard de la distribution beta, ce qui est préférable car plus aisé à intégrer.

Pour ce faire, on part du principe que la forme générale d'une distribution est définie vis-à-vis de ses paramètres de position l et d'échelle s . Dans le cas de la fraction de mélange \mathcal{Z}_B , on a :

$$l = \mathcal{Z}_B^- \quad \text{and} \quad s = \mathcal{Z}_B^+ - \mathcal{Z}_B^- \quad (4.58)$$

Toutes les formes générales des fonctions de probabilités peuvent être exprimées par rapport à leur distribution standard de la manière suivante :

$$\mathcal{F}(x; l, s) = \frac{1}{s} \mathcal{F}\left(\frac{(x-l)}{s}; [0, 1]\right) \quad (4.59)$$

Par conséquent, une distribution de type beta 4 paramètres sur la fraction de mélange \mathcal{Z}_B peut être directement exprimée en fonction d'une distribution beta standard pour la fraction de mélange Z :

$$\beta(\mathcal{Z}_B; [\mathcal{Z}_B^-, \mathcal{Z}_B^+]) = \frac{1}{\mathcal{Z}_B^+ - \mathcal{Z}_B^-} \beta(\mathcal{Z}; [0, 1]) \quad (4.60)$$

Pour caractériser les deux premiers moments statistiques de Z , nécessaires au calcul de $\beta(\mathcal{Z}; [0, 1])$, on fait intervenir la relation 4.1 entre Z et \mathcal{Z}_B . Comme on suppose une distribution Dirac sur le paramètre de dilution, on a :

$$\tilde{\mathcal{Z}} = \frac{\widetilde{\mathcal{Z}}_B - \mathcal{Z}_B^-}{\mathcal{Z}_B^+ - \mathcal{Z}_B^-} \quad (4.61)$$

La variance de Z peut alors s'exprimer :

$$\begin{aligned} \widetilde{\mathcal{Z}}^{n2} &= \widetilde{\mathcal{Z}}^2 - \tilde{\mathcal{Z}}^2 = \left(\frac{\widetilde{\mathcal{Z}}_B - \mathcal{Z}_B^-}{\mathcal{Z}_B^+ - \mathcal{Z}_B^-} \right)^2 - \left(\frac{\widetilde{\mathcal{Z}}_B - \mathcal{Z}_B^-}{\mathcal{Z}_B^+ - \mathcal{Z}_B^-} \right)^2 \\ \widetilde{\mathcal{Z}}^{n2} &= \frac{\widetilde{\mathcal{Z}}_B^{n2}}{(\mathcal{Z}_B^+ - \mathcal{Z}_B^-)^2} \end{aligned} \quad (4.62)$$

Clairement, la moyenne et la variance de Z divergent de celles de \mathcal{Z}_B à cause des variations des limites de cette dernière. Toutefois, il est intéressant de noter

que la distribution beta peut être paramétrée par la moyenne et la ségrégation du scalaire. Dans ce cas, la ségrégation de Z s'écrit :

$$S_Z = \frac{\widetilde{Z}''^2}{\widetilde{Z}(1 - \widetilde{Z})} = \frac{\widetilde{Z}_B''^2}{(\mathcal{Z}_B^+ - \mathcal{Z}_B^-)^2} \frac{(\mathcal{Z}_B^+ - \mathcal{Z}_B^-)^2}{(\widetilde{Z}_B - \mathcal{Z}_B^-)(\mathcal{Z}_B^+ - \widetilde{Z}_B)} = \frac{\widetilde{Z}_B''^2}{(\widetilde{Z}_B - \mathcal{Z}_B^-)(\mathcal{Z}_B^+ - \widetilde{Z}_B)}$$

Ce qui amène en définitive :

$$S_Z = S_{Z_B} \quad (4.63)$$

En conclusion, la PDF marginale de Z est exprimée à partir d'une distribution beta standard paramétrée par la moyenne et la ségrégation de Z_B . Cette approche permet d'employer une méthode simple et efficace d'intégration des PDF beta : le calcul de l'intégrale 4.42 se fait suivant la méthode de [Lien et al. \(2009\)](#), expliquée ci-après pour un cas où les grandeurs thermo-chimiques ne dépendent que de Z .

En supposant que tout scalaire $\phi(z)$ obtenu par les calculs de flamelettes 1D est une série de segments (ce qui est précisément le cas avec une tabulation fonction de Z), on peut poser :

$$\psi_{n-1} = a_{2n-1} + a_{2n}Z_{n-1} ; \psi_n = a_{2n-1} + a_{2n}Z_n \quad (4.64)$$

où les coefficients a_{2n-1} et a_{2n} pour chaque segment sont définis par :

$$a_{2n-1} = \frac{\psi_{n-1}Z_n - \psi_nZ_{n-1}}{Z_n - Z_{n-1}} ; a_{2n} = \frac{\psi_n - \psi_{n-1}}{Z_n - Z_{n-1}} \quad (4.65)$$

Il peut être montré que :

$$\begin{aligned} \int_{z_{n-1}}^{z_n} (a_{2n-1} + a_{2n}z) \tilde{P}(z) dz &= \frac{1}{B(a, b)} \int_{z_{n-1}}^{z_n} (a_{2n-1} + a_{2n}z) z^{a-1} (1-z)^{b-1} dz \\ &= \frac{1}{B(a, b)} \int_0^{z_n} (a_{2n-1} + a_{2n}z) z^{a-1} (1-z)^{b-1} dz \\ &\quad - \frac{1}{B(a, b)} \int_0^{z_{n-1}} (a_{2n-1} + a_{2n}z) z^{a-1} (1-z)^{b-1} dz \\ &= a_{2n-1} [I_{z_n}(a, b) - I_{z_{n-1}}(a, b)] \\ &\quad + a_{2n} \frac{B(a+1, b)}{B(a, b)} [I_{z_n}(a+1, b) - I_{z_{n-1}}(a+1, b)] \end{aligned}$$

où $B(a, b)$ est la fonction beta complète et $I_{Z_n}(a, b)$ la fonction beta incomplète jusque Z_n . La connaissance de cette intégrale permet de construire l'intégrale complète :

$$\tilde{\psi}(\tilde{Z}, S_Z) = \int_0^1 \psi(Z) \tilde{P}(Z) dZ = \sum_{n=0}^{n_{max}} \int_{Z_{n-1}}^{Z_n} (a_{2n-1} + a_{2n}Z) \tilde{P}(Z) dz \quad (4.66)$$

Cette relation est immédiatement généralisable à l'équation 4.57, et toute grandeur filtrée $\tilde{\psi}$ devient fonction de $(\tilde{Z}, S_Z, \mathcal{C}, \bar{\alpha}, \bar{\beta})$

4.4.4 Relations de passage filtrées

Comme on a supposé une indépendance statistique entre les différents paramètres de contrôle, les entrées de la base de données filtrées peuvent se formuler.

Paramètre de dilution :

$$\bar{\alpha} = \frac{\tilde{Y}_{\mathcal{D}}}{Y_{\mathcal{D}}|_{\alpha=1}} \quad (4.67)$$

Fraction de mélange :

$$\tilde{Z} = \frac{\tilde{Z}_B - \bar{\alpha} Z_B^{\phi_G}}{1 - \bar{\alpha}} \quad (4.68)$$

Ségrégation/Variance de la fraction de mélange :

$$S_Z = S_{Z_B} = \frac{\tilde{Z}_B'^2}{(\tilde{Z}_B - Z_B^{\phi_G})(1 - \bar{\alpha} + \bar{\alpha} Z_B^{\phi_G} - \tilde{Z}_B)} \quad (4.69)$$

où la variance $\tilde{Z}_B'^2$, doit être calculée dans le code de calcul. Plusieurs approches sont disponibles pour évaluer la variance de la fraction de mélange. Parmi celles-ci, on peut citer les modèles dits de gradient ou de mélange, pour lesquels des formulations dynamiques existent (Pierce and Moin (1998)). Une autre méthode, qui est retenue ici, consiste à résoudre une équation de transport pour la variance (Veynante and Vervisch (2002)) :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}_B'^2}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Z}_B'^2) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho} (D + D_t) \nabla \tilde{Z}_B'^2 \right) + 2 \bar{\rho} D_t |\nabla \tilde{Z}_B|^2 - \overline{s_{\chi Z}} \quad (4.70)$$

pour laquelle les flux turbulents ont été modélisés de façon similaire à ceux de la fraction de mélange. Le taux de dissipation scalaire de sous-maille $\overline{s_{\chi Z}}$ fait l'objet de plusieurs modélisations dans la littérature (voir par exemple les travaux de Balarac et al. (2008)). Par soucis de simplicité, nous utiliserons ici une hypothèse de relaxation linéaire, valide pour de faibles niveaux de variance⁴ :

$$\overline{s_{\chi Z}} = 2 \bar{\rho} c_{\chi} D_t \frac{\tilde{Z}_B'^2}{\Delta^2} \quad \text{avec } c_{\chi} = 1 \quad (4.71)$$

Variable d'avancement :

$$\bar{c} = \frac{\tilde{Y}_C - \tilde{Y}_C^f}{\tilde{Y}_C^b - \tilde{Y}_C^f} \quad (4.72)$$

Paramètre de pertes thermiques :

$$\bar{\beta} = \frac{\tilde{\mathcal{H}} - (\mathcal{H}_{\alpha=0}^F - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox})(\tilde{Z}_B - \bar{\alpha} Z_B^{\phi_G}) - (1 - \bar{\alpha}) \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox} - \bar{\alpha} \mathcal{H}^D|_{\beta=0}}{\bar{\alpha} (\mathcal{H}^D|_{\beta=1} - \mathcal{H}^D|_{\beta=0})} \quad (4.73)$$

4. La constante de modélisation c_{χ} utilisée peut être fort différente de l'unité. Au vu des temps de calculs des simulations effectuées, une étude paramétrique sur la prescription de ce terme n'était pas envisageable dans le cadre de cette thèse.

Dans le cas simplifié DPFV, où la dilution et les pertes thermiques sont une seule et même variable, α se calcule avec :

$$\bar{\alpha} = \frac{\tilde{\mathcal{H}} - \tilde{\mathcal{Z}}_B(\mathcal{H}_{\alpha=0}^F - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}) - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}}{\mathcal{H}^D - \mathcal{Z}_B^{\phi_G}(\mathcal{H}_{\alpha=0}^F - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}) - \mathcal{H}_{\alpha=0}^{Ox}} \quad (4.74)$$

4.5 Récapitulatif

Dans ce chapitre, une méthode de couplage entre les tabulations proposées et un code de calcul a été décrite. Dans un premier temps, nous avons vu les relations de passage entre les paramètres de contrôle et des variables pouvant être calculées par un solveur CFD. Puis, une modélisation du terme source de la variable de dilution introduite a été proposée, en se basant sur le mécanisme supposé de création de diluant au sein d'une chambre de combustion. Pour pouvoir coupler la tabulation avec un calcul LES, et modéliser les interactions chimie-turbulence, on a développé une approche basée sur des fonctions de densité de probabilités présumées. Les deux chapitres suivants viseront à valider les approches choisies par la simulation LES d'une configuration adiabatique et d'une configuration non-adiabatique.

Chapitre 5

Application à une configuration adiabatique

Ce chapitre présente les résultats obtenus par simulations LES d'une configuration adiabatique opérant en régime de combustion sans flamme. Trois modèles de combustion turbulente sont utilisés : le modèle de flammelette classique de Peters (1984), l'approche FPV et le modèle prenant en compte la dilution des réactifs proposé dans ce manuscrit. Une étude des comportements instationnaires des champs scalaires montre des différences importantes entre les trois prédictions. La nouvelle tabulation développée est validée par comparaison avec les données expérimentales. Une analyse plus poussée de ces simulations est ensuite effectuée. On montre en particulier que, dans cette configuration, la combustion est stabilisée par la dilution et qu'elle a principalement lieu dans un mode non-prémélangé.

5.1 Introduction

Pour valider la modélisation proposée dans ce manuscrit, des simulations aux grandes échelles de la turbulence de configurations fonctionnant en régime de combustion MILD sont employées. Dans le chapitre 3, on a vu qu'il pouvait y avoir des effets de la dilution sur les trajectoires chimiques. Pour déterminer l'influence de la prise en compte de la dilution des réactifs en l'absence de perte thermique en pratique, nous présentons dans ce chapitre les résultats de simulations d'une configuration adiabatique étudiée expérimentalement par Castela et al. (2012).

Après avoir présenté cette configuration, nous nous intéressons à la topologie de l'écoulement et à ses effets quant au mélange des réactifs et à la dilution. Puis, nous comparons les résultats obtenus pour trois modèles de combustion différents :

- le modèle LFM (pour *Laminar Flamelet Model*) de Peters (1984), pour

lequel on ne tabule que la branche stable de la courbe en S (pas d'extinction possible) ;

- l'approche FPV de [Pierce and Moin \(2004\)](#), qui permet des phénomènes transitoires d'extinction et d'allumage ;
- notre modèle NADFPV sans perte thermique ($\beta = 0$).

Il est intéressant de noter que l'approche DFPV développée plus tôt dans ce manuscrit est, en l'absence de pertes thermiques (ce qui est le cas pour cette configuration dans ces conditions opératoires), parfaitement équivalente au modèle FPV.

Au-delà de la validation du modèle NADFPV proposé dans ce travail de thèse, les objectifs sous-jacents à la comparaison de ces trois approches sont variés. Tout d'abord, il s'agit de déterminer quel type de cinétique chimique est la plus adaptée à la configuration, et par là-même d'étudier l'influence de la dilution sur la cinétique chimique dans le cas d'une combustion MILD quasi-adiabatique. Ensuite, cette comparaison doit permettre la mise en avant des apports de la LES en simulation de la combustion MILD, puisque la configuration expérimentale a déjà été simulée en RANS avec les modèles EDC et T-PDF (Transport de PDF), réputés pour être les plus performants pour simuler la combustion sans flamme ([Graca et al. \(2012\)](#)). Enfin, l'ultime objectif de ces simulations est de fournir des informations supplémentaires et complémentaires à l'étude expérimentale, notamment sur le comportement de la combustion proche du système d'injection et sur le processus principal gouvernant la combustion au sein de la chambre.

5.2 Configuration expérimentale

La configuration de [Castela et al. \(2012\)](#) est une chambre de combustion présentant un écoulement *inverse*, c'est-à-dire que l'injection des réactifs et la sortie des gaz brûlés se font sur la même paroi de la chambre. L'intérêt de ce type de géométrie est de tirer parti du point d'arrêt de l'écoulement situé en fond de chambre, qui assure, d'une part, un temps de séjour suffisant pour que la combustion soit complète, et d'autre part, un mélange intense entre les réactifs frais et les produits de combustion ([Bobba et al. \(2007\)](#)). En combustion sans flamme, il existe plusieurs configurations à écoulement inverse ([Szegö et al. \(2008\)](#), [Kumar et al. \(2002\)](#)).

La géométrie de la configuration étudiée est donnée Fig. 5.1. La chambre de combustion est cylindrique, de 340 mm de longueur et 100 mm de diamètre. Durant la campagne de mesures expérimentales, cette chambre a été isolée avec une couverture de fibres céramiques réfractaires de 30 mm d'épaisseur. Le système d'injection se compose d'une injection centrale de gaz naturel (ici, en volume, CH₄ :83,7%, C₂H₆ :7,6%, C₃H₈ :1,9%, N₂ :5,4%, et des concentrations

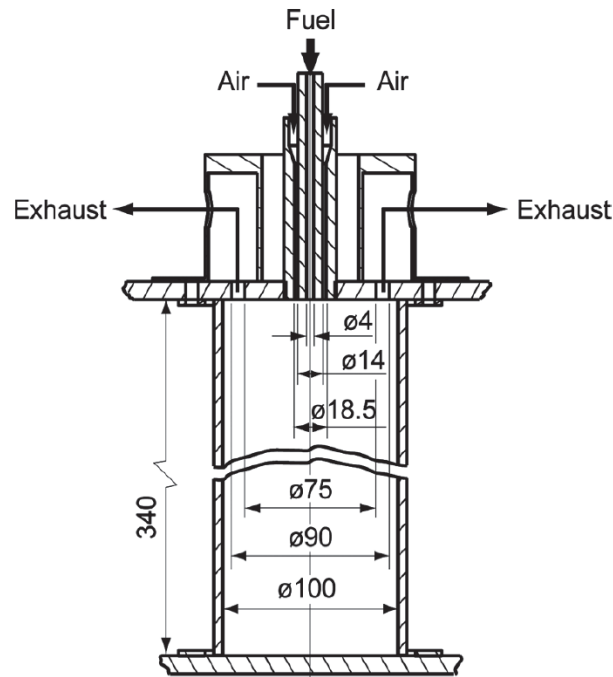


FIGURE 5.1 – Schéma de la configuration expérimentale (Castela et al. (2012)).

mineures d'autres espèces) de 4 mm de diamètre et d'une injection annulaire concentrique d'air préchauffé à 600 K d'un diamètre intérieur de 14 mm et d'un diamètre extérieur de 18,5 mm. La composition du gaz naturel a été prise en compte dans le calcul des flammelettes laminaires. La cheminée, située sur la même paroi que le système d'injection, est constituée d'une sortie annulaire de 75 mm de diamètre intérieur et de 90 mm de diamètre extérieur. Les détails sur les techniques de mesure employées sont exposés dans l'article de Castela et al. (2012).

Pour cette configuration, des données moyennes sur la température et sur les fractions molaires sèches d'espèces (O_2 , CO_2 , CO , HC , NO_x) sont disponibles à différentes distances du système d'injection. Il est intéressant de noter que ces mesures n'ont été effectuées que suivant un unique demi-plan de symétrie de la configuration. En moyenne, les auteurs estiment des incertitudes de l'ordre de 5% sur la température et de l'ordre de 10% pour les espèces. Ces estimations étant faites en moyenne, elles ne fournissent pas d'indication sur les incertitudes locales.

Plusieurs conditions opératoires sont reportées dans l'article de Castela et al., dont trois pour lesquelles les données moyennes au sein de la chambre de combustion sont disponibles. Afin de se limiter à un cas quasi-adiabatique, il a été choisi de ne simuler que les conditions opératoires décrites dans le tableau 5.1. Un simple calcul d'équilibre à richesse globale a permis de montrer que sans prise en compte des pertes thermiques, la température globale de la chambre

ϕ_G	U_{air} [m/s]	U_{fuel} [m/s]	Re_{air}	Re_{fuel}	τ_G^{res} [s]
0.416	108	17,7	8751	4514	0,211

TABLE 5.1 – Richesse globale ϕ_G , vitesse d’injection de l’air U_{air} et du combustible U_{fuel} , nombres de Reynolds relatifs aux injections Re_{air} et Re_{fuel} et temps de résidence global τ_G^{res} évalué comme le volume de la chambre de combustion sur le débit des réactifs.

dans la simulation n’excéderait pas les données expérimentales de plus de 90 K. Nous avons donc considéré que la configuration soumise à ces conditions opératoires était adiabatique.

Au vu de la valeur de la richesse globale présentée dans ces conditions opératoires, l’établissement d’un régime de combustion sans flamme peut être discuté. Toutefois, l’analyse expérimentale montre que les variations de température au sein de la chambre de combustion sont très faibles, et les émissions de monoxyde de carbone et d’oxydes d’azote sont extrêmement faibles. De plus, une imagerie de radical OH^* a permis d’établir que la zone de réaction était fortement distribuée dans l’enceinte, contrairement à la zone de réaction localisée obtenue dans cette même configuration pour une combustion pauvre classique.

Comme l’étude expérimentale est très récente, il n’existe à ce jour qu’un seul article reportant des résultats de simulations numériques de la configuration considérée : l’étude de [Graca et al. \(2012\)](#). Les auteurs de cet article utilisent des simulations RANS en comparant les résultats donnés par les modèles de combustion EDC ([Magnussen and Hjertager \(1977\)](#)) et T-PDF ([Pope \(1985\)](#)) aux données expérimentales. Les deux modèles de combustion donnent des résultats similaires, en prédisant une combustion retardée par rapport aux données expérimentales. Le long de l’axe de symétrie, la température et la fraction molaire sèche de dioxyde de carbone sont en effet sous-estimées, alors que la fraction molaire sèche d’ O_2 est surestimée, et ce jusqu’à plus de 204 mm (plus de 60% de la taille de la chambre). Un bon accord entre les prédictions et les mesures de températures et d’espèces majeures est observé ailleurs. Les auteurs attribuent ces différences importantes à l’utilisation du modèle $k - \epsilon$ de [Shih et al. \(1995\)](#) pour modéliser la turbulence, et avancent que l’utilisation de simulations LES permettrait de capturer plus précisément le mélange et la combustion dans cette configuration.

5.3 Configuration numérique

Pour valider le modèle proposé dans les chapitres 3 et 4, nous réalisons ici des simulations LES de la configuration de [Castela et al.](#). Dans ce travail, nous avons couplé les modèles de combustion au code académique volumes-finis YALES2, développé spécifiquement pour résoudre des problèmes de combustion sur des maillages complexes très volumineux ([Moureau et al. \(2011a\)](#), [Moureau et al. \(2011b\)](#)). Ce code de calcul résout les équations de Navier-Stokes en ap-

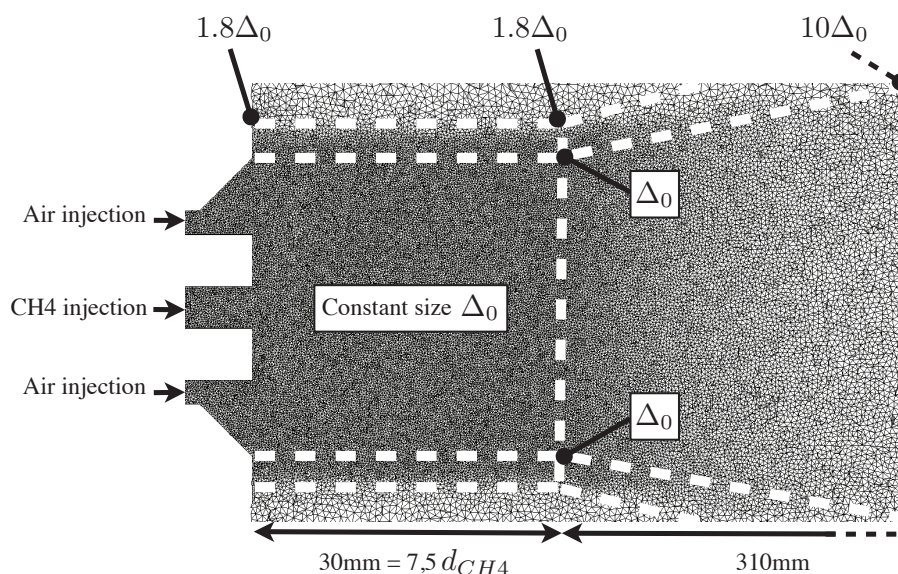


FIGURE 5.2 – Représentation du maillage utilisé et de la répartition des points sur un plan médian. Δ_0 est la taille de référence minimale de cellules imposée dans le maillage. La figure est tirée du maillage moyen.

proximation faible nombre de Mach avec une méthode de projection (Chorin (1968)) pour écoulements à densité constante ou variable. Dans les calculs effectués ici, les équations sous forme conservative (de continuité, de quantité de mouvements et des variables de couplage, définies dans le chapitre précédent) sont avancées avec un schéma centré d'ordre 4 en espace et un schéma d'ordre 4 de type Runge-Kutta en temps.

5.3.1 Maillage

Une représentation du maillage utilisé et de la distribution des points est donnée Fig. 5.2. Il est important de noter que nous n'avons pas maillé le système d'injection complet par manque d'informations sur la géométrie : on s'est limité ici à mailler 80 millimètres (~ 17 fois le diamètre hydraulique du conduit d'air) de l'injection annulaire de l'air. L'établissement d'un écoulement dont la turbulence est parfaitement établie au sortir de l'injecteur d'air n'est pas garanti. Toutefois, des tests préliminaires sur l'influence de l'intensité de la turbulence prescrite en entrée de cet injecteur ont montré que les résultats moyens étaient peu sensibles à cette valeur, ce qui assure le bien-fondé de notre approche.

Plusieurs maillages ont été construits pour cette configuration dans deux optiques majeures :

- s'assurer de la convergence en maillage ;

Maillage	Δ_0 [mm]	Nb. de points	Nb. d'éléments	n_{Fuel}
Grossier	0,4	1,2M	6M	~ 10
Moyen	0,22	5,5M	28,5M	~ 18
Fin	0,11	41M	228M	~ 36

TABLE 5.2 – Ordres de grandeur des maillages utilisés pour la configuration de *Castela et al.*.

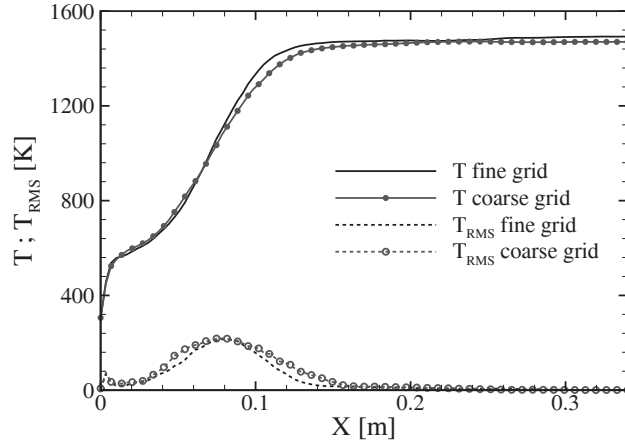


FIGURE 5.3 – Moyennes de Favre et RMS de la température le long de l'axe de symétrie de la configuration obtenues avec le modèle NADFPV pour les deux maillages construits.

- accélérer l'obtention d'un régime établi pour des calculs sur des maillages de plus en plus fins.

Le tableau 5.2 présente le nombre de points utilisés pour chaque maillage, ainsi que le nombre de points correspondants le long d'un diamètre de l'injecteur de méthane. Cette configuration présente un temps de résidence global τ_G^{res} très important (plus de 200 ms). Par conséquent, comme le pas de temps de la simulation est ici limité par le pas de temps convectif, il est difficile de converger des statistiques sur le maillage le plus fin.

La figure 5.3 montre que les différents maillages utilisés ont peu d'influence sur les grandeurs moyennes et sur les RMS résolues. Cela valide donc la discrétisation spatiale employée. Pour la comparaison des prédictions avec les données expérimentales et l'analyse des résultats LES, les maillages *moyens* ont été systématiquement employés. Ce choix est justifié par le fait que même si la convergence en maillage est *a priori* atteinte sur les moyennes et les RMS, les résultats obtenus sur maillage moyen présentent un bon compromis entre le temps et le coût de calcul¹ et la dispersion des scalaires. Notons que les cal-

1. À chaque fois que le maillage est raffiné, le pas de temps Δt est approximativement

culs sur le maillage fin (qui dispose d'environ 230 millions d'éléments), sont particulièrement longs et coûteux en ressources informatiques, et l'obtention de statistiques avec ce maillage sur chaque coupe radiale s'est révélée être trop coûteuse.

5.3.2 Conditions limites

Pour ces simulations, des murs non-glissants sont utilisés pour toutes les parois du domaine. Des profils plats de vitesse sont imposés en entrée de fuel et de comburant, et on superpose à l'injection d'air des fluctuations de vitesse issues d'une turbulence homogène isotrope pour laquelle on a imposé une intensité turbulente I_{inj} de 5%. Afin de vérifier l'influence de cette intensité turbulente sur l'écoulement dans la chambre, des variations de I_{inj} entre 3% et 6% ont été testées, mais n'ont pas abouti à des modifications significatives sur la topologie de l'écoulement et les grandeurs moyennes.

5.3.3 Temps physiques simulés et moyennes

Pour établir l'écoulement dans les calculs avant d'évaluer les moyennes temporelles, environ 300 ms de temps physique est calculé sur le maillage grossier, ce qui correspond approximativement à $1,5\tau_G^{res}$. Cette étape initiale permet d'établir les débits volumiques ainsi que les grandes structures et les zones de recirculations. Puis la solution est interpolée sur le maillage moyen, pour lequel on simule à nouveau $\frac{1}{2}\tau_G^{res}$. Enfin, les moyennes temporelles sont calculées sur un demi temps de résidence global complet. Pour tirer parti de la symétrie de la configuration, les moyennes temporelles obtenues sont moyennées azimutalement pour les espèces et la température, suivant 32 coupes radiales. Au total, le temps physique simulé est donc d'environ 500 ms.

Environ 75.000 heures de calculs ont été nécessaires par calculs sur 288 coeurs sur le cluster SGI Altix ICE 8200 "Jade" du CINES (Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur).

5.3.4 Tables thermochimiques de couplage

Pour simuler cette configuration, on a choisi le schéma cinétique GRI3.0 de [Smith et al. \(1999\)](#), développé dans le cadre de la modélisation de la combustion du gaz naturel, et considéré comme valable pour cette application. La table thermochimique utilisée pour le modèle NADFPV est discrétisée en $201 * 15 * 201 * 11$ points dans les directions $\tilde{Z} * S_Z * \bar{C} * \bar{\alpha}$. Un maillage régulier est utilisé pour la fraction de mélange, la variable d'avancement normalisée et le paramètre de dilution, tandis qu'une série mathématique avec une loi de puissance de degré 2, 7 est employée pour la ségrégation de la fraction de mélange.

divisé par deux et le nombre de points multiplié par 8. En supposant un scaling linéaire du code de calcul pour les applications simulées, le coût de calcul est donc approximativement multiplié par 16 à chaque raffinement de maillage.

La génération de la table, du calcul des flammelettes laminaires aux opérations de filtrage, a pris au total deux heures sur 16 processeurs.

5.4 Topologie de l'écoulement

5.4.1 Champs de vitesse axiale

Avant de s'attarder sur le comportement des modèles de combustion, il est important d'étudier la topologie de l'écoulement. La figure 5.4 présente les champs instantanés, moyens et de RMS de vitesse axiale.

Plusieurs zones se distinguent dans ces figures. À proximité des injecteurs, on peut voir que la vitesse élevée du jet d'air forme un rideau autour de l'injection de combustible. Ce dernier n'interagit donc pas directement avec les gaz brûlés. À la place, un prémélange des réactifs frais se produit. Cette zone est caractérisée par des RMS de vitesses élevées, puisque la différence entre la quantité de mouvement du combustible et celle de l'oxydant est très importante.

Le long de l'axe de symétrie de la configuration, le point de stagnation de la chambre de combustion entraîne une diminution de la vitesse axiale et de ses fluctuations. De plus, on peut noter que la forte impulsion du jet d'air, couplé avec le confinement dû aux parois et au fait que la sortie des gaz est située sur la même paroi que le système d'injection, implique un important écoulement inverse² annulaire le long de toute la chambre. Dans cette configuration, ces zones de recirculations sont principalement composées de gaz brûlés. Elles interagissent avec l'entrée d'air frais en contraignant l'ouverture du jet annulaire de comburant. De cette manière, l'air se dilue avec les produits de combustion.

Enfin, une dernière zone peut être identifiée dans l'écoulement : la zone de stagnation de l'écoulement, située en fond de chambre, caractérisée par des vitesses et des fluctuations proches de zéro.

5.4.2 Structures dynamiques

Les structures dynamiques de l'écoulement sont illustrées par la figure 5.5. Très rapidement après la sortie du système d'injection, les structures deviennent de plus en plus chaotiques. Cela favorise le mélange des réactifs avec les produits de combustion recirculés.

Cela a aussi des implications sur le développement de la combustion. En effet, les structures chaotiques favorisent la combustion en mélangeant efficacement les gaz frais avec les produits de combustion. L'homogénéisation résultante du mélange permet de stabiliser la combustion, malgré la richesse globale très faible de la configuration.

De plus, les forts niveaux de turbulence perturbent la flamme en plissant rapidement la zone de réaction (Fig. 5.6).

2. Défini par une vitesse axiale négative.

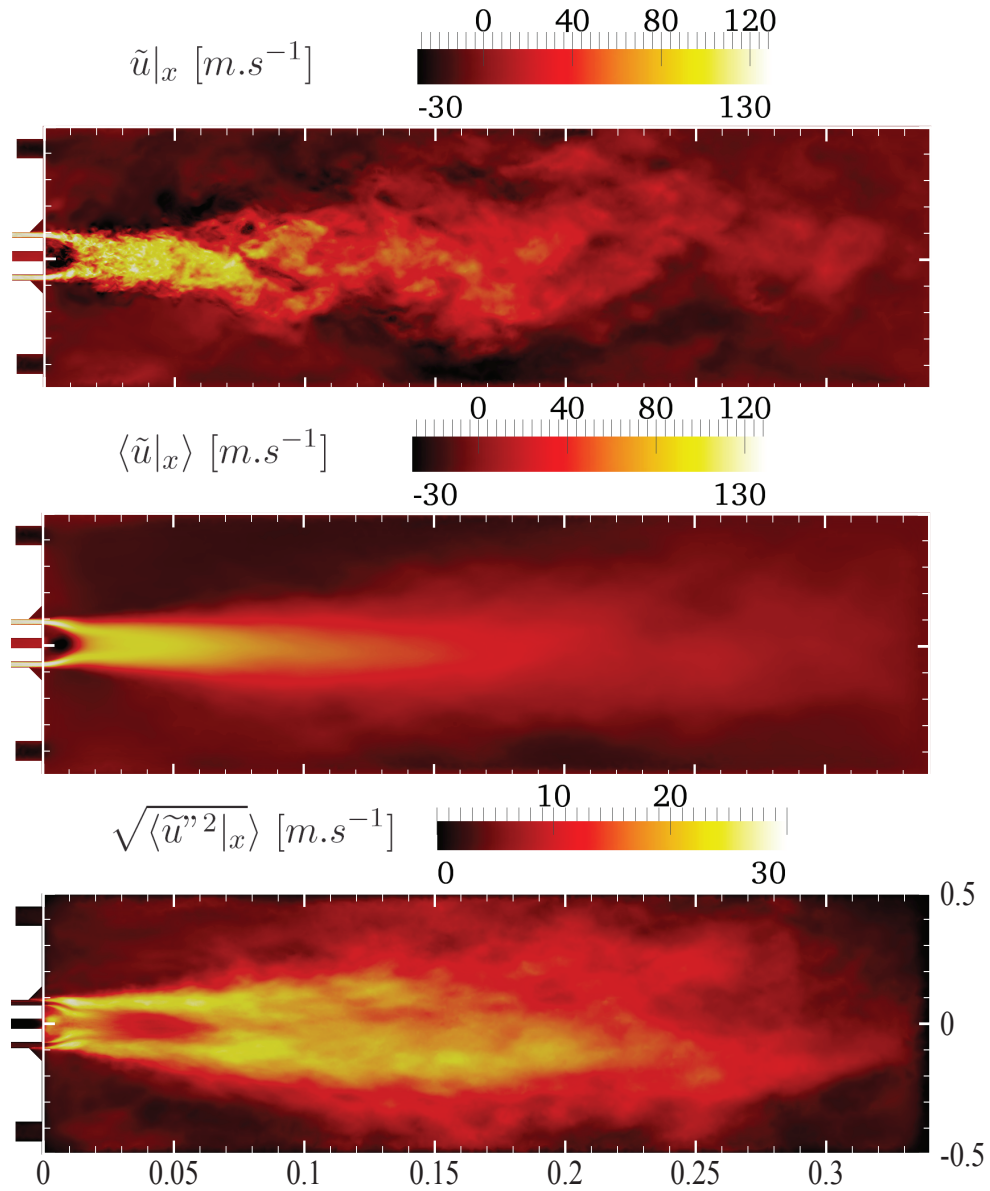


FIGURE 5.4 – haut : champ de vitesse axiale instantanée; milieu : champ de vitesse axiale moyenne; bas : RMS de vitesse axiale moyenne. Ces champs sont issus des calculs réactifs NADFPV.

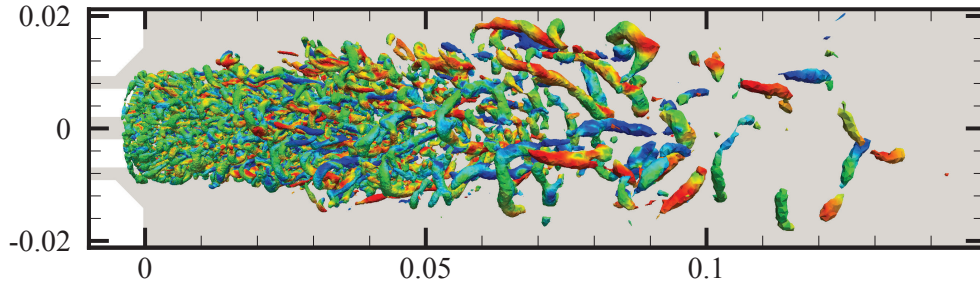


FIGURE 5.5 – Iso-contour du critère $Q = 0.25U_{air}^2/d_{air}$ coloré par la vorticité axiale normalisée $(\frac{|\omega_x|}{|\omega|})$.

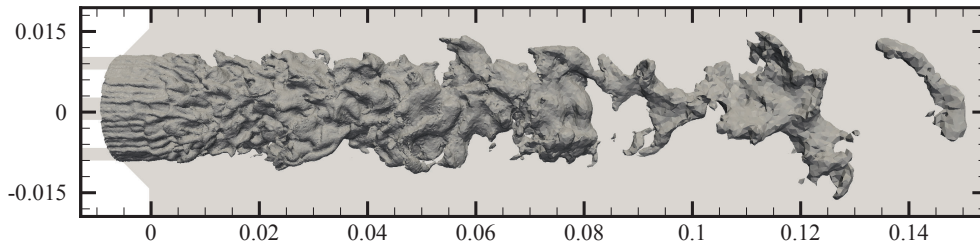


FIGURE 5.6 – Iso-contour de température $T = (T^{max} + T^{min})/2 = 1000K$.

5.5 Comparaison de champs instantanés

Pour comparer les résultats obtenus avec les trois modèles de combustion utilisés (LFM, FPV et NADFPV), on s'intéresse tout d'abord aux caractéristiques des champs instantanés de température obtenus (Fig. 5.7). Les trois modèles prédisent des distributions spatiales de la température différentes. Quatre variations majeures sont montrées :

- les valeurs maximales de température atteintes ;
- la longueur de pénétration des réactifs frais ;
- les gradients spatiaux du champ de température ;
- l'accrochage ou le décrochage de la flamme.

Pour le modèle LFM, la température maximale atteinte est très élevée (de l'ordre de 2150 K). Cela s'explique par le fait que par construction, ce modèle exclut toute possibilité d'extinction de flamme, puisqu'il se borne à une tabulation de la branche stable de la courbe en S (solution des équations de flammelettes stationnaires). Pour une fraction de mélange donnée, la température minimale est donc limitée par sa valeur pour un taux de dissipation scalaire proche de celui d'extinction. La combustion y est donc considérée comme rapide et les poches de mélange à la stœchiométrie y brûlent avec intensité (Fig. 5.8).

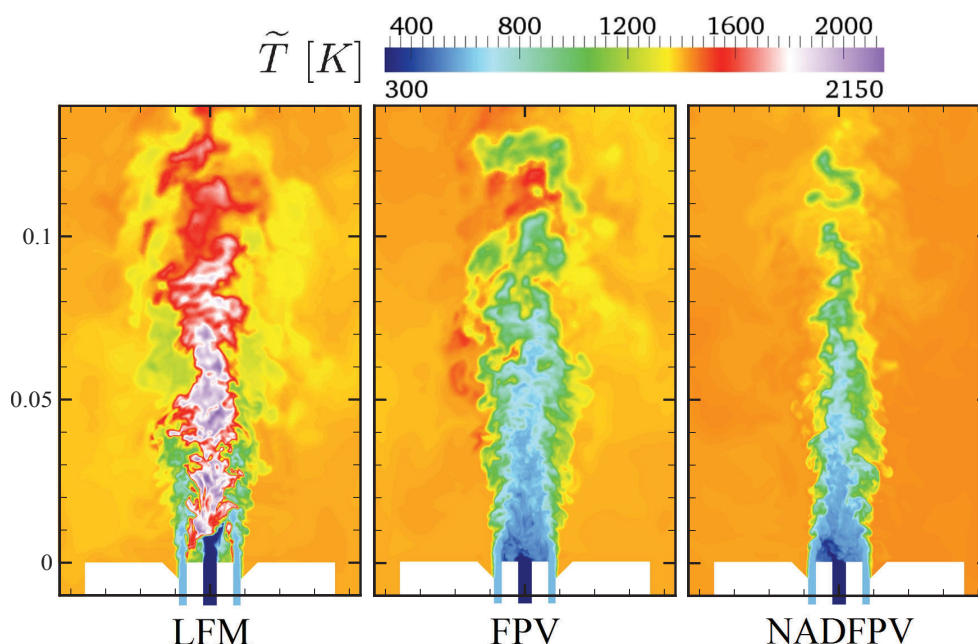


FIGURE 5.7 – Champs de température sur le plan médian pour les trois modèles. La distribution est illustrée sur la zone proche du système d'injection. gauche : LFM; milieu : FPV; droite : NADFPV.

Cela explique par ailleurs pourquoi il n'existe pas, à proprement parler, de pénétration des réactifs frais dans la chambre de combustion puisque n'importe quelle richesse brûle. Cela est aussi cohérent avec les très fortes différences de température obtenues et l'accrochage de la flamme aux parois sur lesquelles sont montés les injecteurs de réactifs.

Le modèle FPV, qui tabule la totalité des solutions des équations de flammelettes stationnaires, admet les états non-brûlés des mélanges comme possibilité de solution. Dans ce cas-là, la température des réactifs frais n'étant pas suffisante pour assurer l'autoallumage du mélange entre le combustible et le comburant, ce dernier ne réagit pas en sortie des injecteurs, et un prémélange partiel des réactifs se forme avant le processus de combustion. Plus en aval de l'écoulement, les gaz brûlés chauds entrent en contact avec ce prémélange, et la combustion démarre grâce à cet apport de chaleur. Il est important de noter que les températures maximales présentées par les simulations avec FPV sont singulièrement moins élevées que celles prédites par le modèle LFM. C'est une conséquence du prémélange important des réactifs avant combustion et de la faible richesse globale de cette configuration. En effet, la combustion de zones stoechiométriques est évitée en favorisant un mélange trop intense des réactifs pour que la cinétique chimique se développe, comme le montre la figure 5.9, qui présente la distribution de température en fonction de la fraction de mélange. Une autre conséquence de ce processus est que la combustion est bien plus

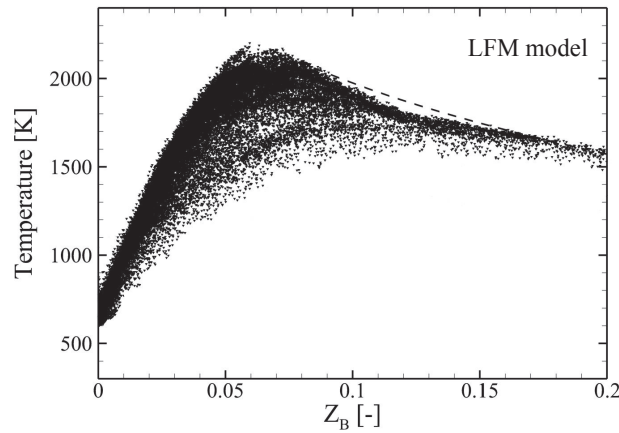


FIGURE 5.8 – Nuages de points de la température en fonction de la fraction de mélange obtenue sur une coupe axiale pour un champ instantané pour le modèle LFM. La solution d'une flamelette non diluée pour $\chi_{st} = 20 \text{ s}^{-1}$ est illustrée par la ligne discontinue.

homogène avec le modèle FPV qu'avec le modèle LFM. Notons toutefois qu'il subsiste des poches sporadiques et intermittentes de richesses, supérieures à la richesse globale, qui peuvent brûler en aval de l'écoulement : elles sont caractérisées par des températures supérieures à 1550 K. Ces zones sont illustrées Fig. 5.7 par les poches de gaz en rouge.

Enfin, le modèle NADFPV, qui prend en compte l'influence de la dilution à enthalpie constante des réactifs, présente une répartition de la température assez similaire à celle prédite par le modèle FPV. La zone de réaction est détachée de la région entre les entrées d'air et de combustible dans l'enceinte de la chambre, et les températures maximales atteintes ($\sim 1500 \text{ K}$) sont nettement inférieures à celles prédites par les simulations avec l'approche LFM. La figure 5.10 présente la répartition de la température en fonction de la fraction de mélange pour le modèle NADFPV : il existe des gaz imbrûlés pour toute fraction de mélange. Des différences sur la longueur de pénétration des réactifs frais et des variations de température sont néanmoins observables, selon que la dilution sur la cinétique chimique est prise en compte ou non. Effectivement, les réactifs réagissent plus tôt, la variation de température entre les gaz frais et les gaz brûlés se fait de manière fortement homogène et on ne trouve pas de points *chauds* (supérieurs à 1550 K) dans la chambre (cette propriété se vérifie en suivant au cours du temps la valeur maximale de la température dans toute la configuration).

En définitive, les modèles utilisés dans ces simulations prédisent des caractéristiques de combustion fort différentes. Pour conclure quant à la validité des caractéristiques différentes mises en avant dans cette section, une comparaison avec les données expérimentales s'impose.

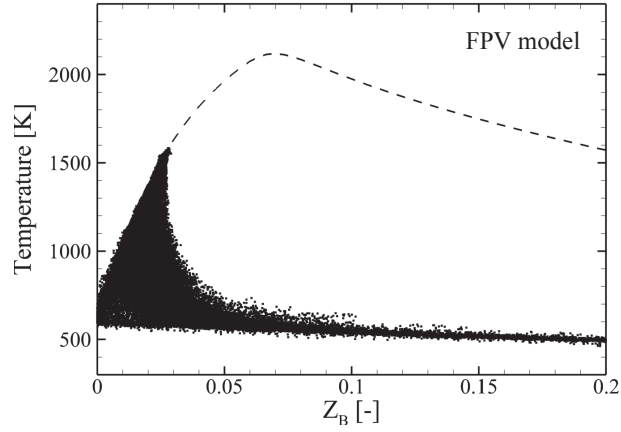


FIGURE 5.9 – Nuages de points de la température en fonction de la fraction de mélange obtenue sur une coupe axiale pour un champ instantané pour le modèle LFM. La solution d'une flamelette non diluée pour $\chi_{st} = 20 \text{ s}^{-1}$ est illustrée par la ligne discontinue.

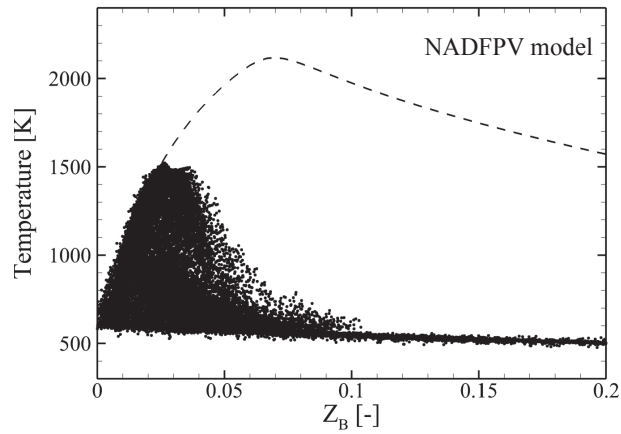


FIGURE 5.10 – Nuages de points de la température en fonction de la fraction de mélange obtenue sur une coupe axiale pour un champ instantané pour le modèle LFM. La solution d'une flamelette non diluée pour $\chi_{st} = 20 \text{ s}^{-1}$ est illustrée par la ligne discontinue.

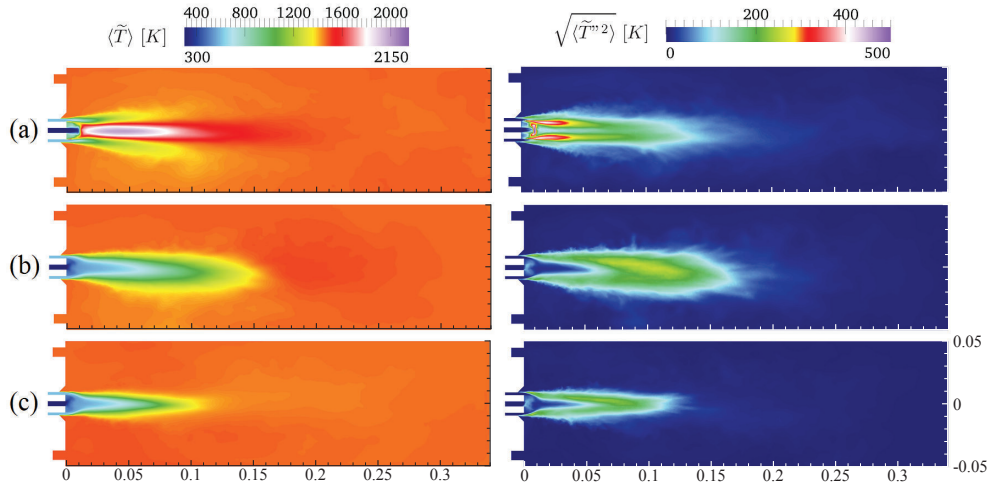


FIGURE 5.11 – Champs des moyennes et des RMS résolues de la température filtrée au sens de Favre. (a) : LFM; (b) : FPV; (c) : NADFPV.

5.6 Comparaison avec les données expérimentales

La figure 5.11 illustre les champs moyens et de RMS de la température pour les trois modèles utilisés. Les différences énoncées lors de l'étude des champs instantanés se retrouvent sur les schémas moyens. Parmi ces résultats, le modèle NADFPV est le seul à même de reproduire un champ de température moyen fortement homogène. C'est le caractère qui a été observé dans l'expérience (Castela et al. (2012)). Les distributions et les intensités des RMS de la température sont aussi très différentes en fonction du modèle de combustion utilisé. En effet, elles n'excèdent pas 200 K dans le cas du modèle NADFPV, alors qu'elles dépassent les 500 K sur une zone plus large pour l'approche LFM. Cette comparaison reste cependant très qualitative puisqu'on ne dispose d'aucune information sur les RMS des grandeurs chimiques mesurées.

5.6.1 Comparaisons suivant l'axe longitudinal

Les moyennes de température le long de l'axe de symétrie de la configuration sont fournies en Fig. 5.12. Sur les cinq premières stations de mesure, les résultats des modèles sont très différents. Les températures prédites par le modèle LFM surestiment globalement les données expérimentales jusqu'à 170 mm. Le modèle FPV, quant à lui, prédit une combustion retardée, et l'accord avec les mesures n'est atteint qu'à 150 mm, soit à $\sim 44\%$ de la longueur totale de la chambre de combustion. Une amélioration notable est obtenue avec le modèle NADFPV, qui fournit des résultats satisfaisants dès 110 mm. Cependant, la température est sous-estimée sur les deux premiers points de mesures, et en particulier sur la première station, située à 70 mm de l'entrée de combustible.

Ces résultats sont à mettre en relation avec les prédictions des fractions

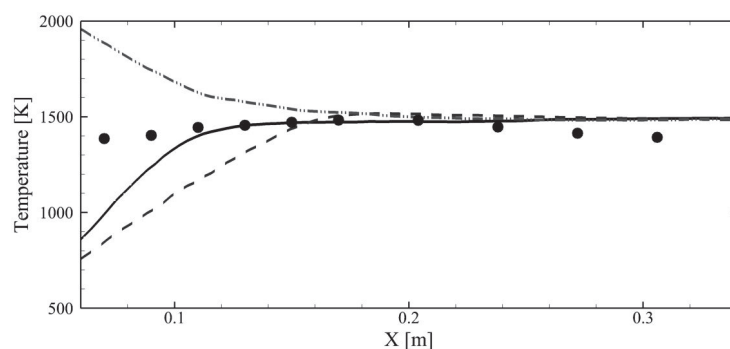


FIGURE 5.12 – Moyenne de température filtrée au sens de Favre le long de l'axe de symétrie de la configuration. symboles : données expérimentales; ligne continue : NADFPV; ligne en tirets : FPV; ligne tiret-point-point : LFM

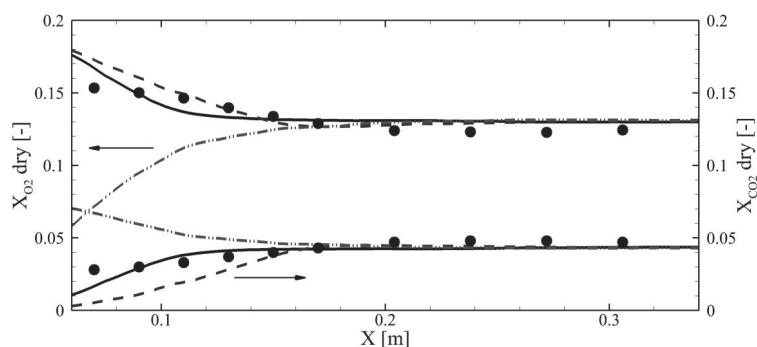


FIGURE 5.13 – Moyenne de fraction molaire sèche de O_2 et de CO_2 filtrées au sens de Favre le long de l'axe de symétrie de la configuration. La correspondance des styles est indiquée Fig. 5.12

molaires sèches des espèces majoritaires O_2 et CO_2 (Fig. 5.13). Les fractions molaires de dioxyde de carbone sont surévaluées par le modèle LFM et sous-estimées par le modèle FPV. Un bon accord est obtenu pour l'approche NADFPV, sauf pour le premier point de mesure. La fraction molaire de dioxygène est, quant à elle, largement sous-estimée pour le modèle LFM mais correctement reproduite par les deux autres modèles. Globalement, la prise en compte de la dilution dans l'approche NADFPV permet d'améliorer nettement les résultats.

Il est intéressant de noter que l'accord entre les simulations et l'expérience se fait à des distances différentes que pour la température. En particulier sur le premier point de mesure axial, qui présente une température très élevée par rapport aux niveaux de O_2 et de CO_2 .

Les comparaisons des fractions molaires de monoxyde de carbone montrent, à nouveau, les différences fondamentales entre les prédictions fournies par les trois approches (Fig.5.14). Le modèle LFM prédit une combustion rapide pour toutes les richesses. Cette caractéristique se retrouve en moyenne sur le CO, dont la fraction molaire est largement surestimée proche du système d'injection

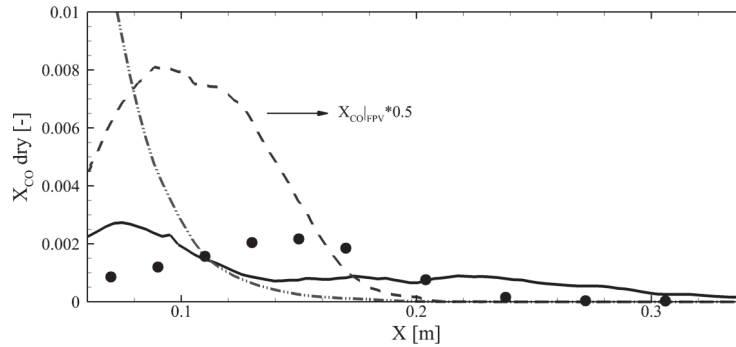


FIGURE 5.14 – Moyenne de fraction molaire sèche de CO filtrée au sens de Favre le long de l'axe de symétrie de la configuration. La correspondance des styles est indiquée Fig. 5.12

et décroît rapidement par la suite à cause de la convergence rapide des grandeurs chimiques vers l'équilibre. La combustion retardée estimée par le modèle FPV entraîne pour sa part une surproduction de CO, liée à une description inadaptée de la cinétique chimique. En revanche, lorsque la dilution des réactifs avec les produits de combustion est prise en compte lors de la tabulation des trajectoires chimiques dans l'espace des compositions (approche NADFPV), le bon ordre de grandeur est retrouvé, bien que la localisation du maximum de CO soit prédite trop tôt dans la chambre.

5.6.2 Comparaisons suivant différentes coupes radiales

Les profils radiaux de température et des fractions molaires de O_2 , CO_2 et CO issus des simulations sont comparés avec les données expérimentales des figures 5.15 à 5.18). Les résultats obtenus avec le modèle NADFPV sont en bon accord avec l'expérience pour les stations de mesures situées à $x \geq 90$ mm. Pour les deux autres modèles, les points de mesures sont atteints, pour la température et les espèces majoritaires, bien plus en aval de l'écoulement, à partir de $x \geq 130$ mm. Les différences observées plus en amont sont principalement localisées dans des zones où le mélange n'est pas homogène. En aval de l'écoulement, on note un léger écart entre les températures issues des simulations et les données expérimentales. C'est en particulier le cas dans la zone de stagnation de l'écoulement (station de mesure à 304 mm). Cela est dû au fait que l'on a négligé toute perte thermique dans les simulations. La figure 5.18 montre en outre que les prédictions de CO s'avèrent extrêmement différentes entre les formulations employées, et permet de préciser l'importance de la prise en compte de la dilution pour simuler correctement la cinétique chimique.

L'analyse des profils radiaux montre que les modèles présentent des résultats différents dans la transition entre les gaz frais et les gaz brûlés. Il est utile de noter que, hors de ces zones transitionnelles, la consistance entre les trois approches est vérifiée, puisqu'à partir de 170 mm, les solutions tendent toutes

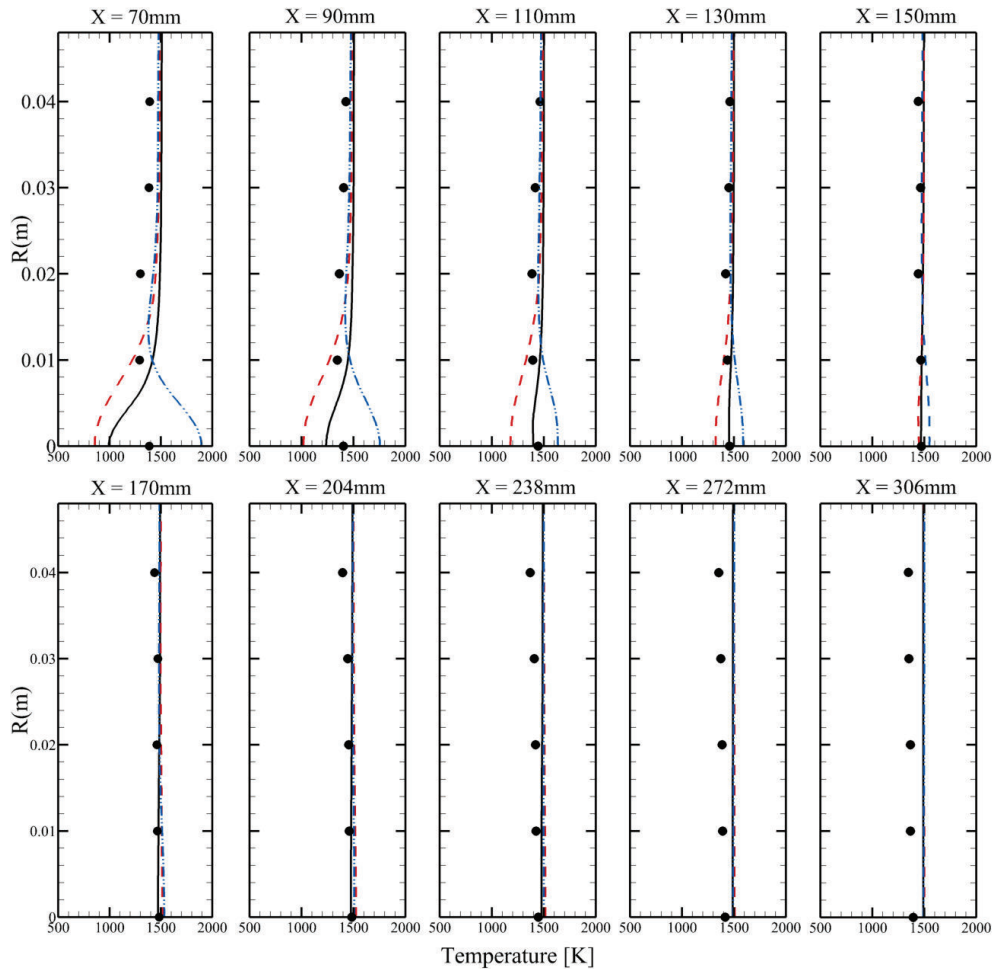


FIGURE 5.15 – Moyennes de températures filtrées au sens de Favre pour différentes coupes radiales. symboles : données expérimentales ; ligne continue : NADFPV ; ligne en tirets : FPV ; ligne tiret-point-point : LFM.

vers le même équilibre thermo-chimique. Comme le modèle NADFPV capture correctement le développement de la combustion dans la zone de transition, cela suggère qu'il montre bien les mécanismes thermo-chimiques fondamentaux pour décrire la combustion diluée caractéristique de cette configuration.

Ces comparaisons permettent de mettre en avant trois conclusions majeures, en lien avec les objectifs de cette étude :

- Comme présumé par [Graca et al. \(2012\)](#), la description du mélange dans cette configuration est plus précise en LES qu'en RANS. Avec les simulations RANS avec les modèles EDC et de transport de PDF, ces auteurs ne présentent des résultats satisfaisant sur l'axe de symétrie de la configuration qu'après 204 mm (soit après $\sim 70\%$ de la profondeur de

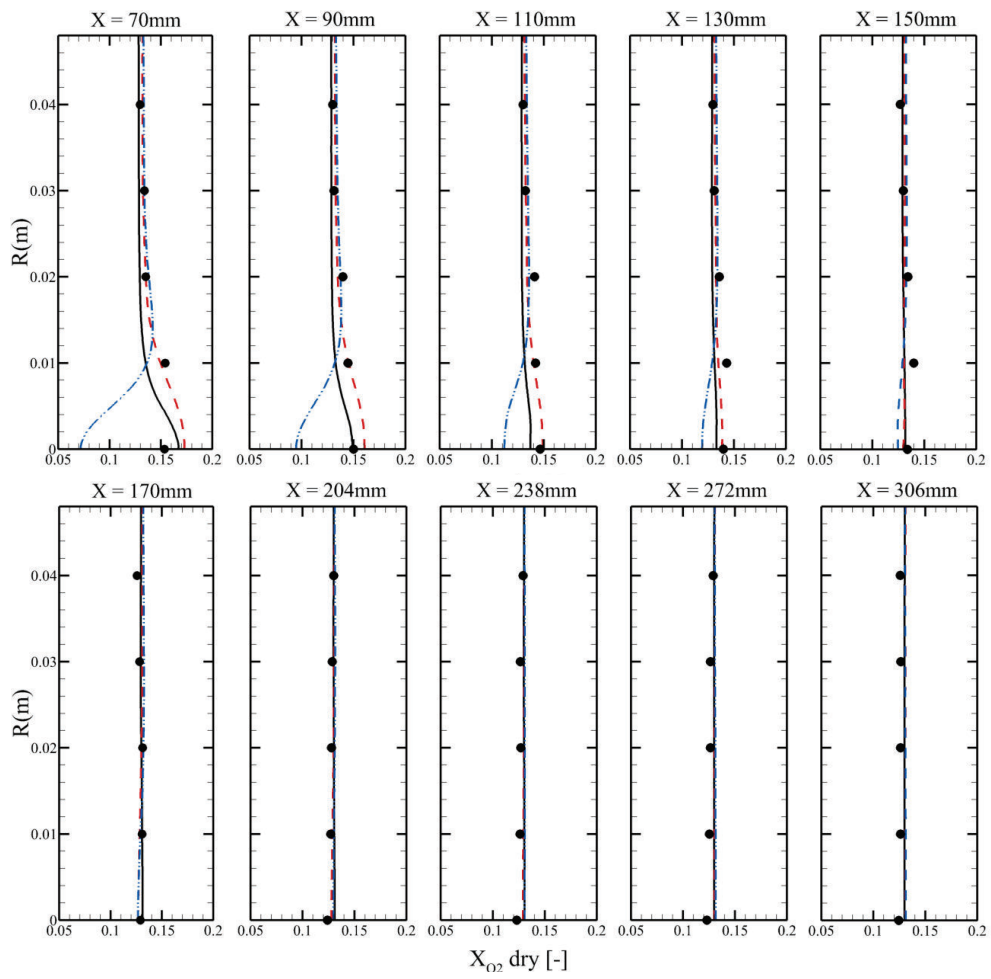


FIGURE 5.16 – Moyennes de fraction molaire sèche de O_2 filtrées au sens de Favre pour différentes coupes radiales. La correspondance des styles est indiquée Fig. 5.15.

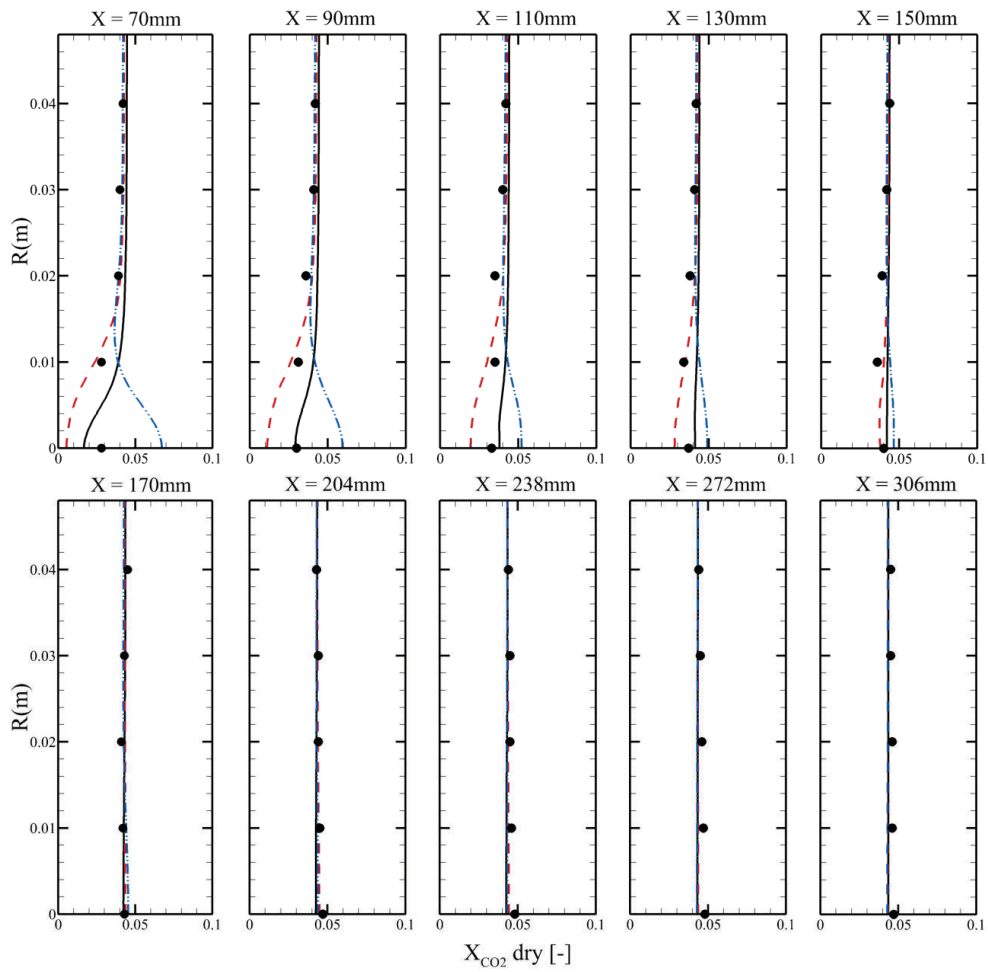


FIGURE 5.17 – Moyennes de fraction molaire sèche de CO_2 filtrées au sens de Favre pour différentes coupes radiales. La correspondance des styles est indiquée Fig. 5.15.

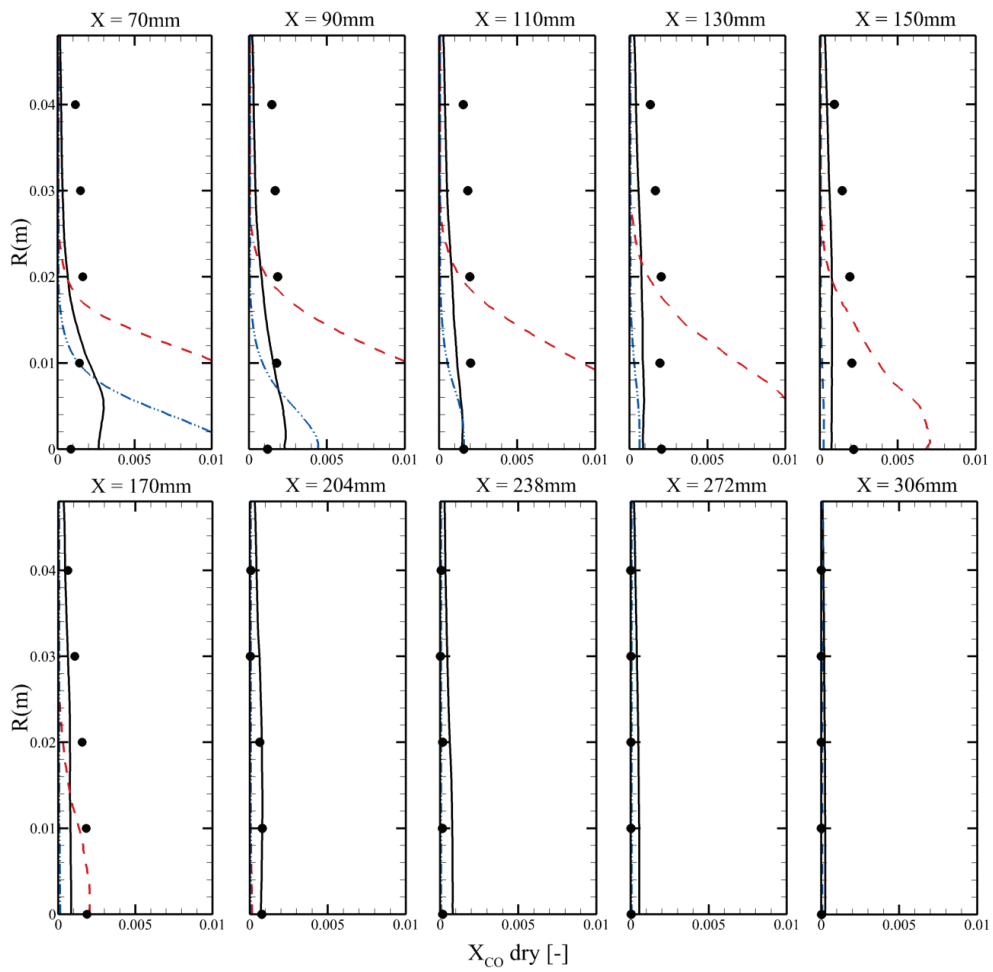


FIGURE 5.18 – Moyennes de fraction molaire sèche de CO filtrées au sens de Favre pour différentes coupes radiales. La correspondance des styles est indiquée Fig. 5.15.

la chambre). Graca et al. (2012) montrent dans leur publication que des modifications des constantes de modélisation utilisées pour le modèle de turbulence $k-\epsilon$ permettent de modifier ces résultats. Bien qu'aucune justification théorique ne puisse être avancée pour soutenir ces modifications, cela permet de montrer des limitations quant à la description du mélange par une approche RANS dans cette configuration. Pour nos simulations LES, au contraire, l'homogénéité mesurée dans l'expérience des champs d'espèce chimique et de température est ici retrouvée dans le pire des cas à partir de 170 mm (modèle LFM) et dans le meilleur des cas à partir de 110 mm (modèle NADFPV). Cela confirme l'importance et la viabilité des simulations aux grandes échelles de la turbulence dans le cadre de la simulation de la combustion sans flamme.

- En comparant les trois modèles, des améliorations notables sont observées avec le modèle NADFPV, notamment le long de l'axe de symétrie de la configuration. L'évolution des espèces chimiques en particulier, montre que le modèle NADFPV reproduit de manière satisfaisante la cinétique chimique de la configuration.
- Enfin, avec l'approche NADFPV et dans une moindre mesure qu'avec les modèles LFM et FPV, il y a des disparités avec les données expérimentales sur la première station de mesure (à 70 mm). Des éléments d'explication de ces différences sont donnés ci-après.

Différentes pistes peuvent être considérées pour expliquer les différences obtenues sur la première station de mesure dans la zone de l'axe de symétrie de la configuration. En premier lieu, les hypothèses de modélisation peuvent être discutées, notamment sur l'estimation du taux de réaction de la variable d'avancement (issu de calculs de flammelettes stationnaires) et de la variable de dilution (donnée par une relation algébrique) mais aussi sur la modélisation des interactions chimie-turbulence. Ces deux points seront discutés plus avant dans ce chapitre en analysant les simulations LES.

Une note sur l'influence du rayonnement et de la diffusion différentielle

D'autres considérations peuvent aussi être faites. La disparité des résultats obtenus sur l'axe de symétrie de la configuration sur la température (fortement sous-estimée) et les espèces (O_2 légèrement surestimé et CO_2 légèrement sous-estimé) semble indiquer une influence du rayonnement ou de la diffusion différentielle. Néanmoins, concernant le rayonnement des gaz, il est important de noter que dans la zone où la température est fortement sous-estimée, les fractions molaires de dioxyde de carbone et d'eau sont assez faibles. De plus, en raison des vitesses élevées que l'on trouve dans cette zone (Fig. 5.4), les temps de résidence y sont faibles, ce qui ne permet pas au processus de rayon-

Espèce	Nombre de Lewis	Espèce	Nombre de Lewis
N ₂	1.226	Ar	1.218
O	0.770	O ₂	1.185
H	0.194	OH	0.785
H ₂	0.324	HO ₂	1.191
H ₂ O ₂	1.199	CH	0.720
CO	1.203	CH ₂	1.060
HCO	1.365	CH ₂ (S)	1.060
CH ₃	1.083	CH ₂ O	1.376
CH ₄	1.088	CO ₂	1.499
CH ₂ OH	1.408	CH ₃ O	1.408
CH ₃ OH	1.407	C ₂ H	1.405
C ₂ H ₂	1.418	HCCO	0.951
C ₂ H ₃	1.432	CH ₂ CO	1.621
C ₂ H ₄	1.431	C ₂ H ₅	1.560
C ₂ H ₆	1.572	H ₂ O	0.879
C	0.823	HCCOH	1.621
CH ₂ CHO	1.628	CH ₃ CHO	1.635
C ₃ H ₈	2.018	C ₃ H ₇	2.010

TABLE 5.3 – Nombre de Lewis des espèces du schéma cinétique GRI3.0 de *Smith et al. (1999)* pour les conditions étudiées dans ce chapitre. Nous omettons les espèces intervenant dans les mécanismes des NO_x

nement d'être effectif. Pour quantifier l'influence de la diffusion différentielle ($Le_k \neq 1$), nous étudions le comportement des solutions de flammes à contre-courant mono-dimensionnelles avec des nombres Lewis différents de l'unité. Pour ce faire, nous utilisons une approche similaire à celle employée dans la thèse de *Vicquelin (2010)*.

Pitsch and Peters (1998) ont observé deux propriétés des nombres de Lewis d'espèces Le_k . En effet, ils ont tout d'abord montré que le calcul de flammelettes stationnaires avec des propriétés de transport complexes sont bien reproduites par des flammelettes calculées avec des nombres de Lewis Le_k constants pour chaque espèce. Ces derniers sont évalués en un point spécifique de la fraction de mélange d'une flammelette avec une description complète des propriétés de transport, puis imposés en tout point de composition. De plus, ils ont avancé qu'une fois ces valeurs connues, ce choix était valable pour d'autres configurations. Comme on se trouve ici dans le cas d'une configuration adiabatique, ces approximations seront retenues. Les nombres de Lewis sont ici calculés au point maximal de température pour une flammelette stationnaire non diluée avec $\chi_Z|_{st} = 30s^{-1}$. Ils sont donnés dans le tableau 5.3.

L'influence de la spécification des nombres de Lewis d'espèces non unitaires est étudiée sur des flammelettes stationnaires soumises à différents niveaux de

dilution (Fig. 5.19). Les différences de comportement sur les grandeurs thermochimiques obtenues entre des flammes à Lewis unitaires ou non-unitaires définissent les mêmes tendances quel que soit le niveau de dilution α . Lorsque des Lewis d'espèces non-unitaires sont considérés, la température maximale est diminuée de 100 K à 300 K en fonction du niveau de dilution. Cela est contraire à ce qui est observé dans la simulation LES avec le modèle NADFPV (pour lequel on a considéré $Le_k = 1$) où la température est fortement sous-estimée. En outre, plusieurs profils d'espèces sont fournis dans la figure 5.19, et montrent que plus le Lewis est différent de l'unité, plus l'espèce est susceptible d'être influencée par la diffusion différentielle.

Ces comparaisons restent qualitatives, et ne fournissent pas d'informations précises sur l'effet de la diffusion différentielle dans la chambre de combustion considérée étant donné que les Lewis non-unitaires influencent le développement des scalaires transportés (la figure 5.19 présente par exemple le terme source de variable d'avancement pour les cas $Le_k = 1$ et $Le_k \neq 1$). Toutefois, ces calculs mono-dimensionnels permettent de dessiner des tendances et de mesurer les ordres de grandeur des différences associées. Par conséquent, ces comparaisons qualitatives permettent d'affirmer que la diffusion différentielle n'est pas à l'origine des différences obtenues entre les simulations LES avec le modèle NADFPV et les données expérimentales sur la première mesure.

Incertitudes liées aux systèmes de mesure

Dans un autre ordre d'idée, il est important de souligner qu'il existe des incertitudes liées aux systèmes de mesure. Les erreurs commises sur la température et les espèces ne sont données qu'en moyenne (respectivement 5% et 10% d'erreur). Pour autant, une discussion avec l'auteur principal de l'étude expérimentale nous aura appris que de très fortes variations de températures étaient observées à 70 mm de l'injection des réactifs, et que les incertitudes sur la température étaient susceptibles d'y être importantes. Ces dernières peuvent en partie être liées aux perturbations aérodynamiques induites sur la température par l'intrusion de la sonde de mesure : il s'agit en effet d'un thermocouple supporté par deux fils de 0,5 mm de diamètre, qui se rejoignent dans un tube en céramique de 6 mm de diamètre (même protocole et mêmes moyens expérimentaux que dans l'étude de Veríssimo (2011)).

5.7 Analyse des simulations LES

5.7.1 Représentation en nuages de points

Pour mesurer l'importance de la dilution dans cette configuration, on analyse la répartition de la variable de dilution en fonction de la variable d'avancement sur la totalité de la plage de fraction de mélange (Fig. 5.20). Ainsi, on observe qu'il n'existe aucun état caractérisé par des valeurs nulles de \tilde{Y}_D lorsque \tilde{Y}_C

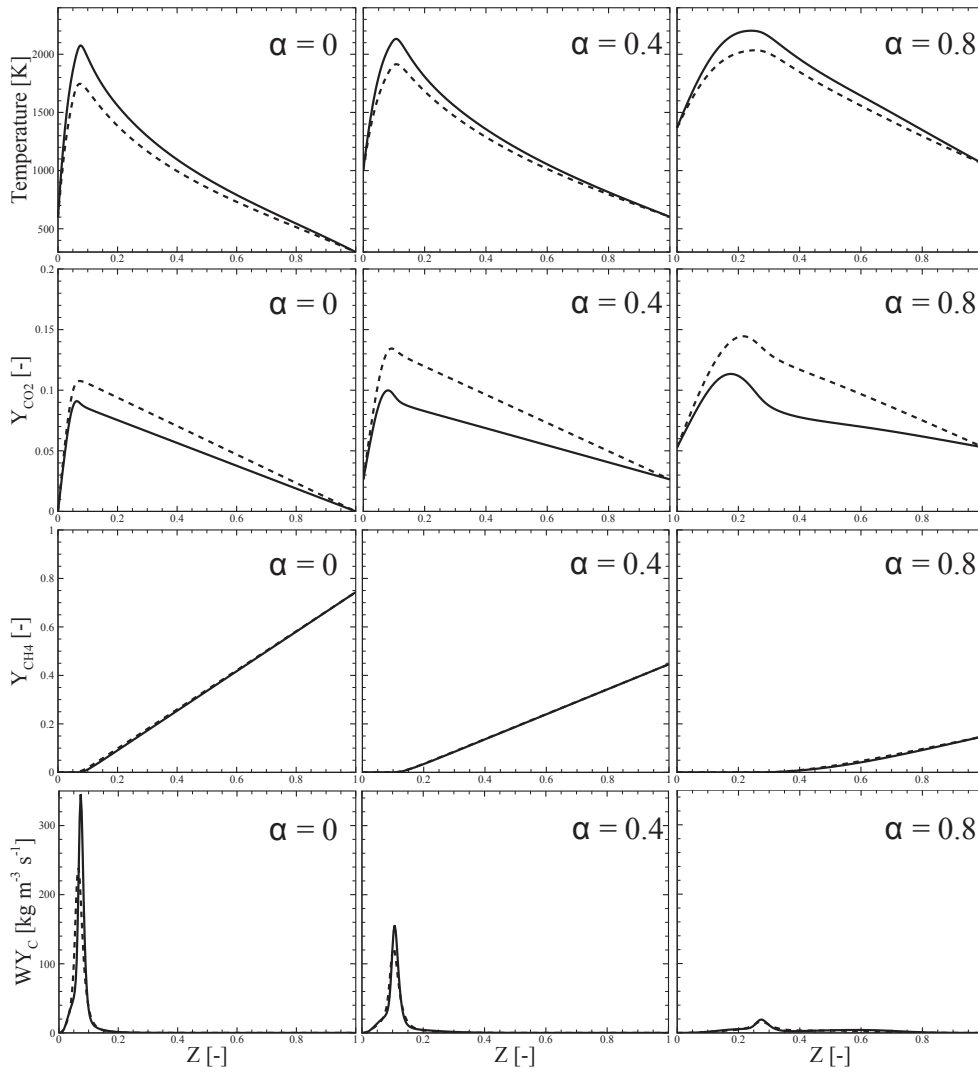


FIGURE 5.19 – Effets des nombres de Lewis d'espèces sur des flammelles stationnaires dans les conditions opératoires de la configuration de *Castela et al. (2012)* avec $\chi Z|_{st} = 30s^{-1}$. ligne continue : $Le_k = 1$; tirets : $Le_k \neq 1$ donné par le tableau 5.3.

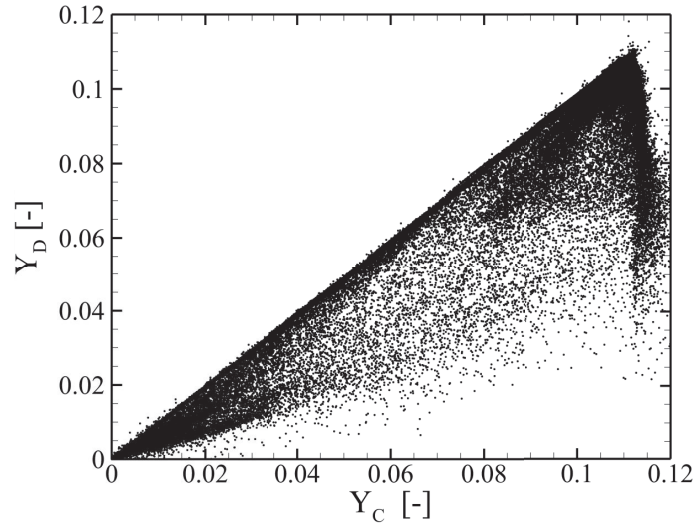


FIGURE 5.20 – Répartition de la variable de dilution \tilde{Y}_D en fonction de la variable d'avancement \tilde{Y}_C sur un plan médian de la configuration.

est différent de zéro. Cela signifie que toute poche de mélange est diluée par des produits de combustion avant de réagir. Ce phénomène est négligé avec l'approche FPV, qui ne considère que les possibilités de combustion entre de l'air pur et du combustible pur.

Afin de préciser l'influence de la dilution des réactifs frais par des gaz brûlés chauds, on étudie la distribution de température et les nuages de points associés en fonction de \tilde{Z}_B pour différentes coupes radiales : $x = 10, 50, 70$ mm (Fig. 5.21) et $x = 90, 110, 130$ mm (Fig. 5.22). Ces coupes permettent de suivre la transition entre les réactifs frais et les gaz brûlés lors de la simulation LES avec le modèle NADFPV.

Au sortir du système d'injection (coupe à 10 mm), deux zones distinctes sont visibles : une zone de mélange entre le combustible et le comburant pur sans combustion et une zone de gaz brûlés dont la température varie très peu. À l'interface de ces deux zones, il y a un mélange entre l'air frais et les produits de combustion, où la température présente des variations importantes (entre 600 K et 1500 K). Aucun phénomène de combustion n'est visible à ce stade, puisque les produits de combustion ne contiennent plus de combustible (on rappelle qu'ici, la combustion est globalement très pauvre : $\phi_G = 0,416$).

Plus en aval de l'écoulement (50 mm et 70 mm), le prémélange partiel des réactifs frais et sa dilution progressive avec les produits de combustion entraînent une restriction de l'espace couvert par la fraction de mélange. Au centre de ces coupes, la combustion n'est pas achevée, et l'augmentation de température s'impute au léger engouffrement de produits de combustion chauds dans cette zone. Par contre, lorsque l'on s'éloigne du centre des coupes, un processus de combustion a lieu entre les réactifs partiellement mélangés et les produits de

combustion qui ont une haute teneur en oxygène. Le modèle NADFPV fournit des résultats sensiblement différents des données expérimentales dans cette zone, ce qui peut indiquer des limitations du modèle quant à :

- l'estimation du terme source de la variable d'avancement (issu de calcul de flammelettes stationnaires) ;
- la modélisation des contributions de sous mailles pour la variable d'avancement et de dilution. Pour ce point cependant, il est intéressant de remarquer qu'une analyse semblable a été effectuée sur le maillage fin (contenant 230 millions d'éléments, soit une résolution deux fois supérieure à celle du maillage moyen), et qu'aucune modification significative de la distribution de température n'a été obtenue dans cette zone.
- la modélisation du terme source de la variable de dilution. Celui-ci n'est en effet créé que dans les gaz brûlés, alors qu'en réalité, il peut être créé *pendant* le processus de combustion.

Le mélange se poursuit plus loin dans la chambre (90 mm et 110 mm). À ces distances du système d'injection, la combustion et la dilution des réactifs sont en compétition de manière plus homogène que précédemment. Il est intéressant de noter qu'ici, l'évolution de la distribution de température est tout à fait différente de celle observée pour un auto-allumage en combustion non-prémélangée (Hilbert and Thevenin (2002), Cabra et al. (2005) Mastorakos (2009)).

Enfin, plus loin dans la chambre (130 mm et plus), le mélange est fortement homogène et les variations de fraction de mélange sont très faibles. L'état stationnaire est atteint puis convecté sur tout le restant de la chambre. Ce sont ces gaz qui, ayant atteint un état stable et terminé leur combustion, sont recirculés dans la chambre et viennent diluer les réactifs frais. À ce niveau, l'espace attracteur chimique tend vers un unique point puisque les réactifs sont entièrement mélangés et que l'on est à l'équilibre thermochimique.

Cette analyse permet de conclure sur l'importance de la prise en compte de la dilution à enthalpie constante pour la modélisation de la cinétique chimique. L'évolution de la température au sein de la chambre de combustion est cohérente avec les mécanismes utilisés lors de la tabulation des grandeurs thermochimiques. De plus, la modélisation du terme source de la variable de dilution semble, elle aussi, validée, bien que des hypothèses fortes aient été effectuées pour sa formulation.

5.7.2 Trajectoires chimiques dans l'espace des phases

Dans la comparaison des résultats des simulations avec les points expérimentaux, on a vu que les niveaux de monoxyde de carbone sont singulièrement différents d'un modèle à l'autre. Pourtant, tout comme avec le modèle NADFPV dans une moindre mesure, avec le modèle FPV la température est sous-estimée

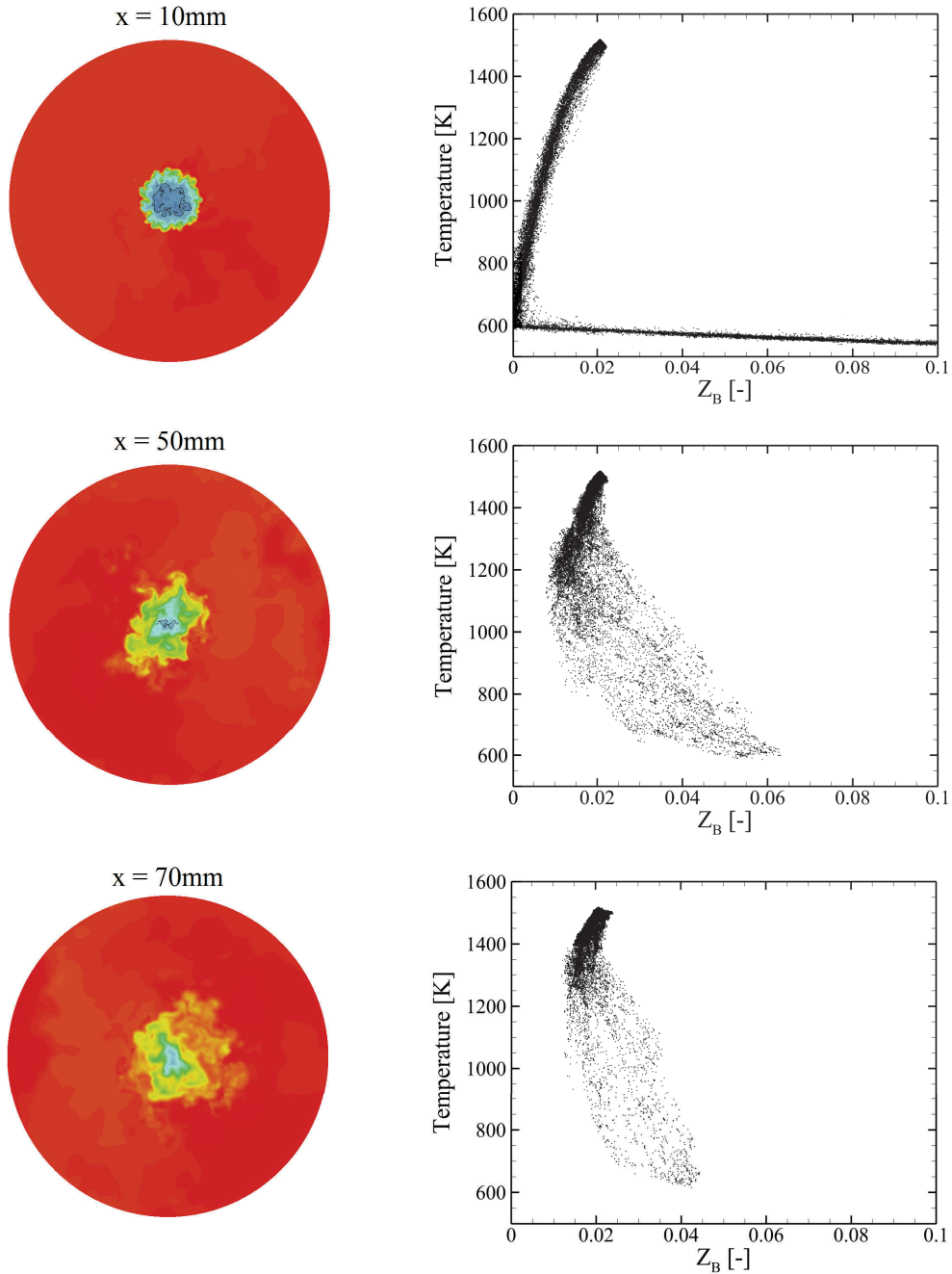


FIGURE 5.21 – *Champ de température instantané (gauche) et nuage de points associé en fonction de la fraction de la mélange (droite) obtenus avec le modèle NADFPV à différentes positions dans la configuration. haut : $x=10\text{ mm}$; milieu : $x=50\text{ mm}$; bas : $x=70\text{ mm}$; ligne noire : iso-ligne de fraction de mélange $Z_B = 0,055$.*

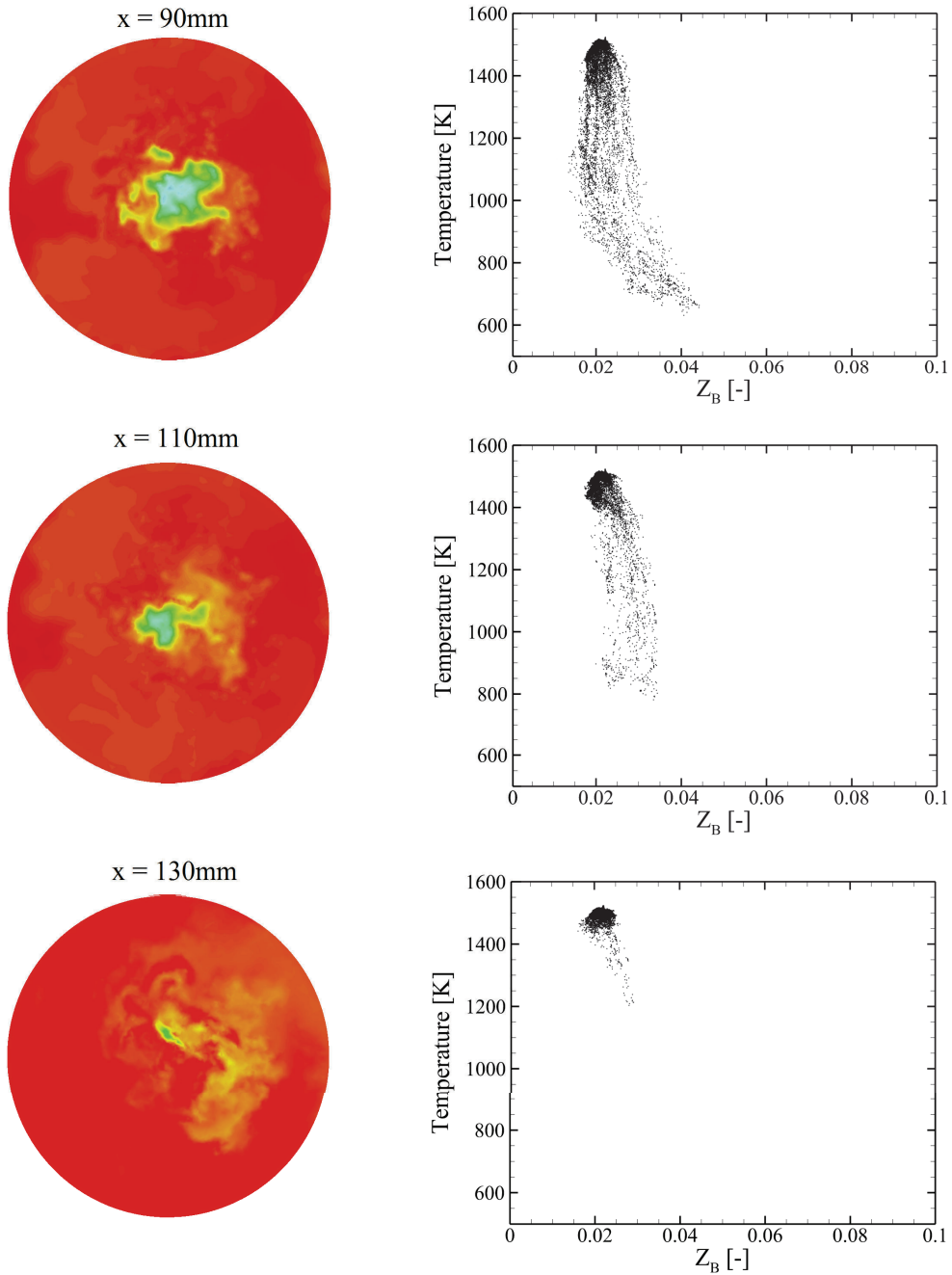


FIGURE 5.22 – Champ de température instantané (gauche) et nuage de points associé en fonction de la fraction de la mélange (droite) obtenus avec le modèle NADFPV à différentes positions dans la configuration. haut : $x=90$ mm ; milieu : $x=110$ mm ; bas : $x=130$ mm.

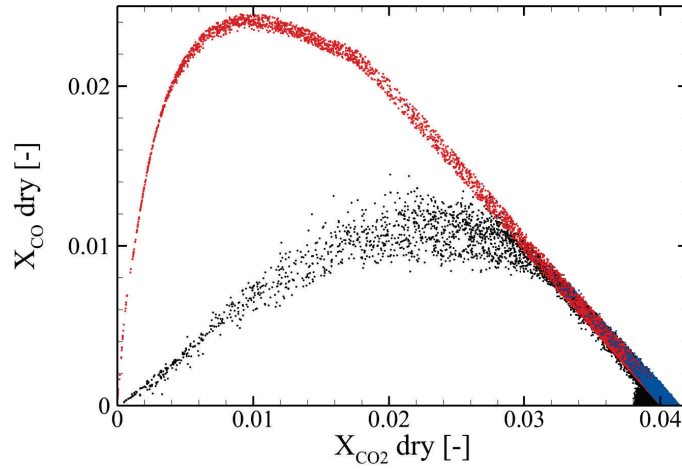


FIGURE 5.23 – Nuages de points de CO en fonction de CO₂ (en fraction molaire sèche) pour $\tilde{Z}_B = Z_B^{\phi G} \pm 0,002$. noir : NADFPV; rouge : FPV; bleu : LFM.

dans les premières stations de mesure. Ceci est un effet de la dilution pure, qui correspond à une modification des trajectoires chimiques que l'on a observée sur les calculs de flammes laminares. Cela se voit d'ailleurs clairement en traçant X_{CO} en fonction de X_{CO_2} : la chimie est bien influencée par la dilution (Fig. 5.23). Comme présumé dans le chapitre 3, ces modifications de trajectoire sont importantes puisque l'on est dans le cas d'une chimie fortement hors équilibre.

5.7.3 Structure de flamme

Comme expliqué dans le chapitre 1, les structures de flammes locales rencontrées en combustion sans flamme ne sont pas connues. On se propose donc maintenant d'estimer quel processus physique (diffusion, propagation de front de flamme, etc) est dominant dans cette configuration.

L'indice de Takeno (Yamashita et al. (1996)), basé sur le produit scalaire des gradients de fuel et d'oxydant est souvent utilisé pour déterminer dans quel mode la combustion a lieu. Cependant, cet indice présente des défaillances, lorsqu'une chimie complexe est considérée et/ou en l'absence d'oxygène ou de combustible. Pour pallier ces limitations, on développe un nouvel indice basé sur les gradients résolus de la fraction de mélange et de la variable d'avancement. L'étude des gradients instantanés de grandeurs thermochimiques n'est pas anodine, et peut être utilisée pour décrire la structure locale de flamme. Dans le cadre de la combustion sans flamme, on peut par exemple citer l'étude expérimentale récente de Duwig et al. (2012), qui analyse le développement du gradient de température au sein d'une chambre de combustion.

Le produit scalaire des gradients d'une fraction de mélange z avec une variable d'avancement Y_C intervient dans l'estimation du taux de dissipation sca-

laire croisé χ_{z,Y_c} :

$$\chi_{z,Y_c} = D\nabla z \cdot \nabla Y_C \quad (5.1)$$

Ce terme a été analysé et modélisé dans le cadre de flammes turbulentes (Domingo et al. (2002), Domingo et al. (2005)). Pour mesurer l'importance de ce terme, on peut s'intéresser au produit scalaire des gradients normalisés :

$$\mathbf{n}_z \cdot \mathbf{n}_c = \frac{\nabla z \cdot \nabla Y_C}{|\nabla z| |\nabla Y_C|} \quad (5.2)$$

Comme rappelé dans l'article de Nguyen et al. (2010), dans une flamme de diffusion modérément courbée, les gradients de z et de Y_C sont alignés et $\mathbf{n}_z \cdot \mathbf{n}_c \pm 1$. Notons que dans une flamme laminaire de diffusion, le produit scalaire est nul aux alentours de la stœchiométrie, où le gradient de variable d'avancement devient ponctuellement nul. Pour des flammes faiblement stratifiées et principalement prémélangées soumises à de faibles étirements, le front de flamme est perpendiculaire aux iso-surfaces de fraction de mélange, ce qui entraîne $\mathbf{n}_z \cdot \mathbf{n}_c = 0$. Enfin, dans le cas d'une combustion partiellement prémélangée, on peut avoir $-1 < \mathbf{n}_z \cdot \mathbf{n}_c < 1$.

Pour tout instant t d'une simulation LES, les gradients de fraction de mélange et de variables d'avancement résolues peuvent être calculés. La figure 5.24 montre les normes de ces gradients pour deux maillages utilisés dans ce travail. On peut voir que les fortes amplitudes des variations spatiales de \tilde{Y}_C et de \tilde{Z}_B ne sont pas localisées au même endroit dans l'enceinte de la chambre de combustion. En effet, $|\nabla \tilde{Z}_B|$ est maximale entre l'injection du combustible et celle de l'air, zone pour laquelle on a vu qu'il n'y avait pas de combustion (d'où $|\nabla \tilde{Y}_C| = 0$ dans cette zone). Le mélange s'homogénéisant en aval de l'écoulement, les gradients de fraction de mélange s'estompent alors que la combustion prend place, ce qui se traduit par des variations plus importantes des gradients de variable d'avancement.

Pour déterminer dans quel mode de combustion on se trouve en un point de la zone de réaction, on définit l'indice de flamme GI_{Z_B} tel que :

$$GI_{Z_B} = \left. \frac{\nabla \tilde{Z}_B \cdot \nabla \tilde{Y}_C}{|\nabla \tilde{Z}_B| |\nabla \tilde{Y}_C|} \right|_{\tilde{\omega}_{Y_C} > \epsilon} \quad (5.3)$$

Cet indice est conditionné par un terme source de variable d'avancement supérieur à une constante ϵ (choisie ici égale à $\epsilon = 1s^{-1}$), ce qui garantit que l'on analyse uniquement la zone de réaction. Il est important de noter qu'avec cette définition, on peut introduire un biais pour les zones proches de la stœchiométrie, pour lesquelles on a vu que le gradient de variable d'avancement était nul si la combustion était pilotée par un phénomène de diffusion. Ce point est toutefois évité dans cette configuration, puisque toute la zone de réaction se situe hors des zones de stœchiométrie.

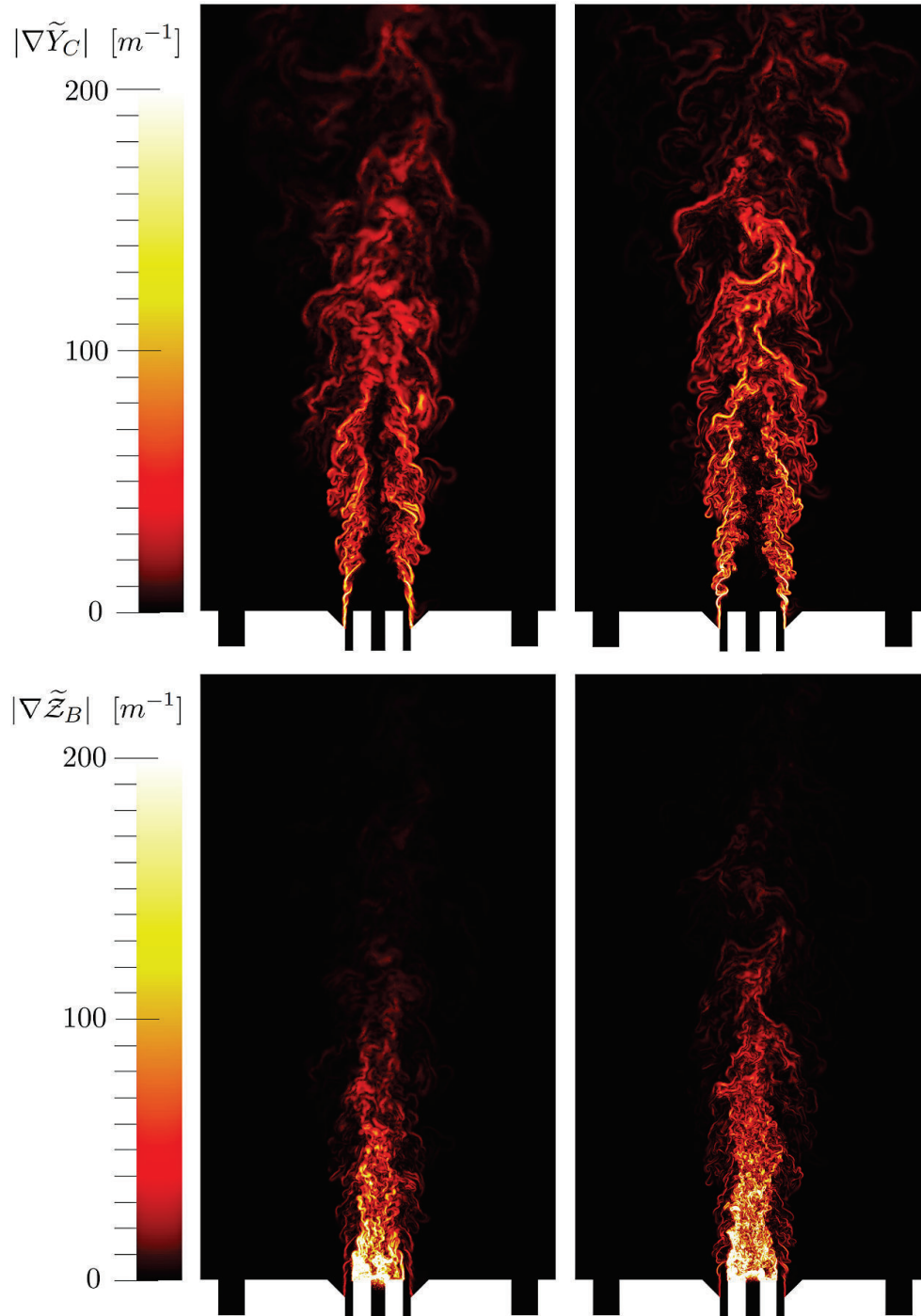


FIGURE 5.24 – Illustration d'instantanés de normes de $\nabla \tilde{Y}_C$ (haut) et de $\nabla \tilde{Z}_B$ (bas) sur un plan médian de la configuration pour le maillage moyen (gauche) et fin (droite)

Deux autres aspects doivent être discutés avant de poursuivre l'analyse. Tout d'abord, il faut souligner que l'évaluation de GI_{Z_B} est tributaire de la résolution du maillage : on néglige toute contribution de sous maille. Par conséquent, avec cet indice, on ne décrit le processus de combustion que sur les structures résolues. C'est la raison pour laquelle l'analyse des gradients et de GI_{Z_B} s'est faite sur le maillage moyen et sur le maillage fin (résolution doublée). Toutes les conclusions avancées sur le maillage moyen ont été retrouvées sur le maillage fin, ce qui garantit la viabilité de notre approche.

Ensuite, il est important de noter que $GI_{Z_B} = \pm 1$ définit une combustion en mode de diffusion entre l'air et le combustible. Cependant, la formulation de GI_{Z_B} ne prend pas en compte le fait que l'oxydant ou le combustible sont dilués par des produits de combustion, et peut donc conduire à une mauvaise interprétation de la structure de flamme. Nous considérerons donc, en plus de GI_{Z_B} , l'indice de gradients basé sur la fraction de mélange \tilde{Z} (qui contient une information sur le niveau de dilution, via l'équation 4.68.) :

$$GI_Z = \frac{\nabla \tilde{Z} \cdot \nabla \tilde{Y}_C}{|\nabla \tilde{Z}| |\nabla \tilde{Y}_C|} \Big|_{\tilde{\omega}_{Y_C} > \epsilon} \quad (5.4)$$

Pour quantifier les deux indices de flammes construits, on s'attache à décrire leur répartition en volume. En effet, les variations de volume de mailles dans nos maillages (non-structurés) impliquent que l'étude de GI_{Z_B} et GI_Z n'a pas de sens en terme de nombre de nœuds de calculs. Pour ce faire, nous introduisons les volumes adimensionnés ζ_{Z_B} et ζ_Z définis en pourcentage comme la somme des volumes des mailles conditionnés par la valeur des indices, normalisés par la somme des volumes de mailles contenues dans le volume caractérisé par $\tilde{\omega}_{Y_C} > \epsilon$:

$$\zeta_{Z_B}(GI_{Z_B}) = \frac{\sum V_{cell} |GI_{Z_B}|}{\sum V_{cell} |_{\tilde{\omega}_{Y_C} > \epsilon}} * 100 \quad \text{et} \quad \zeta_Z(GI_Z) = \frac{\sum V_{cell} |GI_Z|}{\sum V_{cell} |_{\tilde{\omega}_{Y_C} > \epsilon}} * 100 \quad (5.5)$$

La répartition des volumes de la zone de réaction en fonction des indices de flammes est donnée dans la figure 5.25. En premier lieu, il est intéressant de voir que les deux indices présentent des résultats fort semblables : la distribution présente une forme bi-modale dont les pics sont centrés sur les valeurs -1 et $+1$ des indices. Ces répartitions montrent que, dans cette configuration, le processus de combustion a principalement lieu sous la forme de flamme de diffusion. Une analyse quantitative montre que plus de 55% du volume de la zone réaction est caractérisé par des angles entre les gradients de fraction de mélange et de variable d'avancement compris entre $[-\frac{\pi}{6}; \frac{\pi}{6}]$ ou $[-\frac{5\pi}{6}; \frac{5\pi}{6}]$ radians.

Globalement, cette estimation permet de voir que l'on brûle majoritairement en mode de diffusion. Toutefois, une contribution non négligeable de la réaction

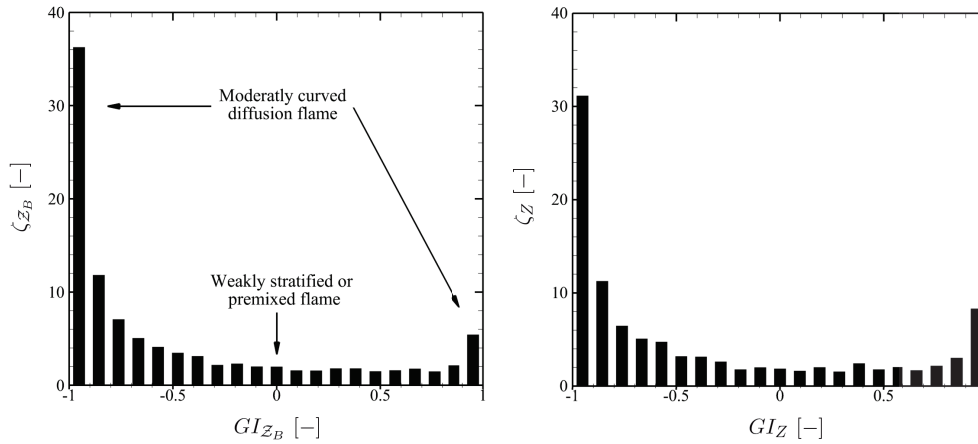


FIGURE 5.25 – Pourcentage de volume occupé par les mailles conditionnées par l'indice de produit scalaire des gradients. gauche : GI_{Z_B} ; droite : GI_Z

a lieu pour des valeurs où GI_{Z_B} (et GI_Z) n'est pas égal à 1 ou -1 , ce qui indique l'existence d'une variété importante de structures de flammes. Par là-même, la capacité du modèle NADFPV à reproduire des structures de flammes réalistes est validée dans le cas d'une configuration opérant en régime de combustion MILD.

5.8 Conclusion

Dans ce chapitre, des simulations aux grandes échelles de la turbulence d'une configuration quasi-adiabatique opérées en régime de combustion MILD ont été conduites. Des différences fondamentales de comportement entre les modèles LFM, FPV et NADFPV ont été mises en avant sur :

- la stabilisation de la combustion : la possibilité d'états non-brûlés s'est avérée essentielle à une description de la combustion ;
- la distribution des grandeurs thermochimiques (températures et espèces).

De plus, la description de la transition entre les gaz frais et les gaz brûlés est, dans cette configuration, de première importance. L'ajout d'une dimension relative à la dilution des réactifs dans la table thermochimique améliore grandement la prédiction des champs scalaires lorsqu'on compare les résultats des simulations aux données expérimentales. En effet, les résultats obtenus avec le modèle NADFPV s'avèrent très satisfaisants, notamment sur la prédiction du monoxyde de carbone en comparaison avec les autres approches. Une sous-estimation de la température avec le modèle NADFPV a néanmoins été observée sur la première station de mesure. Différentes pistes d'analyse ont été explorées pour expliquer ces disparités. En outre, l'apport de la LES, en comparaison avec

des méthodes RANS, pour la simulation de cette configuration a été clairement mis en avant.

Une analyse des simulations a permis d'établir qu'à proximité du système d'injection, aucun phénomène de combustion n'a lieu. À la place se produit un prémélange partiel des réactifs frais. Plus en aval de l'écoulement, une compétition entre les processus de combustion et de dilution est observée, avant que l'état stationnaire et l'homogénéité du mélange soient établis. De plus, on montre que les trajectoires chimiques sont grandement influencées par la dilution des réactifs, ce qui corrobore les résultats obtenus dans le chapitre 3 sur l'analyse des flammelettes laminaires. Cet effet a un impact majeur en raison du caractère fortement hors-équilibre de la cinétique chimique dans la zone de réaction.

Enfin, en introduisant des indices basés sur l'angle entre les gradients de fraction de mélange et de variable d'avancement, une analyse de la structure de flamme locale a été effectuée. Il est montré qu'en volume, le processus de combustion a principalement lieu dans un mode de diffusion, bien qu'une grande variété de structures de flamme puissent coexister.

On estime que la prise en compte de taux de réaction issus de calculs instationnaires et une modélisation plus avancée des interactions chimie-turbulence pourraient sensiblement améliorer les résultats. Néanmoins, ces résultats montrent que l'approche développée et les hypothèses de modélisation formulées, dans le cadre de cette thèse, sont valables.

Chapitre 6

Application à une configuration à parois refroidies

Ce chapitre présente les résultats obtenus par simulations aux grandes échelles d'une chambre de combustion de laboratoire non-adiabatique et opérant en régime de combustion sans flamme. Ces simulations se font pour deux conditions opératoires différentes, ce qui permet d'étudier la robustesse et la flexibilité des approches développées. Des comparaisons avec les données expérimentales sont faites pour le modèle FPV classique et pour les approches NADFPV et DFPV développées plus tôt dans ce manuscrit. Le rôle crucial des pertes thermiques dans cette configuration est mis en avant. Les résultats obtenus avec les approches NADFPV et DFPV sont satisfaisants, notamment sur la prédiction des champs d'espèces majoritaires. Des disparités apparaissent cependant sur les prédictions de température et de monoxyde de carbone. Une analyse des conditions d'injection et de l'influence du rayonnement dans cette configuration est menée pour discuter ces différences. Ensuite, une analyse des simulations est effectuée. On montre que la dilution à enthalpie constante est ici de peu d'importance, et que la combustion se produit principalement dans un mode de diffusion.

6.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, on a vérifié dans une configuration adiabatique la validité de la tabulation des grandeurs thermo-chimiques avec une dimension spécifique liée à la dilution des réactifs. Néanmoins, dans les configurations industrielles, les pertes thermiques jouent un rôle essentiel sur la stabilité de la combustion et sur la distribution des espèces chimiques.

Les deux modèles développés dans cette thèse, NADFPV et DFPV, qui sont de complexité différente, prennent en compte une dimension spécifique aux pertes thermiques. Pour valider ces approches et mesurer les différences

qui peuvent apparaître entre les modèles, on propose dans ce chapitre une campagne de simulations LES d'une configuration non-adiabatique opérant en régime de combustion sans flamme étudiée expérimentalement par [Verissimo et al. \(2011\)](#).

Après avoir présenté cette configuration et les articles y afférents, nous nous intéressons à la topologie de l'écoulement et à ses implications quant au mélange des réactifs et à la dilution. Puis, nous comparons les résultats obtenus pour trois modèles de combustion faisant intervenir un nombre croissant de dimensions dans la tabulation :

- l'approche FPV de [Pierce and Moin \(2004\)](#) (table de dimension 3) ;
- le modèle DFPV (table de dimension 4) ;
- le modèle NADPFV (table de dimension 5).

L'objectif principal de ces simulations est de vérifier la validité des approches développées dans le cadre de cette thèse. De plus, l'intérêt de la prise en compte d'une dimension spécifique à la dilution à enthalpie constante doit être quantifié.

6.2 Configuration expérimentale

La configuration choisie pour valider nos approches a été développée dans le cadre de la thèse de [Verissimo et al. \(2012\)](#). La géométrie de la configuration étudiée est donnée en Fig. 6.1. C'est une chambre cylindrique de 340 mm de longueur et de 100 mm de diamètre. En sortie, un convergent de 150 mm de 15° est utilisé. Le système d'injection est composé d'une entrée centrale d'air préchauffé à 673 K de 10 mm de diamètre et de 16 injecteurs de méthane (pur à 99,5%) de 2 mm de diamètre, tous disposés régulièrement à 15 mm de l'entrée d'air.

Dans l'optique d'étudier la sensibilité des régimes de combustion obtenus en fonction de différents aspects, de nombreuses conditions opératoires ont été utilisées pour ce système, notamment en jouant sur les vitesses d'injection des deux réactifs ([Verissimo et al. \(2010a\)](#)), ou encore sur la température de l'air ([Verissimo et al. \(2010b\)](#)). Ici, nous avons choisi de simuler les conditions opératoires reportées dans l'article de [Verissimo et al. \(2011\)](#), puisqu'elles présentent la plus grande quantité d'informations dans l'enceinte-même de la chambre. Ces conditions sont données dans le tableau 6.1.

Le premier set de conditions opératoires, appelé "run 4", dans un souci de cohérence avec l'article expérimental, présente selon les auteurs les caractéristiques d'une combustion classique très pauvre. Ils décrivent en effet une zone de réaction localisée (par chimiluminescence OH*) et la visibilité à l'œil nu de la flamme. Pour le deuxième cas, ci-après "run 2", les données expérimentales semblent indiquer que la combustion se produit en régime de combustion sans

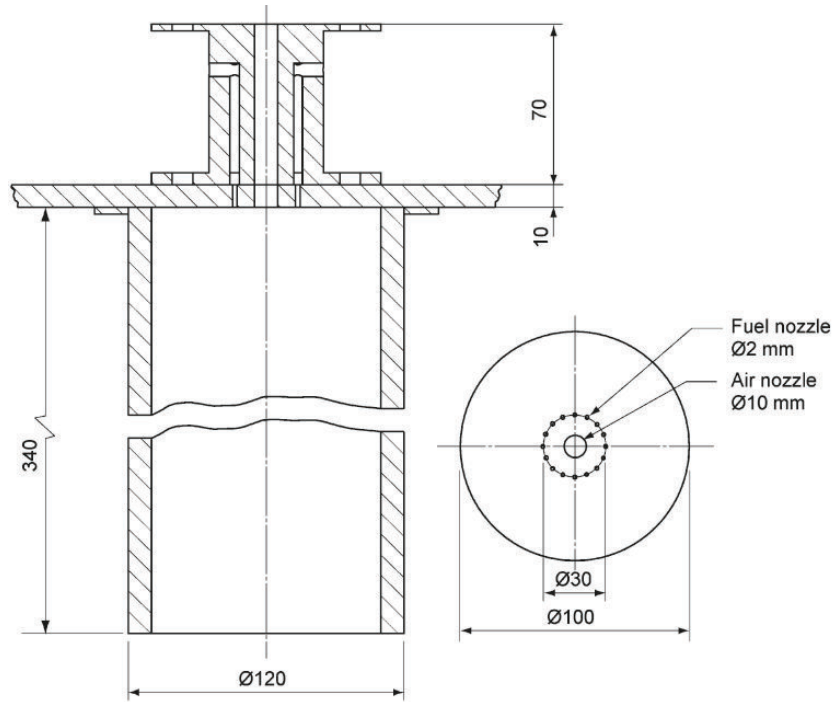


FIGURE 6.1 – Schéma de la configuration expérimentale (Verissimo et al. (2011)).

run	ϕ_G	U_{air} [m/s]	U_{fuel} [m/s]	Re_{air}	Re_{fuel}	τ_G^{res} [s]
4	0.58	143	6,2	22140	696	0,23
2	0.77	113,2	6,2	17526	696	0,29

TABLE 6.1 – Richesse globale ϕ_G , vitesse d'injection de l'air U_{air} et du combustible U_{fuel} , nombres de Reynolds relatifs aux injections Re_{air} et Re_{fuel} et temps de résidence global τ_G^{res} évalué comme le volume de la chambre de combustion sur le débit des réactifs.

flamme : la zone de réaction est distribuée et aucune flamme n'est visible à l'œil nu. Pour les deux conditions opératoires, l'article rapporte des émissions de CO et de NO_x très faibles. De plus, ils montrent qu'à mesure que le taux d'aération augmente (ou que la richesse globale diminue) la combustion dévie graduellement du régime de combustion MILD. Les auteurs de cette expérience analysent aussi les répartitions de température et d'espèces (O_2 , CO_2 , CO, NO_x et hydrocarbures imbrûlés HC), qui serviront d'ailleurs de base de comparaison avec les simulations.

Comme pour la configuration du chapitre précédent, les auteurs estiment des incertitudes de l'ordre de 5% sur la température et de l'ordre de 10% pour les espèces. Les moyens de mesure sont strictement identiques à ceux de la configuration de Castela et al.

Bien que la configuration de Verissimo et al. (2011) soit considérée bien

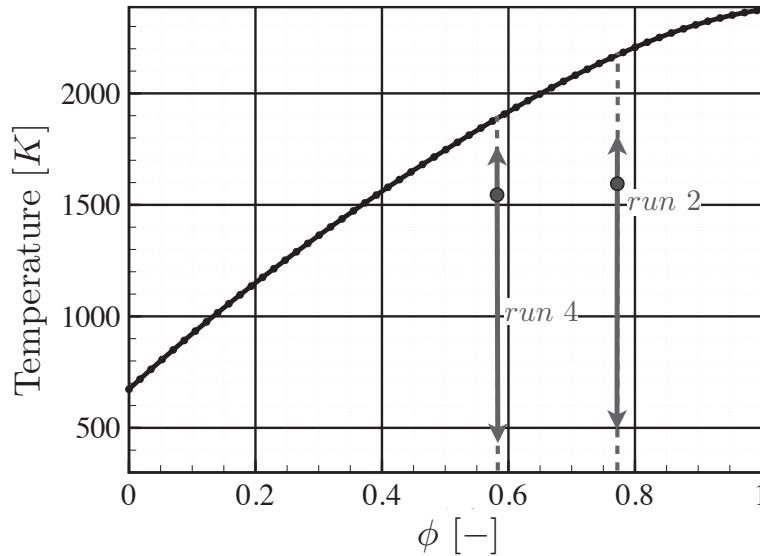


FIGURE 6.2 – Température calculée à l'équilibre thermochimique en fonction de la richesse ϕ . Les lignes verticales en tirets indiquent la localisation de la richesse globale des conditions opératoires considérées. Les flèches représentent la gamme de températures mesurées dans l'expérience pour la richesse globale correspondante, les symboles circulaires indiquant la température moyenne en sortie de chambre.

isolée par les auteurs, un calcul d'équilibre de température en fonction de la richesse du mélange permet d'affirmer que des pertes thermiques importantes peuvent avoir lieu (Fig. 6.2). En effet, en comparant les températures d'équilibre pour les richesses globales des deux conditions opératoires aux températures maximales rapportées dans l'expérience, on peut s'apercevoir qu'au minimum, la température de fin de combustion est diminuée de 150 K pour le run 4 et de 350 K pour le run 2. Cette comparaison, au demeurant très qualitative et simple, prend son sens en régime de combustion MILD, pour lequel une homogénéité du mélange est attendue. Cette configuration semble donc de premier choix pour valider nos approches.

La publication de l'article de [Verissimo et al. \(2011\)](#) est récente. À notre connaissance, elle n'a à ce jour été simulée qu'une seule fois avec une approche RANS en utilisant les modèles EDC et T-PDF ([Verissimo et al. \(2012\)](#)). Dans cette étude, la turbulence est approchée par le modèle $k - \epsilon$ réalisable. Un schéma cinétique squelettique ainsi qu'un schéma global une étape sont utilisés et comparés. Mis en parallèle avec les données expérimentales, les résultats des simulations sont satisfaisants lorsqu'une cinétique chimique multi-étapes est considérée. Cependant, les auteurs rapportent des différences significatives avec les mesures dans le premier tiers de la configuration. De plus, les prédictions de CO ne sont, elles, pas satisfaisantes, en particulier pour le modèle EDC.

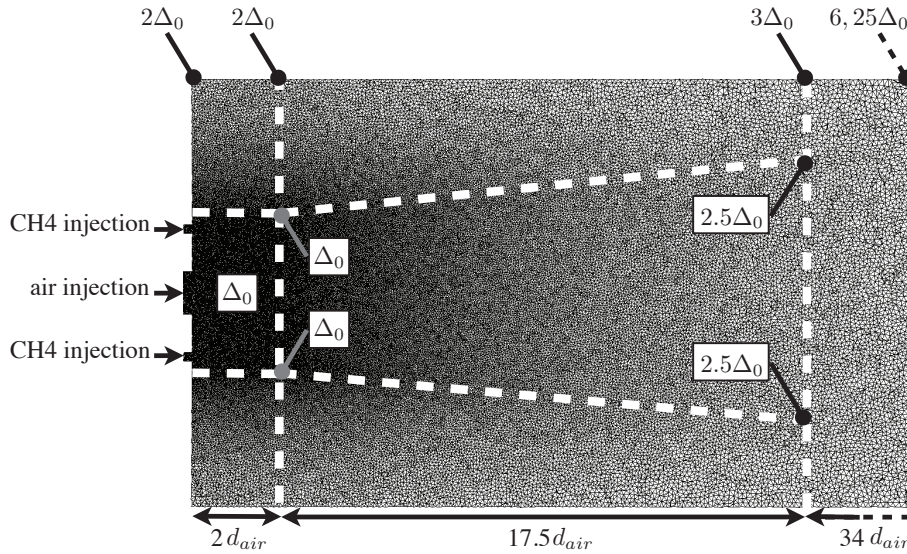


FIGURE 6.3 – Représentation du maillage utilisé et de la répartition des points sur un plan médian. Δ_0 est la taille de référence minimale de cellules imposée dans le maillage. La figure est tirée du maillage fin.

6.3 Configuration numérique

Le solveur académique YALES2 est à nouveau utilisé pour les simulations, et les schémas numériques employés sont identiques à ceux du chapitre précédent (schéma centré d'ordre 4 en espace et schéma d'ordre 4 de type Runge-Kutta en temps). Au vu des faibles températures attendues dans les configurations, on a décidé de négliger les effets de rayonnement.

6.3.1 Maillage

Une représentation du maillage utilisé et de la distribution des points est donnée Fig. 6.3. Au vu du nombre de Reynolds associé aux injecteurs de méthane, nous avons choisi de ne mailler qu'une petite portion des canaux d'injection. 80 mm de canal ont été maillés pour l'injecteur d'air, en se basant sur la figure 6.1.

Deux maillages de résolutions différentes ont été construits pour accélérer la convergence des calculs. Le tableau 6.2 présente le nombre de points utilisés pour chaque maillage, ainsi que le nombre de points correspondant le long d'un diamètre de l'injecteur d'air. Comme pour la configuration adiabatique étudiée chapitre 5, les temps de résidence extrêmement importants limitent fortement la taille de maille minimale que l'on peut se permettre. Pour autant, le caractère fortement dilué et homogène de la combustion attendu dans cette chambre permet de se satisfaire des résolutions des maillages construits.

Pour la comparaison des prédictions avec les données expérimentales et l'ana-

Maillage	Δ_0 [mm]	Nb. de points	Nb. d'éléments	n_{air}
Grossier	0,4	2,58M	13,7M	~ 25
Fin	0,22	8,45M	48,9M	~ 45

TABLE 6.2 – Ordres de grandeur des maillages utilisés pour la configuration de *Verissimo et al.*.

lyse des résultats LES, les maillages *fins* ont été systématiquement employés.

6.3.2 Conditions limites

Dans ces simulations, l'impact de la prescription des conditions aux limites est primordiale et, à plus forte raison, parce que les pertes thermiques y sont significatives. Des murs glissants ont été utilisés pour les injecteurs de méthane, et un profil de vitesse parabolique est appliqué en entrée. Les parois de l'injecteur central d'air ont, quant à eux, été modélisés par des murs non-glissants. Pour cette entrée d'air, on impose un profil turbulent moyen, entièrement obtenu par une simulation LES annexe de canal, auquel on a superposé des fluctuations de vitesse issues d'une turbulence homogène isotrope ($I_{inj} = 5\%$ pour le run 4, et $I_{inj} = 5\%$ ou 1% pour le run 2). Une analyse de l'influence de cette injection sera menée plus loin dans ce chapitre.

Une attention particulière a dû être portée sur les conditions aux limites imposées aux parois de l'enceinte. Avant tout, il est essentiel de signaler qu'aucune donnée expérimentale n'est disponible sur les transferts thermiques aux parois dans cette expérience. En l'absence de ces données, l'utilisation de conditions aux limites isothermes semble être un choix naturel. Cependant, ces dernières imposent de résoudre une méthode de Newton relaxée pour retrouver l'enthalpie correspondante, puis le paramètre de perte thermique (β pour NADFPV et α pour DFPV) dans la table thermochimique. Cette méthode s'est avérée coûteuse et délicate à mettre en œuvre, notamment avec l'utilisation de tables de dimension 5. À la place, nous avons donc choisi d'imposer une enthalpie constante aux parois. Ce choix est motivé par la forte homogénéité apparente du mélange dans la chambre de combustion et par le fait que les zones avoisinant les parois sont composées de gaz brûlés. L'enthalpie imposée correspond à une température de 1200 K pour la richesse globale des deux conditions opératoires.

6.3.3 Temps physiques simulés et moyennes

Pour atteindre un régime établi avant d'évaluer les moyennes temporelles, environ 500 ms de temps physique est calculé sur le maillage grossier, ce qui correspond approximativement à un temps de résidence global τ_G^{res} pour les deux cas de figure considérés. Puis, les solutions ont été interpolées sur le maillage fin, pour lequel on a cette fois simulé 200 ms de temps physique. Les moyennes temporelles ont été accumulées sur environ 50 ms. Pour tirer parti de la sy-

métrie de la configuration, les moyennes temporelles obtenues sont moyennées radialement pour les espèces et la température, suivant les 16 plans médians qui correspondent aux plans de symétrie de la configuration.

Environ 150.000 heures de calculs ont été nécessaires par calculs sur 512 coeurs sur le cluster SGI Altix ICE 8200 "Jade" du CINES (Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur).

6.3.4 Tables thermochimiques de couplage

Puisque le modèle NADFPV se base sur une tabulation de dimension 5, des problèmes de mémoire peuvent survenir si la discrétisation des espaces de tabulation est très fine. Pour conserver une bonne précision dans l'estimation des termes sources, les tables thermochimiques des modèles NADFPV ont été discrétisées en $151 * 15 * 121 * 11 * 11$ points dans les directions $\tilde{Z} * S_Z * \bar{C} * \bar{\alpha} * \bar{\beta}$, ce qui correspond à des tables d'environ 800 Mo. Un maillage régulier est utilisé pour la fraction de mélange, la variable d'avancement normalisée, le paramètre de dilution et le paramètre de pertes thermiques, tandis qu'une série géométrique est employée pour la ségrégation de la fraction de mélange. Pour maintenir une cohérence entre l'analyse des différents modèles, les tables utilisées pour les modèles DFPV et FPV conservent les mêmes discrétisations.

La génération des trois tables, pour chaque condition opératoire simulée, a pris approximativement cinq heures sur 24 processeurs.

6.4 Topologie de l'écoulement

Avant d'examiner les résultats des simulations LES sur la distribution des espèces chimiques et de la température, il est important d'étudier la nature de l'écoulement dans cette configuration.

La figure 6.4 montre les champs de vitesse axiale obtenus pour le run 4. Signalons dès à présent que les conclusions et observations abordées ici sont identiques dans le run 2. La quantité de mouvement très importante du jet central d'air, qui pénètre la chambre sur une large distance, est suffisante pour générer un écoulement inverse important sur des coordonnées radiales élevées. Ces zones de recirculation véhiculent des gaz brûlés vers le système d'injection, de sorte que la combustion aura *a priori* lieu pour des concentrations en oxygène relativement faibles. Il est utile de noter que les vitesses estimées dans les zones de recirculation sont nettement moins importantes que sur l'axe de symétrie de la configuration. De plus, les vitesses et ses fluctuations sont quasi-nulles sur les coins bas de la chambre de combustion, ce qui s'explique par le fort confinement du système. Cet effet a donc tendance à laminariser l'écoulement dans les régions radiales à proximité de l'injection des réactifs (on rappelle que les vitesses d'injection du méthane sont de $6,2ms^{-1}$). En terme de simulation, les zones de faibles vitesses posent de lourds problèmes de convergence puisqu'il est nécessaire de simuler un temps physique très important. Dans le

cas présent, cela est d'autant plus problématique que les jets de méthane sont injectés directement dans ces régions.

Pour aller plus loin dans la description de la topologie de l'écoulement, on s'intéresse aux structures dynamiques de l'écoulement associées au jet d'air, qui est de vitesse élevée par rapport aux vitesses d'injection du méthane (d'un facteur 18, 25 pour le run 2 et 23 pour le run 4). La figure 6.5 montre un iso-contour de critère Q coloré par la vorticité axiale normalisée. On observe une déstructuration rapide de l'écoulement à la sortie de l'injection d'air, mais aucune structure dynamique forte n'est visible aux abords des entrées de combustible. On peut donc scinder en deux zones distinctes la dynamique de l'écoulement dans la région proche du système d'injection : une partie centrale fortement turbulente, entourée d'une large zone de turbulence moins intense.

En raison de cette localisation des structures chaotiques, le front de flamme est affecté de manière différente par la turbulence que l'on soit dans la zone centrale ou dans les zones de recirculation, comme on peut le voir sur la figure 6.6. Dans la zone centrale, l'écoulement turbulent plisse le front de flamme et favorise le mélange. Dans les zones alentour, par contre, l'écoulement est très peu, voire pas, turbulent, et le front de flamme est peu affecté par la dynamique de l'écoulement : il se dessine en effet dans ces iso-contours de températures très lisses, ne présentant pas de plissements particuliers.

6.5 Répartitions instantanées de grandeurs thermo-chimiques

Les distributions de champs de température obtenus avec le modèle NADPFV pour le run 4 et 2 sont illustrées figure 6.7. Lorsque l'on considère les champs instationnaires, les résultats obtenus avec le modèle DFPV n'ont pas donné de topologie différente, limitant donc pour l'instant l'intérêt d'une comparaison entre ces deux approches.

Les champs de températures prédits pour les deux conditions opératoires présentent des similarités de structures :

- Pour les deux cas, la zone de recirculation de vitesse très faible, localisée approximativement pour $x \in [0; 50 \text{ mm}]$ et $r \in [20; 50 \text{ mm}]$ (x étant la coordonnée axiale et r la coordonnée radiale), présente des températures de gaz brûlés plus faibles qu'en sortie de chambre. Cela est dû aux pertes thermiques imposées aux parois, couplées aux temps de résidence très importants que l'on trouve dans ces régions ;
- Les températures maximales atteintes sont très inférieures aux températures obtenues en négligeant les pertes thermiques ($\sim 2400 \text{ K}$), ce qui souligne l'importance majeure des pertes thermiques dans cette configuration.

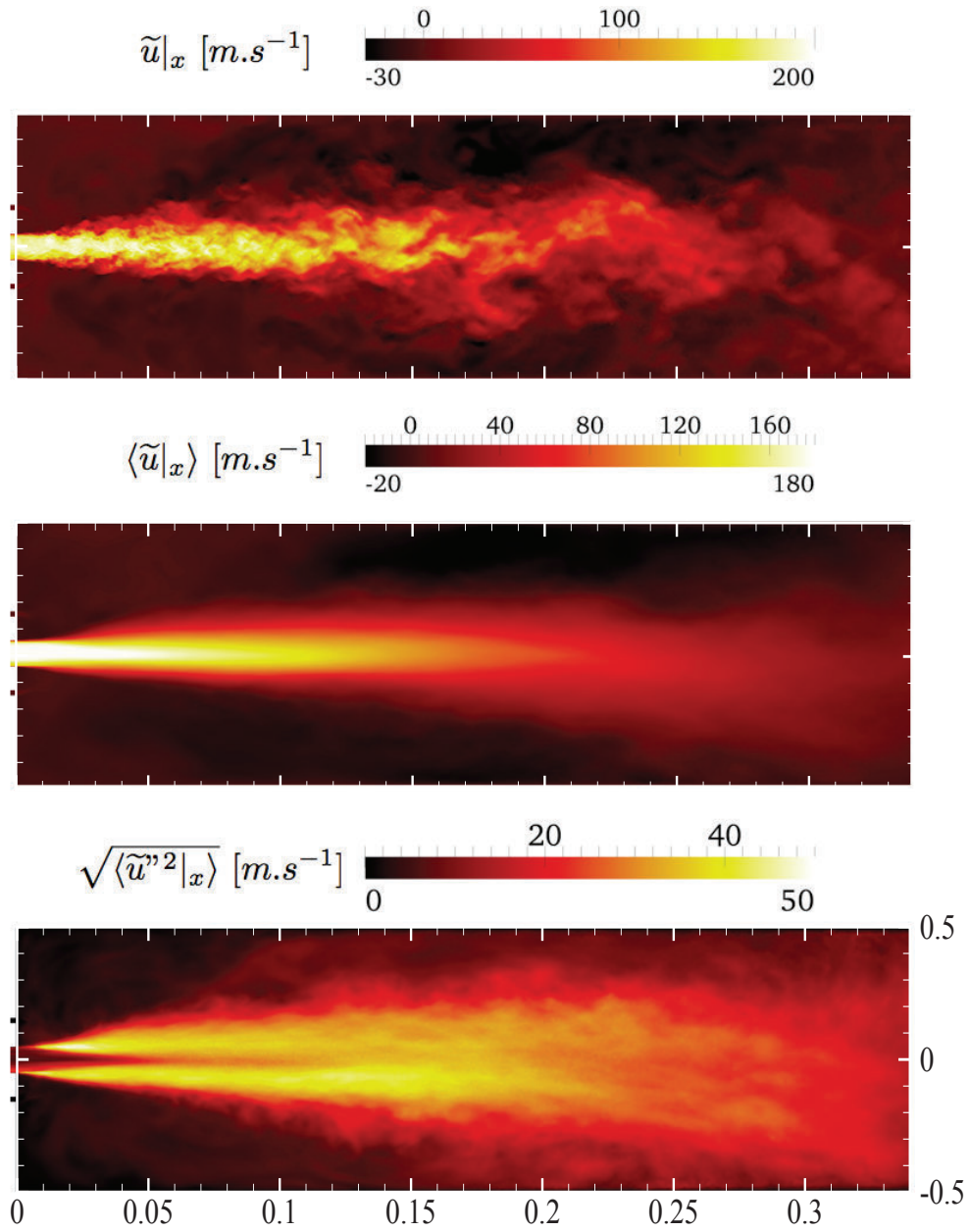


FIGURE 6.4 – haut : champ de vitesse axiale instantané; milieu : champ de vitesse axiale moyenne; bas : RMS de vitesse axiale moyenne. Les résultats présentés sont issus du run 4.

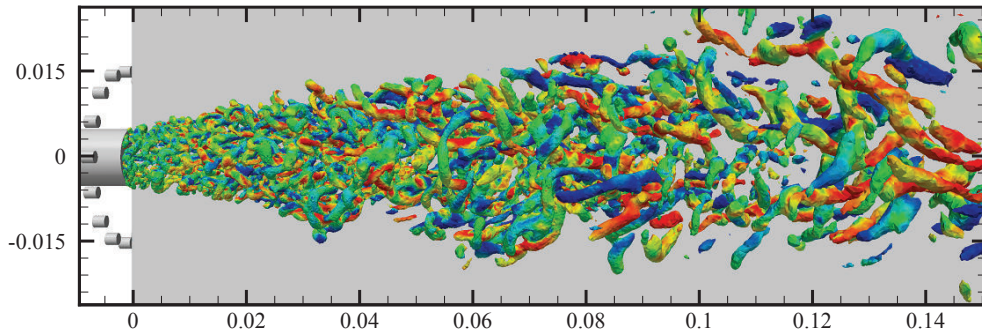


FIGURE 6.5 – Iso-contour du critère $Q = 0.5U_a \bar{v} r^2 / d_{air}$ coloré par la vorticité axiale normalisée ($\frac{\omega_x}{|\omega|}$) pour le run 4.

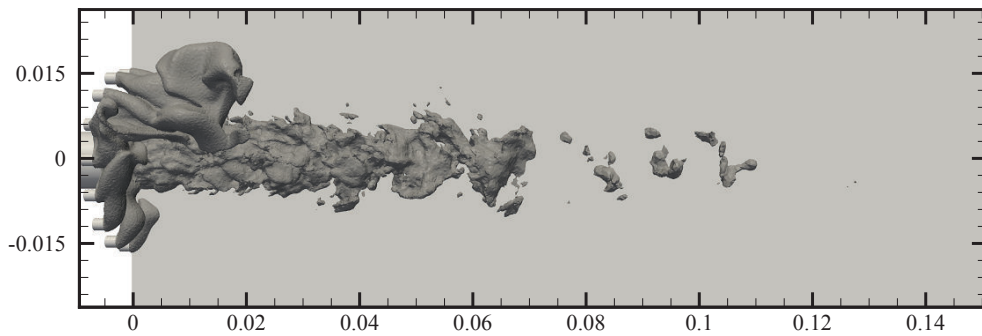


FIGURE 6.6 – Iso-contour de température $T = (T^{max} + T^{min})/2 = 1200$ K pour le run 4.

Outre les points communs pouvant être mis en avant, des divergences notables sont observées en moyenne. Effectivement, pour le run 4, on identifie une zone située à l'interface entre le jet d'air et les gaz brûlés mélangés avec le méthane, pour laquelle la température moyenne est élevée (~ 1800 K). Pour le run 2, la distribution de température semble plus homogène en moyenne, bien que sur un instantané elle présente des températures élevées. Cette caractéristique se retrouve dans l'expérience. Enfin, d'un point de vue plus global, il est important de noter que les températures obtenues pour le run 2 sont sensiblement supérieures à celles du run 4, ce qui est imputable aux richesses globales différentes des deux conditions.

Pour préciser ces contrastes, on s'intéresse à la répartition spatiale, en volume, des termes sources de variables d'avancement. À nouveau, des différences apparaissent entre les deux conditions opératoires (Fig. 6.8). Pour le run 4 ($\phi_G = 0,58$), la zone de réaction est principalement localisée le long de l'axe de symétrie de la configuration, dans une région spatiale définie par $x \in [0; 130$ mm] et $r \in [0; 17$ mm]. Au contraire, pour le run 2, le terme source est étendu sur un volume plus important, caractérisé par $x \in [0; 160$ mm] et $r \in [0; 30$ mm]. Cet écart de répartition de la zone de réaction s'explique par le fait que, pour une richesse faible, les gaz brûlés chauds recirculant ont de hauts niveaux de O_2 qui, une fois mélangés avec le méthane, favorisent la création d'un mélange propice à la combustion. Pour le cas d'une plus grande richesse, les gaz brûlés ont une teneur en oxygène plus faible, et la dilution des réactifs inhibe la réaction de sorte qu'elle se produit sur un plus large volume et avec moins d'intensité.

Ces comparaisons, quoique très qualitatives, permettent de faire le lien avec les conclusions de l'article expérimental, qui estiment que le run 4 est assimilable à un régime de combustion conventionnelle pauvre, tandis que le run 2 est proche d'un régime de combustion MILD.

6.6 Comparaison avec les données expérimentales

À présent, on compare les résultats des simulations LES avec les données expérimentales. Les calculs avec le modèle FPV (formulation adiabatique), sont aussi rapportés pour pouvoir mesurer l'importance des pertes thermiques.

6.6.1 Run 4 : $\phi_G = 0,58$

Les profils radiaux de la température et des fractions molaires de O_2 , CO_2 et CO issus des simulations du run 4 sont comparés avec les données expérimentales des figures 6.9 à 6.12.

Concernant les prédictions de température (Fig. 6.9), les résultats sont en bon accord avec les mesures pour les modèles NADFPV et DFPV. Le modèle FPV surestime globalement la température de 400 K dans la chambre de combustion. Cela montre l'importance capitale de la prise en compte d'une di-

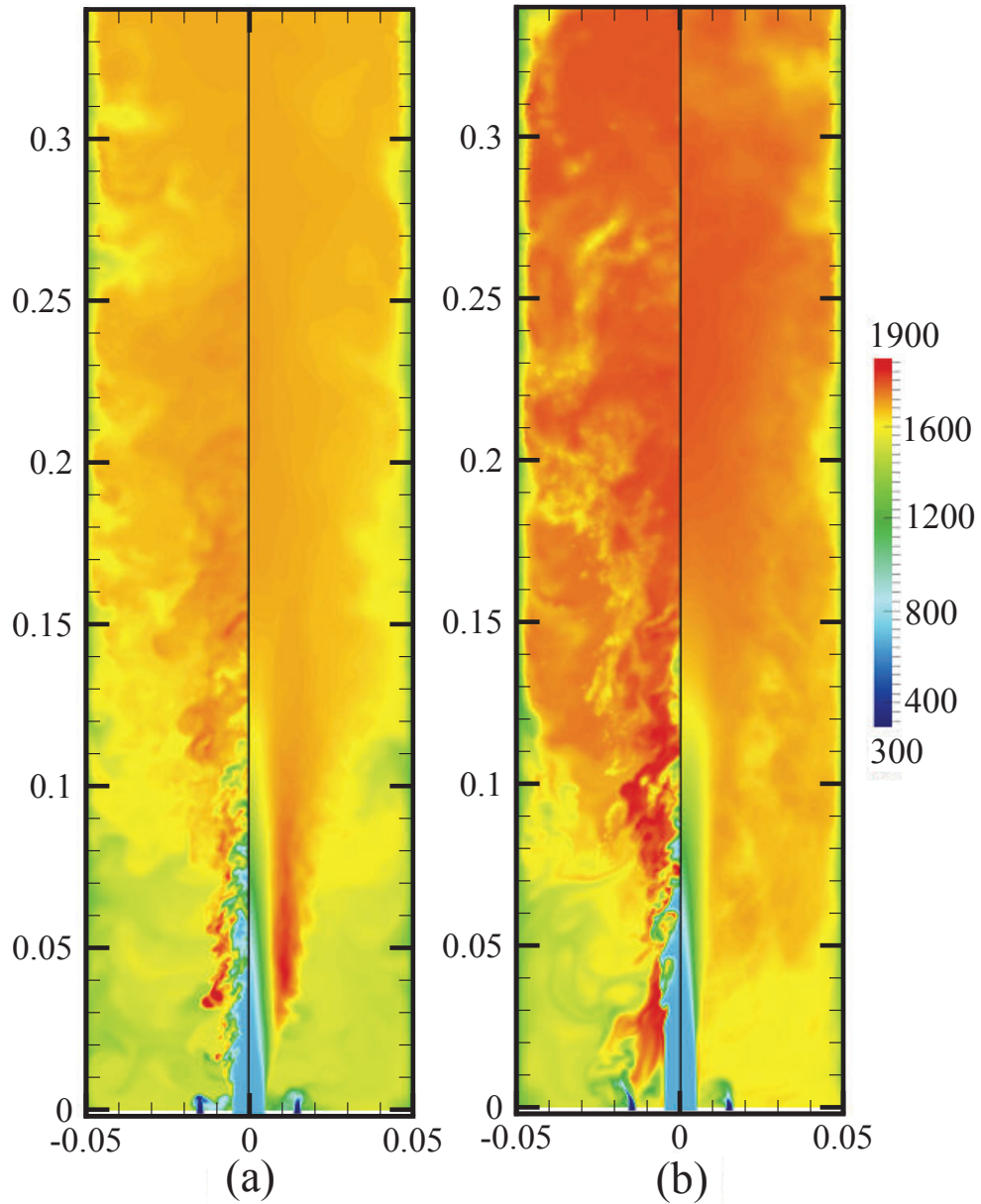


FIGURE 6.7 – Champs instantanés et moyens de température issus de calculs avec le modèle NADPFV. Le convergent de sortie et le système d'injection ne sont pas représentés pour mieux se focaliser sur la zone d'intérêt. (a) : run 4 ; (b) : run 2.

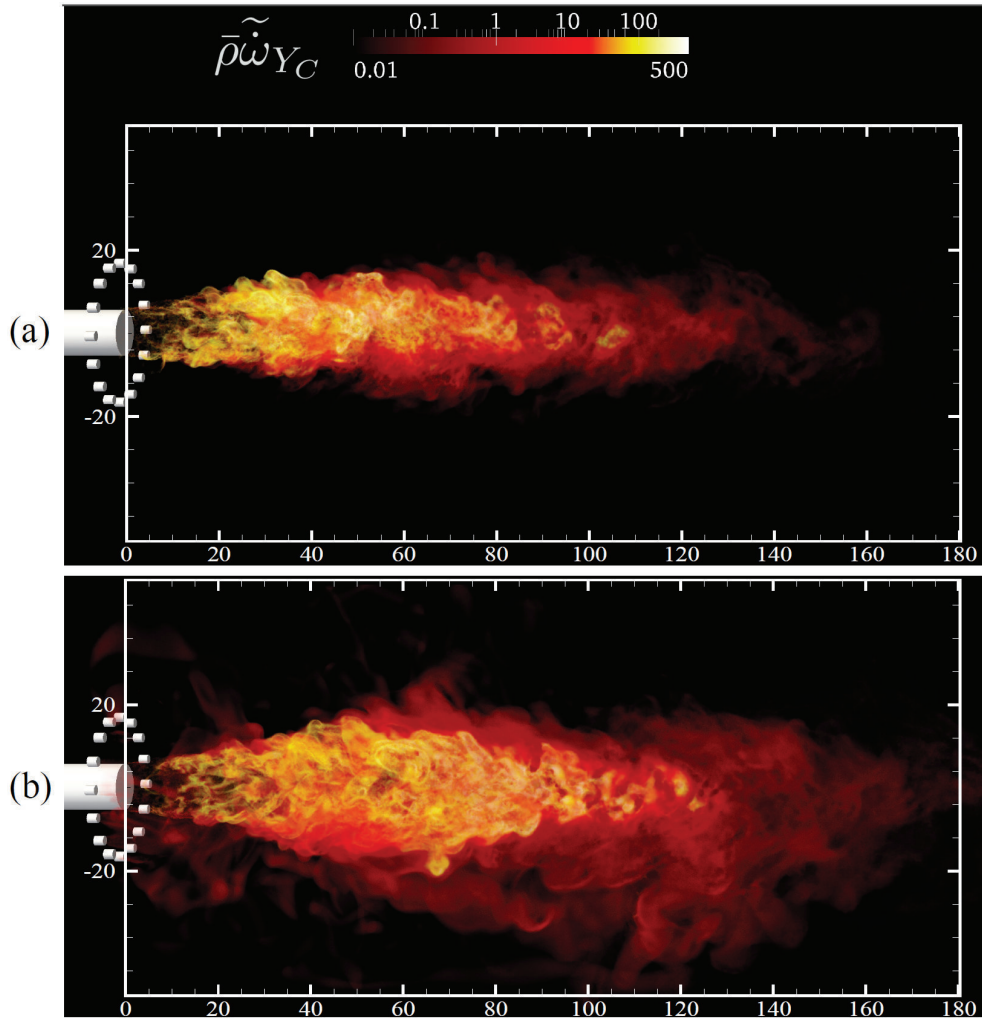


FIGURE 6.8 – Rendu en volume de la répartition du terme source $\bar{\rho}\tilde{\omega}_{Y_C}$ de la variable d'avancement avec le modèle NADPFV. (a) : run 4 ; (b) : run 2.

mension relative aux pertes thermiques dans les méthodes de tabulation pour cette configuration.

Malgré les améliorations apportées par les modèles développés dans cette thèse, on peut remarquer une surestimation de la température de l'ordre de 100 K pour $r > 5$ mm. Cette différence peut être liée à la négligence des effets de rayonnement et à une modélisation trop limitée des pertes thermiques aux parois. De plus, le long de l'axe de symétrie de la chambre ($r = 0$ mm), la température est sous-estimée pour les trois modèles entre 45 mm et 113 mm. Enfin, il est important de noter qu'à la première station de mesure, les températures prédites par le modèle DFPV sont moins satisfaisantes que pour la formulation NADFPV. Cette divergence de résultats peut être imputable à une caractérisation plus fine de la cinétique chimique avec le modèle NADFPV, notamment parce que cette zone présente des variations de fraction de mélange significatives à cause de l'injection proche de méthane. Cependant, une conclusion franche est difficilement formulable à cette distance, étant donné que l'obtention de statistiques bien convergées dans cette zone du calcul est très difficile à obtenir en raison des vitesses très faibles.

Les prédictions de O_2 et de CO_2 associées sont fournies dans les figures 6.10 et 6.11. Contrairement à la température, les prédictions de ces espèces majeures ne sont pas fortement différentes d'un modèle à l'autre. Cela s'explique par le fait qu'elles sont moins sensibles aux pertes thermiques que les espèces minoritaires ou que la température. Un très bon accord est ainsi obtenu avec les mesures de l'expérience. Des disparités apparaissent néanmoins le long de l'axe central, pour $x \in [45 \text{ mm} ; 113 \text{ mm}]$ et $r \in [0 \text{ mm} ; 5 \text{ mm}]$, où la fraction molaire sèche de O_2 est sous-estimée et celle de CO_2 est surestimée. Étrangement, c'est dans cette zone que la température est sous-estimée par nos modèles, alors que le contraire aurait été attendu.

Concernant les prédictions de monoxyde de carbone CO , les trois approches prédisent des évolutions foncièrement différentes (Fig. 6.12). Dans les mesures expérimentales, le CO s'étend radialement de manière significative dans les premières stations de mesure (de 11 mm à 147 mm). Le modèle NADFPV est le seul à prédire le bon ordre de grandeur de monoxyde de carbone pour chaque coupe, mais les prédictions ne sont clairement pas satisfaisantes sur la coordonnée r dans les cinq premières coupes radiales. Pour le monoxyde de carbone, il est intéressant de voir que prendre en compte des trajectoires chimiques qui évoluent dans 4 dimensions (NADFPV) permet d'en améliorer l'estimation par rapport à des trajectoires évoluant en trois dimensions (DFPV).

6.6.2 Run 2 : $\phi_G = 0,77$

Les profils radiaux de température et des fractions molaires de O_2 , CO_2 et CO issus des simulations du run 2 sont comparés avec les données expérimentales des figures 6.13 à 6.16.

Les prédictions de température sont extrêmement semblables entre les mo-

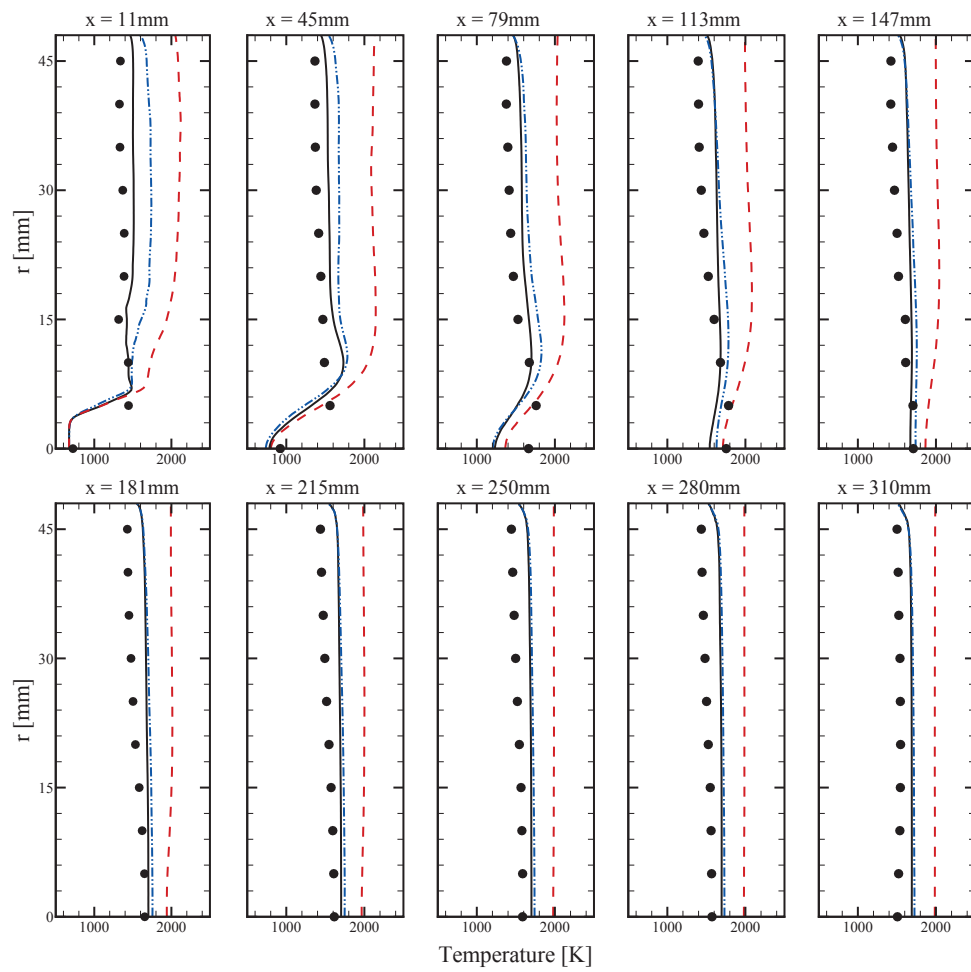


FIGURE 6.9 – Moyennes de températures filtrées au sens de Favre pour différentes coupes radiales pour le run 4. symboles : données expérimentales ; ligne continue : NADFPV ; ligne en tiret-point-point : DFPV ; ligne en tirets : FPV.

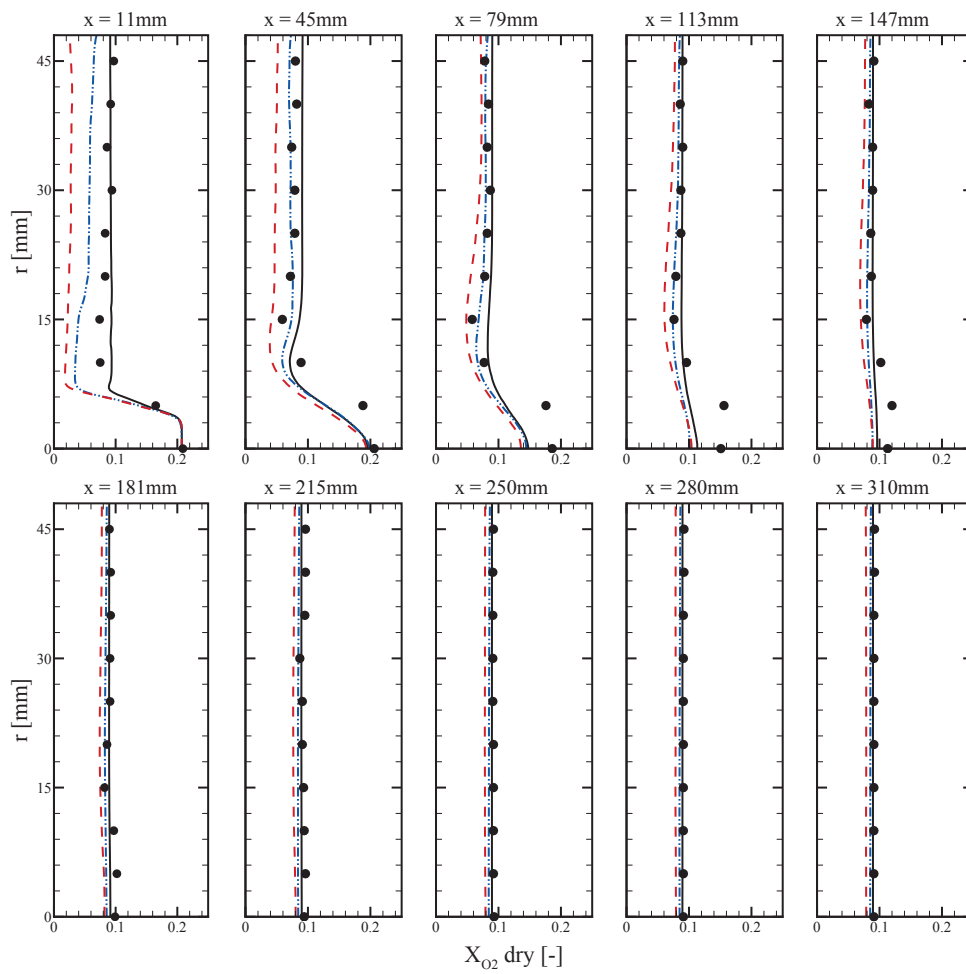


FIGURE 6.10 – Moyennes de fraction molaire sèche de O_2 filtrées au sens de Favre pour différentes coupes radiales pour le run 4. La correspondance des styles est indiquée Fig. 6.9.

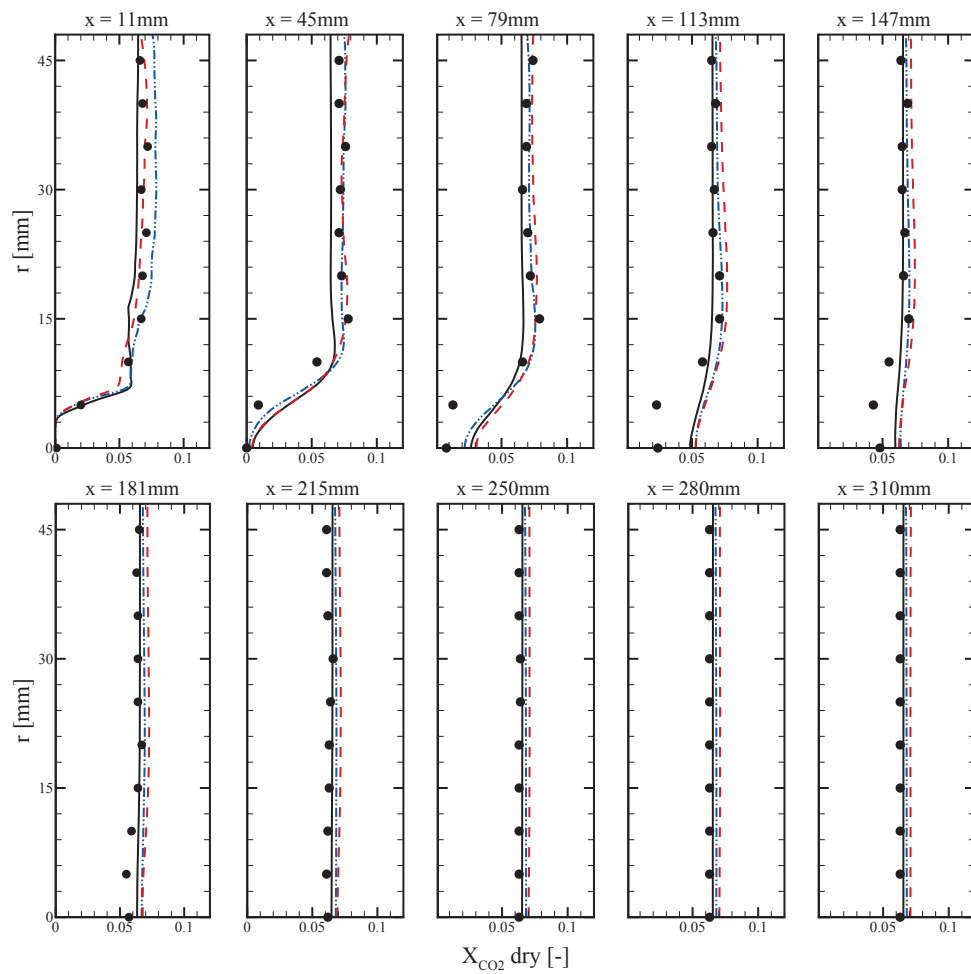


FIGURE 6.11 – Moyennes de fraction molaire sèche de CO_2 filtrées au sens de Favre pour différentes coupes radiales pour le run 4. La correspondance des styles est indiquée Fig. 6.9.

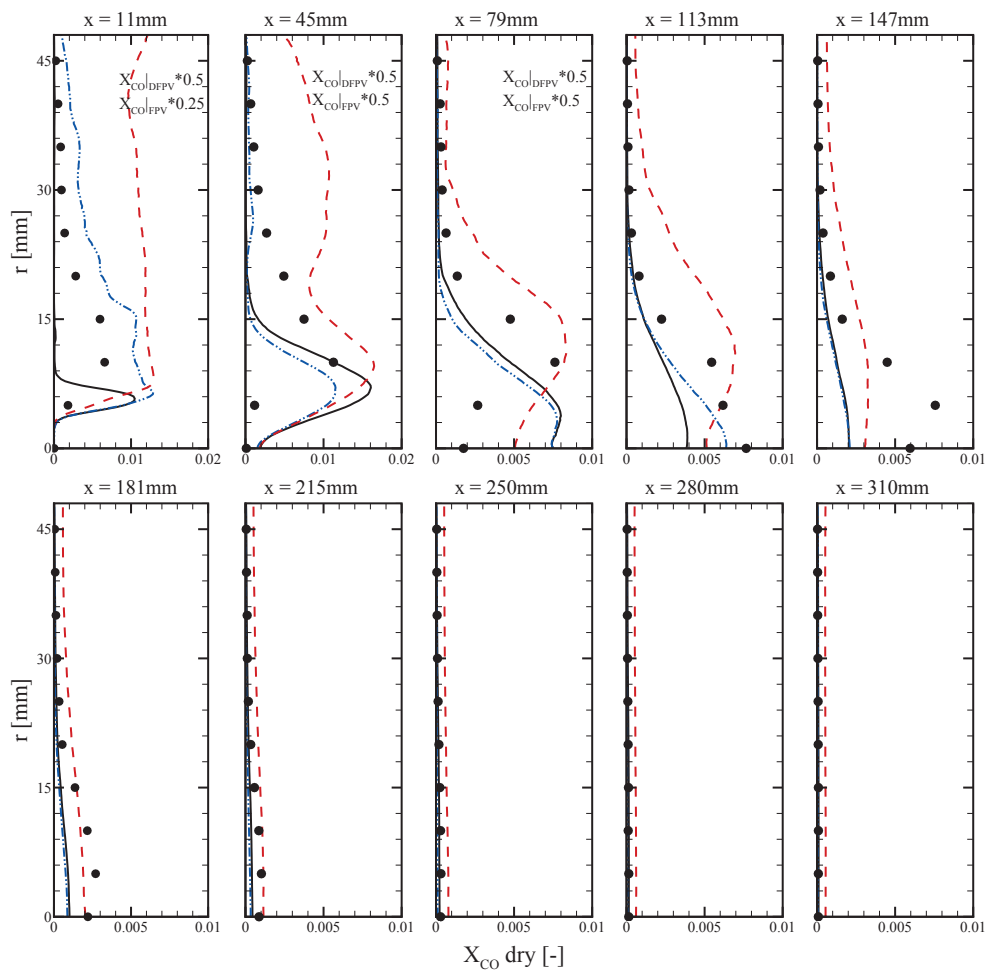


FIGURE 6.12 – Moyennes de fraction molaire sèche de CO filtrées au sens de Favre pour différentes coupes radiales pour le run 4. La correspondance des styles est indiquée Fig. 6.9. L'échelle de CO est modifiée sur les deux premières stations de mesure.

dèles NADFPV et DFPV. Pour ces deux approches, une légère sous-estimation de la température est obtenue le long de l'axe pour les stations situées à 45 mm et 79 mm. De manière plus globale la température est surestimée de 100 K à 200 K pour des coordonnées radiales excédant $r = 5$ mm. Cette surestimation est particulièrement importante dans les zones de recirculation situées entre 11 mm et 113 mm. Ces différences peuvent s'expliquer par le fait que l'on ne prend pas en compte le rayonnement des gaz, et que la modélisation des pertes thermiques aux parois est simpliste. Néanmoins, ces approches montrent leur capacité à reproduire l'effet des pertes thermiques, alors que le modèle classique FPV prédit des températures 400 K à 500 K plus importantes.

Les résultats obtenus sur la distribution des espèces majoritaires s'avèrent nettement plus satisfaisants (Fig. 6.14 et Fig. 6.15). Cependant, il apparaît des différences significatives avec les mesures dans la zone définie par $x \in [11 \text{ mm} ; 113 \text{ mm}]$ et $r \in [5 \text{ mm} ; 15 \text{ mm}]$, pour laquelle le O_2 est sous-estimé et le CO_2 surestimé. Comme pour le run 4, on note une disparité entre l'évolution de la température et celle des espèces majoritaires.

Les prédictions de CO sont cohérentes avec les estimations de température et des espèces majoritaires (Fig. 6.16). Bien que, comparé aux estimations du modèle FPV, une grande amélioration des prédictions soit visible, la fraction molaire sèche de CO est mal reproduite pour les cinq premières stations de mesure. Cela est dû au fait que l'on reproduit mal la température et les espèces majoritaires dans ces zones, et que le CO est particulièrement sensible à leurs variations.

Néanmoins, on peut noter que les différences entre le modèle NADFPV et DFPV sont très faibles dans ce cas-là. Pour les conditions opératoires du run 2, la relaxation du modèle NADFPV vers le modèle DFPV prouve que la prise en compte des variations de température du diluant est de peu d'importance. Malgré les fortes imprécisions des simulations, il est encourageant de voir que les approches développées dans ce manuscrit convergent vers le bon équilibre (mesures de $r \in [181 \text{ mm} ; 310 \text{ mm}]$).

6.6.3 Influence de la modélisation de l'injection d'air

Pour illustrer plus finement les divergences d'évolution entre la température et les espèces majoritaires obtenues pour les deux conditions opératoires dans les zones où $x \in [11 \text{ mm} ; 113 \text{ mm}]$ et $r \in [5 \text{ mm} ; 15 \text{ mm}]$ ¹, on propose ici d'étudier les résultats des simulations pour le run 2 en fonction de la modélisation de l'injection d'air.

En faisant varier la valeur de l'intensité turbulente I_{inj} de la turbulence homogène isotrope imposée en entrée, on peut comparer les résultats des simu-

1. À notre connaissance, ce type de phénomène n'apparaît que dans des cas bien définis, à savoir, dans des cas où les effets de diffusion différentielle ou bien de rayonnement sont importants, mais aussi lorsque les fluctuations de taux de dissipation scalaire sont très fortes (Im et al. (1995), Im et al. (1999))

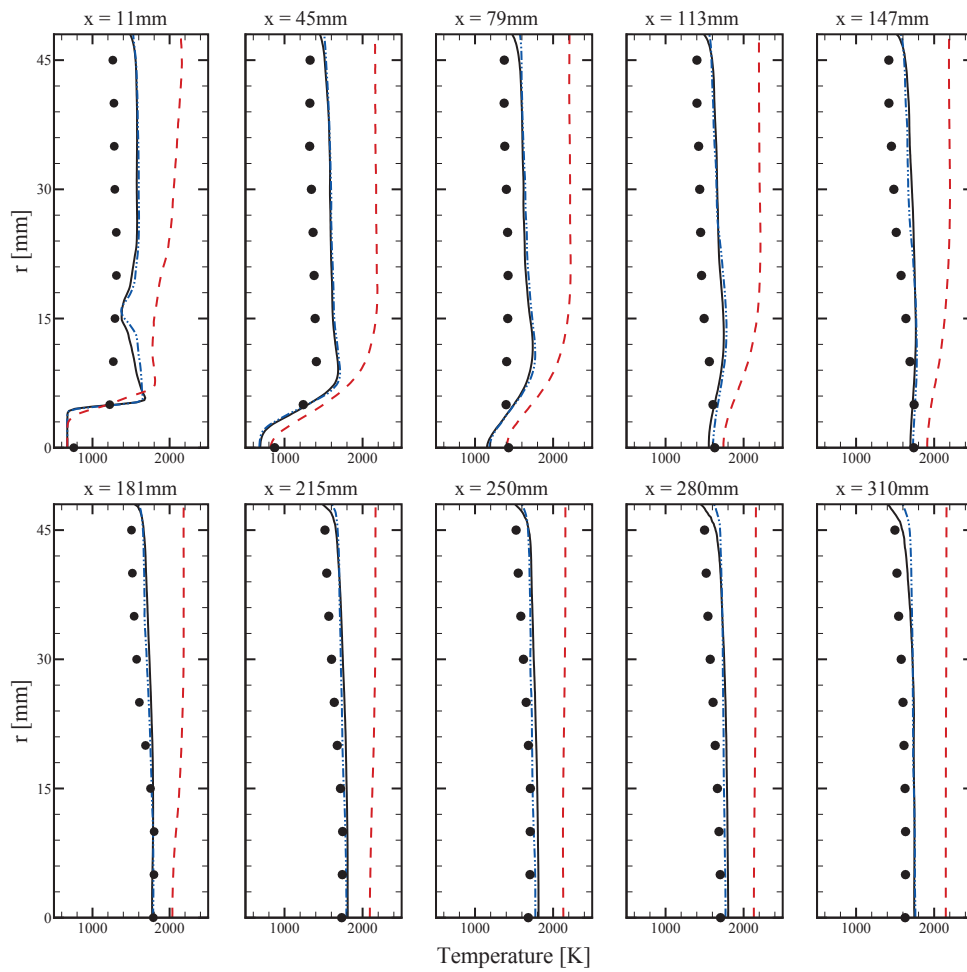


FIGURE 6.13 – Moyennes de températures filtrées au sens de Favre pour différentes coupes radiales pour le run 2. symboles : données expérimentales; ligne continue : NADFPV; ligne en tiret-point-point : DFPV; ligne en tirets : FPV.

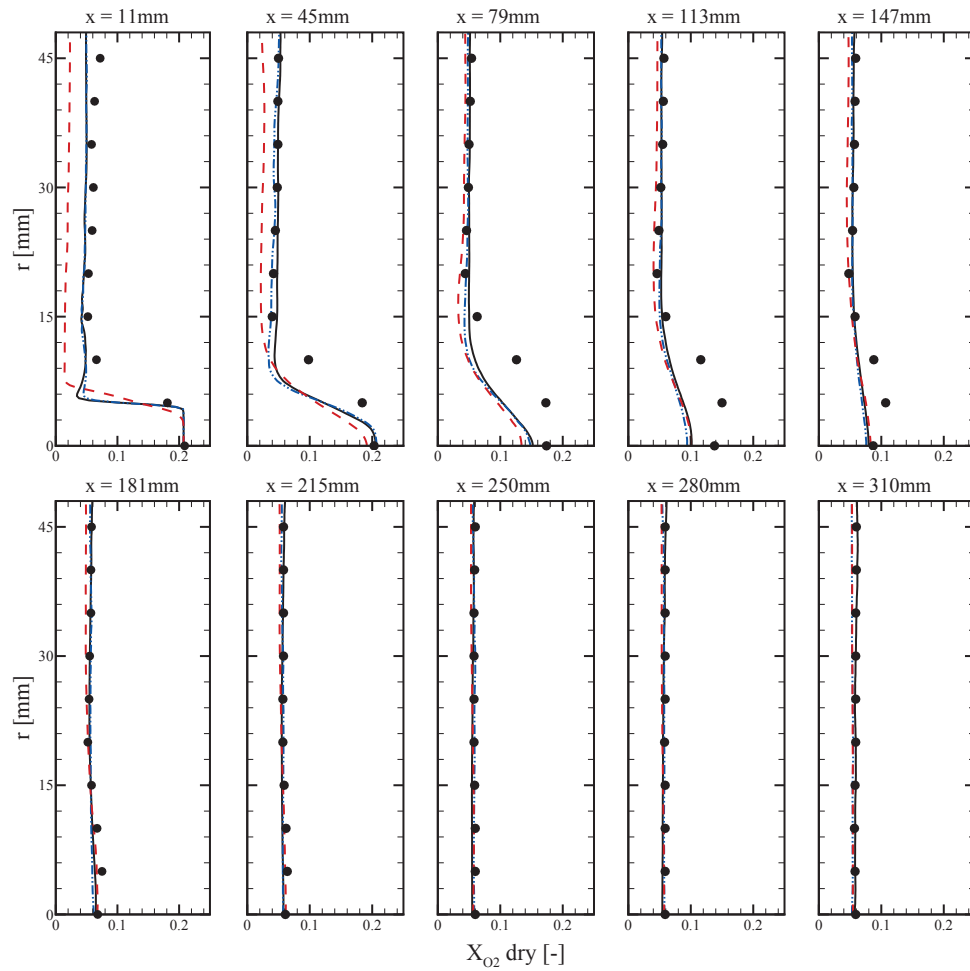


FIGURE 6.14 – Moyennes de fraction molaire sèche de O_2 filtrées au sens de Favre pour différentes coupes radiales pour le run 2. La correspondance des styles est indiquée Fig. 6.13.

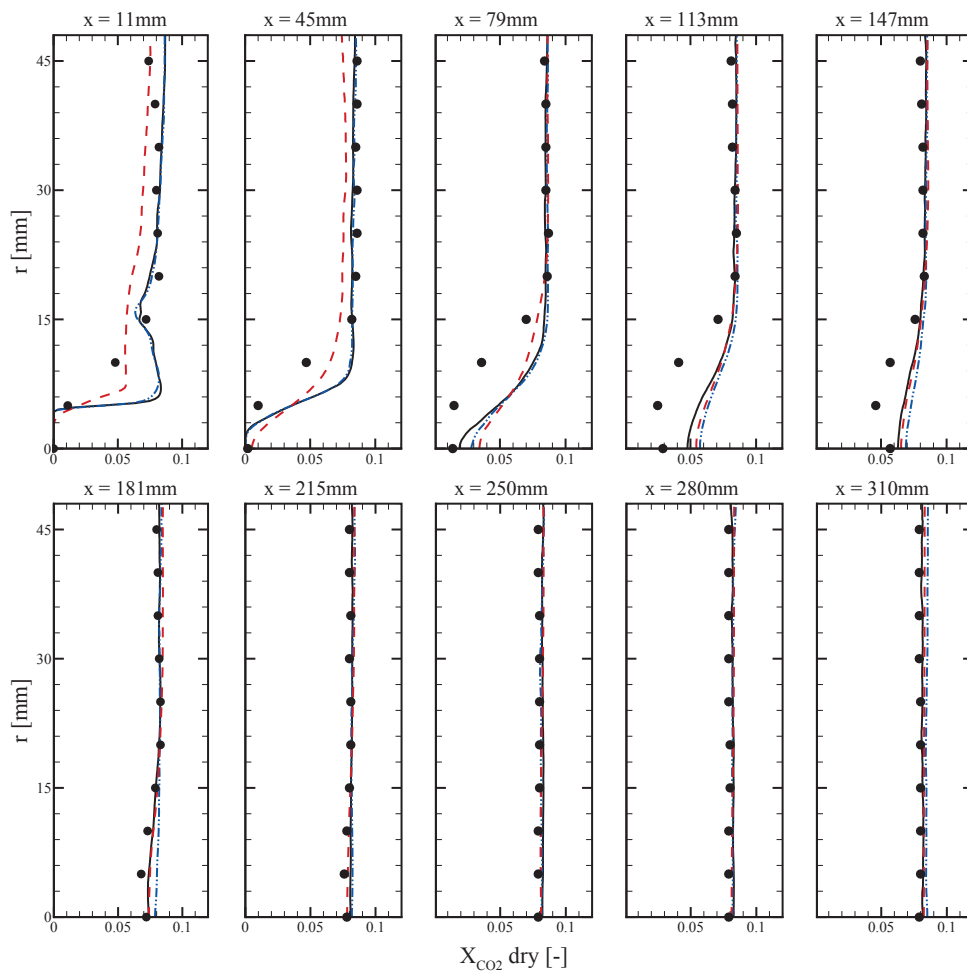


FIGURE 6.15 – Moyennes de fraction molaire sèche de CO_2 filtrées au sens de Favre pour différentes coupes radiales pour le run 2. La correspondance des styles est indiquée Fig. 6.13.

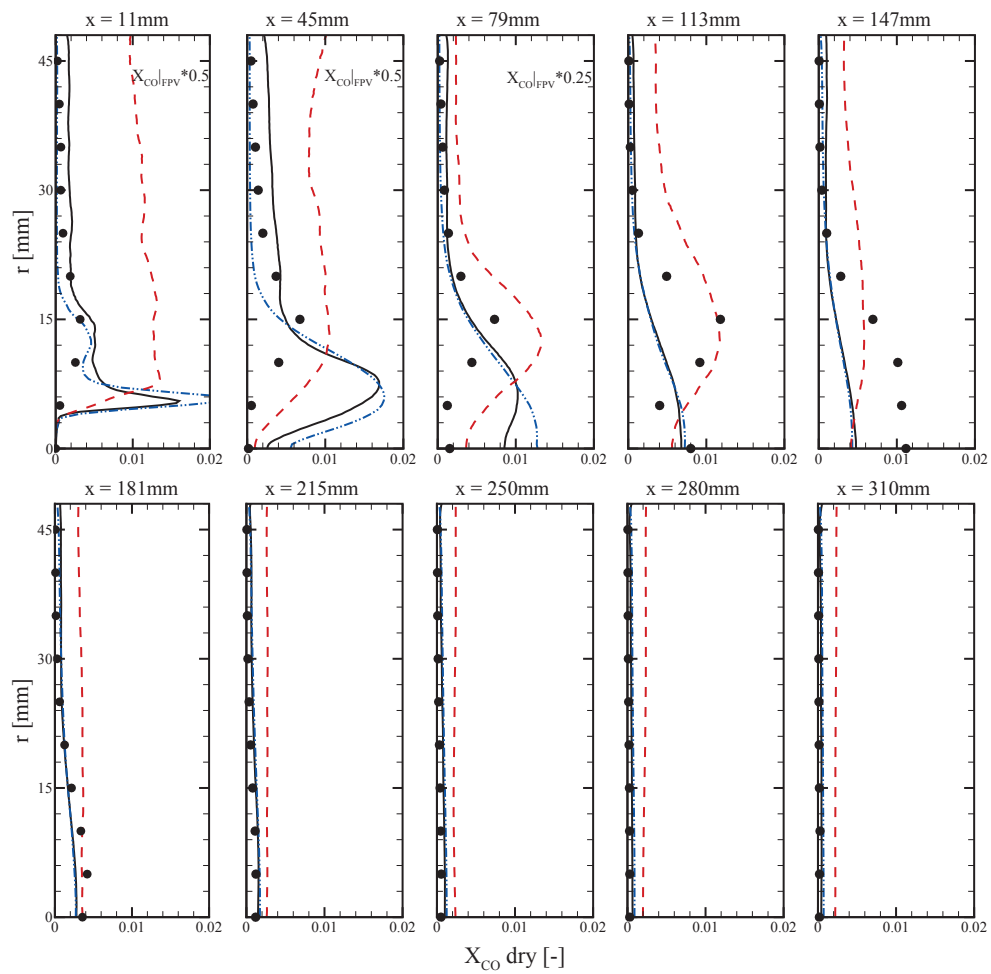


FIGURE 6.16 – Moyennes de fraction molaire sèche de CO filtrées au sens de Favre pour différentes coupes radiales pour le run 2. La correspondance des styles est indiquée Fig. 6.13.

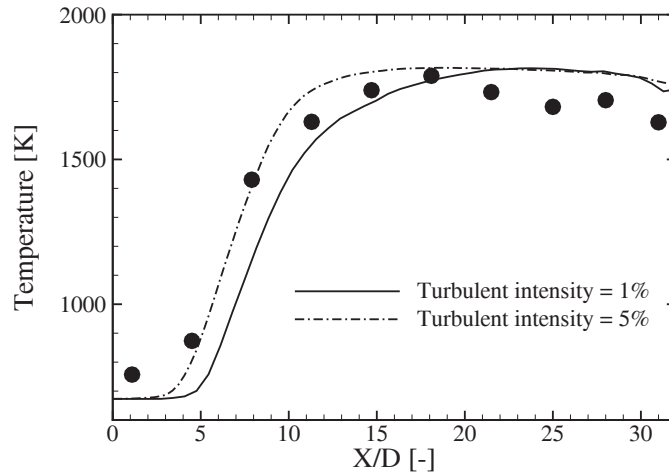


FIGURE 6.17 – Moyennes de température filtrées au sens de Favre le long de l'axe central de la configuration. symboles : données expérimentales ; ligne continue : NADFPV avec $I_{inj} = 1\%$; ligne en tiret-point : NADFPV avec $I_{inj} = 5\%$.

lations le long de l'axe longitudinal de la configuration. La figure 6.17 présente les résultats obtenus sur la température pour $I_{inj} = 1\%$ et $I_{inj} = 5\%$. On observe des différences importantes entre 5 et 15 diamètres (diamètres basés sur l'injecteur d'air, soit 10 mm). L'utilisation de $I_{inj} = 5\%$ fournit des résultats plus proches des points de mesure.

Au contraire, lorsque l'on considère le O_2 et le CO_2 , $I_{inj} = 1\%$ permet de capturer de meilleurs résultats. Ce constat indique deux choses :

1. le déphasage des comportements entre la température et les espèces majoritaires le long de l'axe longitudinal de la configuration ;
2. le rôle important de la modélisation de l'injection de l'air.

Malheureusement, les données sur les profils de vitesse à l'entrée de l'injecteur d'air sont parcellaires. Il est certain que la longueur de l'injecteur rapportée dans l'article de Verissimo et al. (2011), soit 80 mm, est insuffisante pour établir un écoulement dont la turbulence soit parfaitement établie. Des données supplémentaires sur le système d'alimentation pourrait par conséquent être utiles, faute de mesures expérimentales.

6.6.4 Un point sur les résultats

L'analyse des profils radiaux montre que les modèles développés sont capables de prendre en compte les modifications d'évolution de grandeurs chimiques sensibles aux pertes thermiques. Des différences entre les simulations et les résultats expérimentaux ont cependant été mises en avant.

Les raisons de l'inconsistance apparente de comportement entre la température et les espèces majoritaires dans les zones où $x \in [11 \text{ mm} ; 113 \text{ mm}]$ et

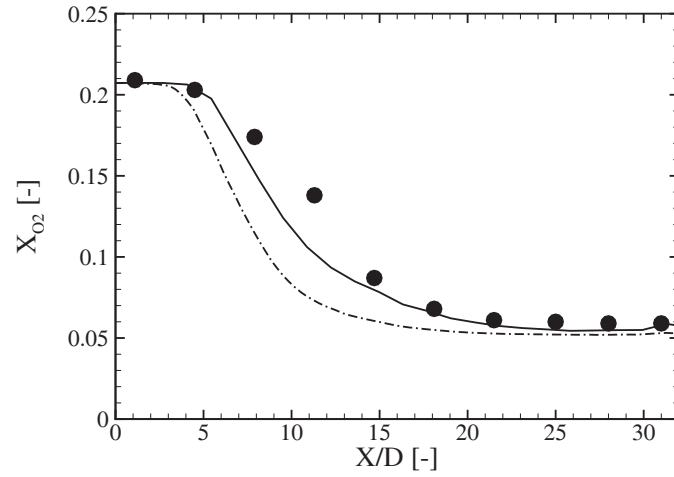


FIGURE 6.18 – Moyennes de fraction molaire sèche de O_2 filtrées au sens de Favre le long de l'axe central de la configuration. La correspondance des styles est indiquée figure 6.17.

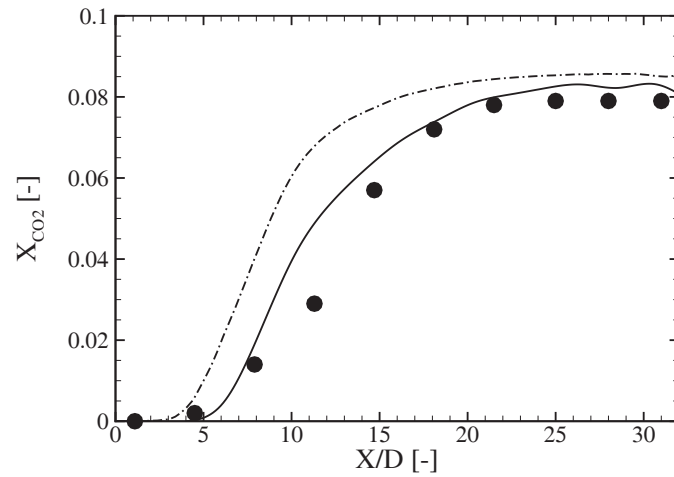


FIGURE 6.19 – Moyennes de fraction molaire sèche de CO_2 filtrées au sens de Favre le long de l'axe central de la configuration. La correspondance des styles est indiquée figure 6.17.

$r \in [5 \text{ mm}; 15 \text{ mm}]$ ne sont pas claires, et il est difficile de les expliquer théoriquement. Elles peuvent provenir d'incertitudes de mesure aussi bien que des hypothèses de modélisation et, de fait, le problème reste posé.

De plus, hors des zones définies par $x \in [11 \text{ mm}; 113 \text{ mm}]$ et $r \in [5 \text{ mm}; 15 \text{ mm}]$, la tendance des modèles à surestimer la température dans la configuration pour les deux conditions opératoires révèle que la prise en compte de conditions aux limites bien définies est primordiale. Elle semble également indiquer que le rayonnement jouera un rôle de première importance sur la prédiction de la température.

6.6.5 Modélisation des pertes thermiques

Pour les simulations rapportées dans ce chapitre, nous avons systématiquement ignoré le rayonnement des gaz. Bien que l'on soit dans le cas de configurations confinées, les faibles températures présentées dans l'expérience ont motivé la formulation de cette hypothèse. Jusqu'à maintenant, la modélisation des pertes radiatives dans un contexte LES avec une approche réaliste reste délicate à obtenir et/ou coûteuse à mettre en place. Une discussion plus avancée sur l'introduction des transferts radiatifs en LES peut être trouvée dans l'article de [dos Santos et al. \(2008\)](#).

La modélisation des transferts radiatifs, ainsi que l'intégration et le couplage avec les modèles développés ici reste hors du sujet de notre étude. Cependant, une analyse qualitative *a priori* de l'importance de ces transferts peut être faite en considérant des calculs de flammes laminaires instationnaires soumises à du rayonnement afin de dégager des temps caractéristiques et des ordres de grandeur.

Pour prendre en compte des pertes thermiques radiatives, un terme source \dot{q}_R est introduit dans l'équation de l'énergie dans le calcul de la flammelette. En supposant que l'on se trouve dans la limite d'un milieu optiquement mince, ce terme source s'écrit ([Barlow et al. \(1999\)](#)) :

$$\dot{q}_R = 4\sigma(T^4 - T_{ref}^4) \sum_k p_k a_k \quad (6.1)$$

où σ est la constante de Stefan-Boltzmann ($\sigma = 5,669.10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$), p_k les pressions partielles et a_k les coefficients d'absorption moyens de Planck de l'espèce k . La température T_{ref}^4 est la température de *background*, ici fixée à 300K . Ce modèle basique suppose que tout point rayonnant a une vue sans obstacle sur le milieu froid environnant, et néglige tout phénomène d'absorption d'énergie dans la flamme. Ces hypothèses impliquent que, dans le cadre de la modélisation de la combustion soumise à des pertes thermiques par rayonnement, \dot{q}_R est surévalué ([Zhu et al. \(2002\)](#))². Cependant, comme on ne s'intéresse

2. Par exemple, dans le cadre de la simulation LES d'une configuration industrielle, [Wang et al. \(2011\)](#) estiment le terme source radiatif par $0,2\dot{q}_R$ pour limiter cette surévaluation

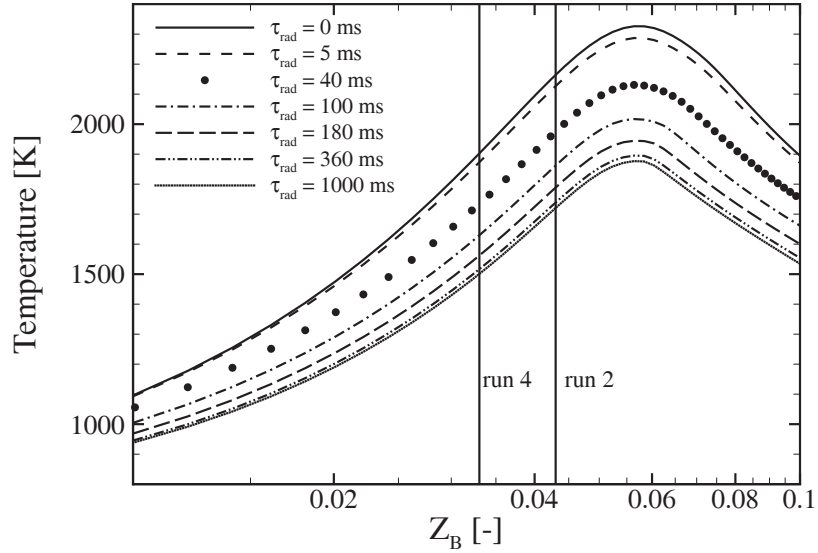


FIGURE 6.20 – Profil de température en fonction de la fraction de mélange pour $\chi_Z|_{st} = 0, 1s^{-1}$ dans une flamme à contre-courant instationnaire. Plusieurs profils sont illustrés en fonction du temps physique de simulation τ_{rad} . Les lignes pleines verticales représentent les localisations des richesses globales des conditions opératoires relatives aux run 2 et 4.

ici qu'à des tendances et à des grandeurs caractéristiques, on considérera cette modélisation viable.

La solution initiale du calcul est une flammelette stationnaire simulée sans perte radiative pour $\chi_Z|_{st} = 0, 1s^{-1}$. Les solutions de ce calcul sont illustrées en figure 6.20. Pour le taux de dissipation scalaire prescrit, la solution stationnaire finale est obtenue pour un temps physique de simulation $\tau_{res} = 1000$ ms. En considérant les localisations des richesses globales propres aux deux conditions opératoires simulées, on observe que la température peut diminuer de ~ 400 K pour le run 4 et de ~ 430 K pour le run 2, pour peu que le temps de séjour soit suffisamment important.

Pour situer les résultats de ce calcul dans le cadre de la configuration de Verissimo et al. (2011), on peut comparer les échelles de temps du rayonnement aux temps de résidence caractéristiques de la chambre de combustion. Toutefois, il est important de remarquer que les temps de résidence globaux τ_G^{res} , estimés à partir du volume de la chambre de combustion $V_{chambre}$ et du débit volumique des réactifs \dot{Q}_{reac} , ne sont que des grandeurs intégrales et ne sont pas forcément représentatives du temps lagrangien de flammelette. Pour parfaire la comparaison, il est alors utile d'estimer les temps convectifs τ_{conv}^{res} basés sur la longueur de la chambre et les vitesses du jet d'air. Le tableau 6.3 présente les différents temps de résidence estimés selon les deux approches.

En comparant ces temps de résidence avec les temps caractéristiques issus du

run	$\tau_G^{res} = \frac{V_{chambre}}{\dot{Q}_{reac}}$ [s]	$\tau_{conv}^{res} = \frac{L_{chambre}}{0,5u_{air}}$ [s]
4	0,23	0,0047
2	0,29	0,006

TABLE 6.3 – Temps de résidence associés aux run 4 et 2 suivant deux définitions différentes.

calcul de flammelettes instationnaires, on peut s’apercevoir que la température à richesse globale peut diminuer de 20 K à 250 K pour le run 4 et de 30 K à 300 K pour le run 2. Il est important de rappeler ici que l’estimation du terme source \dot{q}_R de l’équation de conservation de l’énergie est ici fortement surestimé.

Malgré le fait que cette comparaison soit très grossière, on peut raisonnablement conclure que le rayonnement a une forte influence dans cette configuration, et les ordres de grandeur de diminution de température semblent cohérents avec les disparités apparentes entre les simulations LES et les mesures expérimentales.

6.7 Analyse des simulations LES

Jusqu’à maintenant, nous avons vu que les résultats des simulations LES sont correctes pour les modèles NADFPV et DFPV, tandis que l’approche FPV prédit des divergences très marquées avec les données expérimentales. Toutefois, on a mis en avant des limitations sur les prédictions du champ de température et de monoxyde de carbone. L’analyse des résultats LES à des fins prédictives reste donc limitée.

6.7.1 Représentation en nuages de points

Une répartition de la température en fonction de la fraction de mélange pour le run 4 est donnée sur la figure 6.21. Il est intéressant de noter que toute la dynamique de combustion se situe pour des fractions de mélange comprises entre $\tilde{Z}_B \in [0; 0, 1]$. Au contraire, pour $\tilde{Z}_B \in [0, 1; 1]$, la combustion tend vers l’équilibre, ce qui s’explique par le fait que le méthane est directement injecté dans les zones de recirculation de cette configuration. Encore une fois, des tendances identiques ont été observées pour le run 2.

Cette caractéristique se retrouve sur la distribution du diluant au sein de la chambre de combustion. La répartition de la variable de dilution en fonction de la variable d’avancement est donnée dans la figure 6.22. Tout comme pour la configuration de [Castela et al. \(2012\)](#), on observe qu’il n’existe aucun état caractérisé par des valeurs nulles de \tilde{Y}_D lorsque \tilde{Y}_C est différent de zéro. Cela prouve le caractère fortement dilué de la combustion dans cette configuration, et tend à montrer qu’elle est propice à opérer en régime de combustion sans flamme.

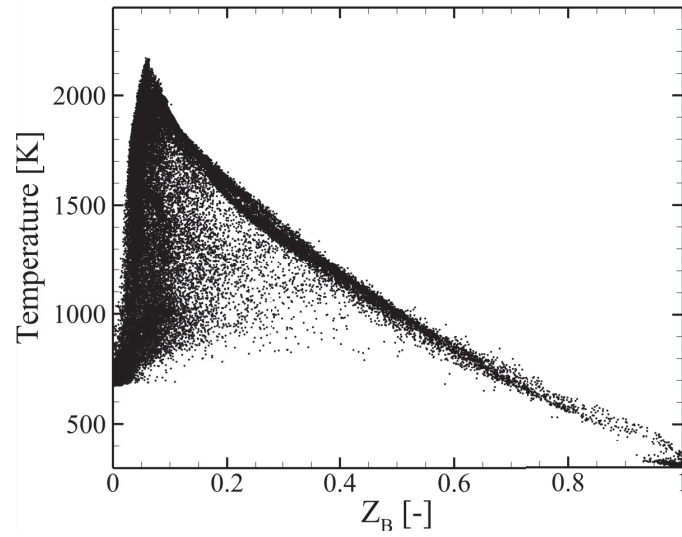


FIGURE 6.21 – Nuages de points de la température en fonction de la fraction de mélange obtenue sur une coupe axiale pour un champ instantané sur le run 4.

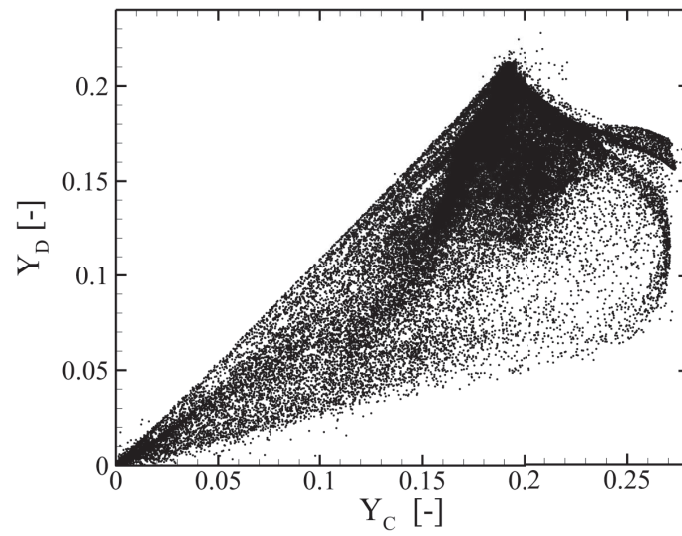


FIGURE 6.22 – Répartition de la variable de dilution \tilde{Y}_D en fonction de la variable d'avancement \tilde{Y}_C sur un plan médian de la configuration pour le run 4.

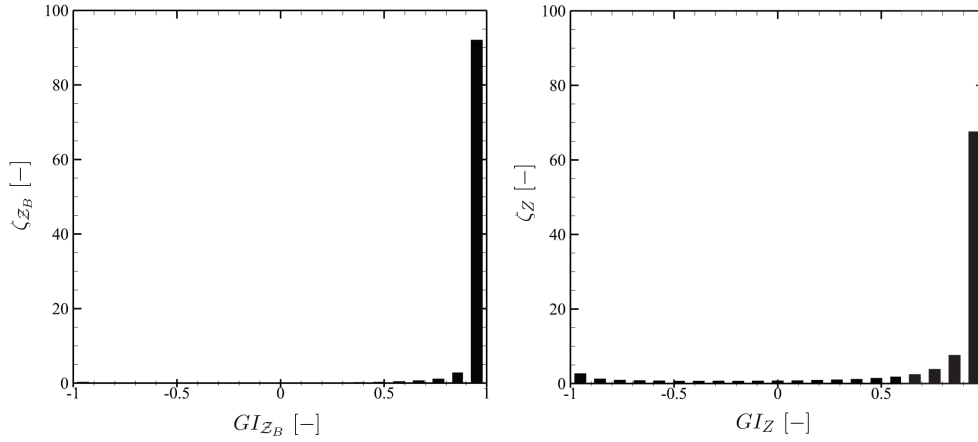


FIGURE 6.23 – Pourcentage de volume occupé par les mailles conditionnées par l'indice de produit scalaire des gradients.

Du fait de la non-homogénéité du mélange à proximité du système d'injection, la transition des gaz frais vers les gaz brûlés apparente dans la zone $\tilde{Z}_B \in [0; 0, 1]$ indique que des phénomènes marginaux d'extinction et d'allumage peuvent exister. La modélisation de la fonction de densité de probabilité proposée dans le chapitre 4 peut donc être remise en question : les fluctuations de variables d'avancement peuvent en effet être importantes. Négliger les contributions de sous-maille de la variable d'avancement revient à supposer que les cellules de calcul, à un instant donné, sont occupées par un unique état d'avancement de la cinétique chimique qui est caractérisé par le formalisme NADPFV ou DFPV. Dans cette configuration, comme la combustion est confinée à des régions localisées que l'on ne résout pas entièrement (voir aussi Fig. 6.7), cela revient à étendre le processus de combustion à toute la maille, ce qui peut résulter en une surestimation de la réactivité de la flamme.

6.7.2 Structure de flamme résolue

Pour étudier la structure de flamme présentée localement par les simulations LES, on se propose maintenant d'examiner les distributions sur le volume de réaction des indices de flamme GI_{Z_B} et GI_Z introduites dans le chapitre 5.

La figure 6.23 illustre les répartitions en volume des indices de flamme pour le run 4. Il est intéressant de noter qu'un léger biais est introduit en considérant GI_{Z_B} , qui prédit un alignement des gradients de fraction de mélange et de variable d'avancement sur la quasi-totalité du volume de réaction. En effet, la distribution de GI_Z est légèrement différente, bien que ces résultats semblent prouver que la combustion exhibe dans ce cas-là un caractère fortement similaire à une flamme de diffusion pure. Cela est en accord avec l'article de Verissimo et al. (2011), qui estime que le run 4 est assimilable à un régime de combustion non-prémélangé classique.

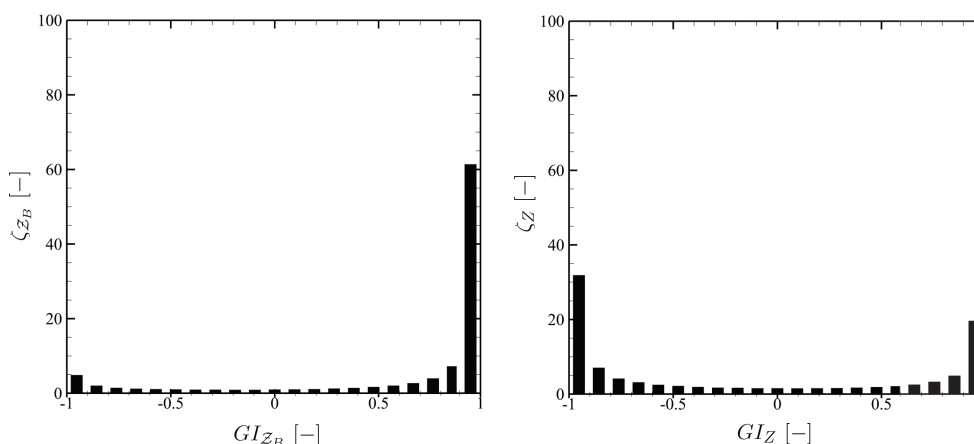


FIGURE 6.24 – Pourcentage de volume occupé par les mailles conditionnées par l'indice de produit scalaire des gradients.

Pour le run 2, la répartition des indices est singulièrement différente (Fig. 6.24). Bien que les deux indices mènent à des conclusions semblables, la prise en compte des effets de dilution modifie quelque peu l'importance estimée des phénomènes en jeu (diffusion, propagation de front de flamme...). Effectivement, les gradients sont quantitativement moins alignés, et une plus grande variété de possibilités est couverte. Toutefois, près de 50% du volume de réaction est caractérisé par des angles entre les gradients de fraction de mélange \tilde{Z} (qui prend en compte les effets de dilution) et de variable d'avancement de 0 ou de π radians. Cela montre que la combustion opère principalement dans un mode de diffusion.

6.8 Conclusion

Dans ce chapitre, des simulations aux grandes échelles de la turbulence d'une configuration refroidie opérant en régime de combustion non-prémélangée pauvre (run 4) et en combustion MILD (run 2) ont été conduites. De manière générale, les approches NADFPV et DFPV développées dans cette thèse fournissent des résultats corrects, notamment lorsqu'on les compare à un modèle de combustion adiabatique. Néanmoins, des différences avec les données expérimentales sont observées, notamment sur la température et le monoxyde de carbone. On a aussi mis en avant un déphasage de comportement entre la température et les espèces majoritaires le long de l'axe longitudinal de la chambre de combustion.

Fort peu de différences apparaissent entre le modèle NADFPV et son pendant simplifié DFPV pour le cas de la combustion sans flamme dans la configuration étudiée. Cet aspect montre que dans ce cas-là, faire l'hypothèse que les pertes thermiques et la dilution évoluent strictement de la même façon en

espace et en temps est valable. Néanmoins, l'inclusion des effets du rayonnement pourrait sensiblement modifier l'évolution de la dilution et des pertes thermiques.

Dans une tentative de dissocier les limitations observées dans les simulations, une analyse de ces dernières a été conduite. Il a été montré que cette configuration était fortement sensible à la description de l'injection de l'air, et que le rayonnement jouait *a priori* un rôle non négligeable. De plus, il a été avancé que la prise en compte de fonction de densité de probabilité plus complexe pourrait améliorer les résultats des simulations. Malgré tout, le modèle NADPFV proposé dans cette thèse est capable de reproduire de manière satisfaisante des régimes de combustion classique et des régimes de combustion fortement diluée de type combustion sans flamme.

Conclusion

Cette thèse s'inscrit dans le cadre du projet CANOE, qui vise à promouvoir l'étude et le développement du régime de combustion MILD pour des configurations à parois froides de type chaudières industrielles. L'objectif principal de ce travail est de proposer un modèle de combustion turbulente adapté à la combustion MILD. Cela permettra de disposer d'un outil de simulation à même d'aider à l'analyse de la faisabilité de ce type de combustion pour les applications cibles.

La modélisation de la combustion MILD est délicate en raison de la dilution massive des réactifs qui la caractérise. La dilution entraîne en effet des modifications de la cinétique chimique, et la modélisation se doit d'en capturer les conséquences. De plus, dans la majorité des configurations confinées, des pertes thermiques significatives ont lieu et peuvent aussi perturber le développement de la combustion.

Dans ce contexte, pour modéliser des structures de flammes réalistes, nous avons développé un modèle de combustion turbulente basé sur une tabulation de la cinétique chimique et qui prend en compte l'influence de la variation de composition des réactifs ainsi que des pertes thermiques sur la combustion. Des hypothèses simplificatrices ont dû être formulées pour limiter les degrés de liberté autorisés dans la tabulation, notamment concernant la température et la composition du diluant. Deux tabulations de nombre de dimensions différents ont été introduites : l'approche NADFPV, où dilution et pertes thermiques peuvent évoluer différemment, et DFPV où dilution et pertes thermiques sont supposées strictement équivalentes en temps et en espace. Pour estimer l'importance et l'influence des paramètres de contrôle de nos bases de données, nous avons analysé des réponses de flammes laminaires soumises à différents niveaux de dilution et de pertes thermiques. Cette étude a en particulier permis de montrer l'importance de la prise en compte de la dilution des réactifs pour une chimie fortement hors-équilibre. De plus, les apports du modèle NADFPV par rapport au modèle DFPV ont été mis en avant en considérant diverses trajectoires chimiques dépendantes de la température du diluant et du niveau de dilution.

Ces modèles ont ensuite été appliqués dans le cadre de simulations aux grandes échelles de la turbulence sur deux configurations expérimentales de laboratoires : une configuration adiabatique et une configuration où les échanges

thermiques sont importants. Dans le premier cas, les résultats obtenus avec le modèle NADFPV s'avèrent très satisfaisants, notamment sur la prédiction du monoxyde de carbone en comparaison avec d'autres approches simulées, et on montre que les trajectoires chimiques sont grandement influencées par la dilution des réactifs. Pour la deuxième configuration, deux conditions opératoires ont été simulées (combustion *classique* et combustion MILD). De manière générale, les approches NADFPV et DFPV développées dans cette thèse fournissent des résultats satisfaisants, notamment lorsqu'on les compare à un modèle de combustion adiabatique. Nous avons, dans ce cas-là, mis en avant l'importance que pourrait avoir le rayonnement des gaz sur la distribution des champs scalaires. Différentes pistes d'amélioration des modèles construits au cours de cette thèse ont été évoquées, notamment sur la prise en compte de fonctions de densité de probabilités plus complexes, bien qu'en l'état, le modèle NADFPV est capable de reproduire de manière satisfaisante des régimes de combustion classiques et des régimes de combustion fortement dilués de type combustion sans flamme.

Perspectives

Les différents points travaillés au cours de cette thèse, ainsi que certaines limitations de nos approches, offrent des perspectives d'évolutions nombreuses et variées :

- En pratique, les structures de flamme sont complexes. Pour raffiner la description locale du processus de combustion, les éléments laminaires de la tabulation pourraient être variés. Pour tenir compte des flammes à structure chimique complexe, une augmentation du nombre de dimensions des bases de données est nécessaire. C'est ce qui a été fait dans ce travail de thèse, et aussi par [Franzelli et al. \(2013\)](#) dans un contexte de simulation d'écoulements diphasiques. D'autres stratégies existent, et permettent de prendre en compte des degrés de complexités supplémentaires. Parmi les candidats disponibles, on peut par exemple citer les tabulations de type multi-régime de [Knudsen and Pitsch \(2009\)](#) ou [Mittal et al. \(2012\)](#), ou l'emploi de flammelettes multi-dimensionnelles ([Nguyen et al. \(2010\)](#)) ;
- Dans cette thèse, la modélisation des interactions chimie-turbulence a été simplifiée en prenant en compte les spécificités du régime de combustion sans flamme. Idéalement, des PDF plus complexes pourraient être employées, mais leur prescription reste problématique. Une possibilité est de transporter les PDF, bien que cette solution soit délicate à mettre en œuvre à des configurations réalistes ([Haworth \(2010\)](#), [Pope \(2012\)](#)). Une autre approche, développée récemment, semble être parfaitement indiquée pour des tabulations de dimensions élevées : il s'agit

des PDF *top-hat*, introduites en LES par [Floyd et al. \(2009\)](#) et étendues à un nombre de dimension quelconque par [Olbricht et al. \(2012\)](#). Cette approche a l'avantage majeur de ne pas rajouter de dimensions à la base de données autres que les paramètres de contrôle laminaires. Une validation fine de cette PDF pour nos applications reste toutefois nécessaire ;

- La simulation de la configuration non-adiabatique a mis en avant l'importance de prendre en compte des conditions aux limites thermiques précises, mais aussi de disposer de moyens de capturer les effets du rayonnement. Cela constitue un volet important de recherche, et différents travaux sont actuellement en cours pour permettre un couplage efficace et abordable en coût CPU entre les modèles de combustion et les modèles de rayonnement.

Annexe A

Équations de l'aérothermochimie

Dans cette annexe, une description détaillée des équations utilisées en écoulements réactifs est présentée. En considérant les conditions opératoires typiques du régime de combustion étudié dans ce travail, un certain nombre d'hypothèses simplificatrices sont formulées et appliquées pour obtenir l'ensemble des équations de conservation utilisées dans ce manuscrit.

A.1 Description d'un mélange

La masse m d'un fluide dans un volume de contrôle V est liée à la densité du fluide ρ par la relation :

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (\text{A.1})$$

La masse molaire W d'un mélange est la masse m d'une mole de cette substance. Cette relation se traduit par la relation suivante, en notant n la quantité de matière en mole :

$$W = \frac{n}{m} \quad (\text{A.2})$$

La description d'un mélange passe par l'identification du nombre d'espèces N le constituant, ainsi que par leurs proportions respectives. La fraction molaire X_k et la fraction massique Y_k d'une espèce k sont exprimées par :

$$X_k = \frac{n_k}{n} \quad \text{et} \quad Y_k = \frac{m_k}{m} \quad (\text{A.3})$$

où n_k et m_k sont, respectivement, le nombre de mole et la masse de l'espèce k . Puisque la masse totale d'un système est conservée, il vient :

$$\sum_k X_k = 1 \quad \text{et} \quad \sum_k Y_k = 1 \quad (\text{A.4})$$

En combinant les équations Eq. A.2 et Eq. A.3, on obtient la relation unissant la fraction molaire et la fraction massique de n'importe quelle espèce :

$$X_k = \frac{W_k}{W} Y_k \quad (\text{A.5})$$

Par conséquent, la masse molaire totale W d'un mélange peut s'écrire en termes de fraction molaire ou massique :

$$W = \sum_k W_k X_k \quad ; \quad W^{-1} = \sum_k \frac{Y_k}{W_k} \quad (\text{A.6})$$

D'autres variables peuvent être utilisées pour caractériser un mélange, comme la concentration molaire $[X_k]$ ou encore la concentration molaire "sèche" $[X_k]^{dry}$, définies par :

$$[X_k] = \rho \frac{W}{W_k} Y_k = \rho X_k \quad ; \quad [X_k]^{dry} = \frac{X_k}{1 - X_{H_2O}} \quad (\text{A.7})$$

A.2 Grandeurs thermochimiques

Au vu des conditions opératoires globales des applications que l'on cherche à modéliser et simuler dans le cadre de cette thèse (faible pression, combustion méthane-air ou hydrogène-air), le modèle thermodynamique des gaz parfaits est utilisé. Il exprime la relation entre la pression P , la densité massique du fluide et la température T via :

$$P = \rho r T \quad (\text{A.8})$$

où $r = \frac{R}{W}$, R étant la constante des gaz parfaits.

Pour un écoulement réactif, il existe de nombreuses manières de caractériser l'énergie ou l'enthalpie d'un mélange. Dans le cadre de cette thèse, l'enthalpie totale \mathcal{H} est choisie pour représenter l'énergie du mélange. L'enthalpie de l'espèce k , h_k est définie par rapport à une température de référence notée T_0 . Elle est définie comme étant la somme de l'enthalpie de référence à T_0 avec l'enthalpie dite sensible h_{sk} :

$$h_k = h_{sk} + \Delta h_{fk}^0 \quad (\text{A.9})$$

En introduisant la capacité calorifique spécifique à pression constante $C_{pk} = \left. \frac{\partial h_k}{\partial T} \right|_P$, l'enthalpie sensible s'écrit :

$$h_{sk} = \int_{T_0}^T C_{pk} dT \quad (\text{A.10})$$

Pour calculer l'enthalpie totale d'un mélange, l'utilisation de la capacité calorifique à pression constante C_p est adoptée :

$$C_p = \sum_k C_{pk} Y_k \quad (\text{A.11})$$

\mathcal{H} est alors calculé suivant l'expression :

$$\mathcal{H} = \sum_k h_k Y_k = \sum_k \left(\int_{T_0}^T C_{pk} dT + \Delta h_{fk}^0 \right) Y_k = \int_{T_0}^T C_p dT + \sum_k \Delta h_{fk}^0 Y_k \quad (\text{A.12})$$

A.3 Equations de transport

Les écoulements réactifs sont caractérisés par les équations de conservation dites de Navier-Stokes, auxquelles s'ajoutent les équations de conservation de toutes les espèces en jeu. Ces équations décrivent la conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces. En notant les opérateurs différentiels $\mathcal{D}_t = \partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla$ et $\partial_\psi = \frac{\partial}{\partial \psi}$, on peut écrire ces équations de conservation.

A.3.1 Continuité

L'équation régissant le bilan de masse s'écrit :

$$\mathcal{D}_t \rho = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (\text{A.13})$$

A.3.2 Quantité de mouvement

Pour la quantité de mouvement, l'équation de conservation s'écrit :

$$\rho \mathcal{D}_t(\mathbf{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}} + \rho \sum_k Y_k \mathbf{g}_k \quad (\text{A.14})$$

où \mathbf{g}_k est le vecteur des forces massiques s'exerçant sur l'espèce k , et $\bar{\bar{\sigma}}$ est le tenseur des contraintes visqueuses défini par :

$$\bar{\bar{\sigma}} = \mu(\nabla \mathbf{u} + {}^t(\nabla \mathbf{u})) + \eta(\nabla \cdot \mathbf{u}) \bar{\bar{I}} \quad (\text{A.15})$$

en notant μ la viscosité dynamique, η la viscosité volumique et $\bar{\bar{I}}$ le tenseur unité.

A.3.3 Espèces

L'évolution d'une espèce k est gouvernée par l'équation suivante :

$$\rho \mathcal{D}_t(Y_k) = -\nabla \cdot (\rho V_{k,j} Y_k) + \rho \dot{\omega}_k \quad (\text{A.16})$$

où apparaît le terme source de l'espèce $\dot{\omega}_k$ et les vitesses de diffusion d'espèces $V_{k,j}$. En sommant l'équation A.16 sur le nombre d'espèces, les deux propriétés suivantes apparaissent :

$$\sum_k V_{k,j} Y_k = 0 \quad \text{et} \quad \sum_k \dot{\omega}_k = 0 \quad (\text{A.17})$$

Les vitesses de diffusion des espèces peuvent être obtenues à partir de l'expression implicite de la diffusion de masse (Williams (1985)) :

$$\begin{aligned} \nabla X_k = & \sum_j \frac{X_k X_j}{D_{kj}} (\mathbf{V}_j - \mathbf{V}_k) + (Y_k - X_k) \left(\frac{\nabla P}{P} \right) \\ & + \frac{\rho}{p} \sum_j Y_k Y_j (\mathbf{g}_k - \mathbf{g}_j) + \sum_j \frac{X_k X_j}{\rho D_{kj}} \left(\frac{D_{T,j}}{Y_j} - \frac{D_{T,k}}{Y_k} \right) \left(\frac{\nabla T}{T} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Les termes D_{kj} sont les coefficients de diffusion binaires pour les espèces k et j . Le premier terme à droite de l'égalité de l'équation A.18 décrit la diffusion de Stefan-Maxwell, le deuxième terme est l'expression de la diffusion liée aux gradients de pression, le troisième terme est la diffusion due aux forces volumiques et le dernier terme exprime la diffusion de masse liée aux gradients de température. Les deux derniers termes de l'équation (dépendance aux forces volumiques et effet Soret) sont généralement considérés comme étant de moindre importance, et cette hypothèse sera retenue tout au long de ce travail. De plus, la résolution de cette équation pour la quantité \mathbf{V}_k est onéreuse quand le nombre d'espèces considéré dans le processus chimique devient élevé (Poinsot and Veynante (2005)). Par conséquent, des expressions simplifiées sont couramment utilisées, comme l'approximation de Hirschfelder et Curtiss (Curtiss and Hirschfelder (1985)), pour laquelle on a :

$$V_{k,j} Y_k = -D_k \nabla X_k \quad (\text{A.19})$$

où les coefficients $D_k = (1 - X_k) / \sum_{j \neq k} X_j / D_{kj}$ sont les coefficients de diffusion d'espèce dans le mélange. Il est important de noter que cette approximation ne vérifie pas les propriétés A.17 si les coefficients D_k ne sont pas égaux. L'équation A.19 est par conséquent modifiée en ajoutant un terme correctif :

$$V_{k,j} Y_k = -D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k + V_{c,j} Y_k \quad (\text{A.20})$$

avec

$$V_{c,j} = \sum_k D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k \quad (\text{A.21})$$

L'équation de transport d'espèce A.16 est en définitive modifiée et donnée par :

$$\rho D_t(Y_k) + \nabla \cdot (\rho V_{c,j} Y_k) = -\nabla \cdot (\rho D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k) + \rho \dot{\omega}_k \quad (\text{A.22})$$

A.3.4 Conservation de l'énergie

L'équation de conservation de l'enthalpie totale \mathcal{H} provient du lien entre l'énergie et l'enthalpie, ainsi que de l'utilisation de l'équation de continuité.

Elle s'exprime de la manière suivante :

$$\rho \mathcal{D}_t(\mathcal{H}) = \mathcal{D}_t P + \bar{\bar{\sigma}} : \nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{q} + \rho \sum_k Y_k \mathbf{g}_k \cdot (\mathbf{u} + \mathbf{V}_{\mathbf{k},i}) - \dot{q}_R \quad (\text{A.23})$$

où $\rho \sum_k Y_k \mathbf{g}_k \cdot (\mathbf{u} + \mathbf{V}_{\mathbf{k},i})$ est la puissance produite par les forces volumiques agissant sur le mélange, \dot{q}_R la perte de chaleur volumique par rayonnement, et \mathbf{q} le flux d'énergie défini par (en négligeant la contribution de l'effet Dufour) :

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \rho \sum_k h_k Y_k \mathbf{V}_{\mathbf{k},i} \quad (\text{A.24})$$

Ce flux comprend une contribution de diffusion thermique exprimée par la loi de Fourier, et le second terme correspond à la diffusion d'espèces d'enthalpies différentes.

A.4 Hypothèses simplificatrices et équations associées

Dans l'optique de rendre le système d'équations exprimé en section A.3 abordable d'un point de vue de sa résolution numérique, un certain nombre d'hypothèses doivent être formulées. Un certain nombre de phénomènes physiques de moindre importance pour la catégorie de configurations étudiées dans ce manuscrit est en effet négligé. Ces hypothèses sont listées et discutées ci-après.

1. *Viscosité volumique* : L'isotropie de la pression P s'exerçant sur un volume de contrôle V impose que la trace du tenseur des contraintes visqueuses $\bar{\bar{\sigma}}$ soit nulle et ce, afin que la pression mécanique se confonde avec la pression thermodynamique. C'est la condition dite de *Stokes*, pour laquelle l'hypothèse de réversibilité des déformations est faite. Cette condition mène à la relation entre la viscosité dynamique et la viscosité volumique :

$$\eta = -\frac{2}{3}\mu \quad (\text{A.25})$$

2. *Effets de flottabilité* : Le ratio des forces inertielles sur les forces volumiques peut être estimé par le nombre de Froude global, noté Fr , et défini par :

$$Fr = \frac{U_{ref}}{\sqrt{|\mathbf{g}| D_{ref}}} \quad (\text{A.26})$$

où U_{ref} et D_{ref} sont respectivement une vitesse de référence et une distance de référence associées à une configuration, et \mathbf{g} le vecteur des forces volumiques (gravité,...). Dans le cadre de cette thèse, les écoulements réactifs d'intérêt sont des écoulements à faible nombre de Mach, en conditions opératoires normales, pour lesquelles les vitesses d'injection du comburant $U_{ref} \sim \mathcal{O}(10^2 m.s^{-1})$ et de longueurs de référence $D_{ref} \sim \mathcal{O}(10^{-2} m)$. Cela équivaut donc à des nombres de Froude $Fr \sim \mathcal{O}(10^2)$.

Becker and Yamazaki (1978) ont proposé un critère permettant de quantifier les effets de flottabilité locaux dans une flamme. En introduisant x la coordonnée longitudinale, ρ_{inf} et ρ_{ref} respectivement la densité de l'air ambiant et celle de référence, ce critère adimensionnel est écrit sous la forme :

$$\xi = Fr^{-2/3} \frac{x}{D_{ref}} \left(\frac{\rho_{inf}}{\rho_{ref}} \right)^{1/3} \quad (\text{A.27})$$

Les auteurs indiquent que les effets de flottabilité deviennent non négligeables pour un critère ξ supérieur à l'unité. Le cas échéant, la flottabilité influence peu la diminution de vitesse et les scalaires, mais peut considérablement modifier le taux d'entraînement du jet. Il est important de noter que ce critère n'a été défini et utilisé que pour des configurations ouvertes. Bien que la combustion sans flamme ne puisse avoir lieu que dans des enceintes confinées, l'extrapolation de l'étude de ce critère permet d'avoir une estimation grossière de l'importance des forces volumiques sur l'écoulement. En effectuant le calcul du critère ξ pour la configuration étudiée au chapitre 6, ξ ne devient supérieur à un qu'après les dernières stations de mesure expérimentale, avant le convergent de sortie. Par conséquent, il a été choisi de négliger toute force volumique sur l'écoulement¹.

3. *Dissipation visqueuse* : Pour quantifier la contribution du terme de dissipation visqueuse dans l'équation A.23 sur l'enthalpie totale, on introduit les nombres globaux d'Eckert Ec et de Reynolds Re définis par :

$$Ec = \frac{U_{ref}^2}{C_{p,ref} \Delta T_{ref}} \quad \text{et} \quad Re = \frac{\rho_{ref} U_{ref} D_{ref}}{\mu_{ref}} \quad (\text{A.28})$$

Le nombre d'Eckert permet de quantifier la dissipation d'énergie due aux frottements, et le nombre de Reynolds représente le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses. Il peut être montré que la dissipation visqueuse est proportionnelle à $\mathcal{O}(Re^{-1} Ec^{-1})$. Nous nous intéressons ici à des écoulements à haut nombre de Reynolds et exothermiques. Par conséquent, ce terme sera négligé tout au long de ce travail.

4. *Effets de pression* : Le terme de dérivée particulière de pression de l'équation A.23 est proportionnel à $\mathcal{O}(Ec^{-1})$. Pour les mêmes raisons que l'hypothèse précédente, ce terme sera par conséquent négligé.

De plus, sous l'hypothèse d'écoulement à faible nombre de Mach à densité variable (utilisée au chapitre 6), tout effet d'acoustique et de compressibilité est négligé, ce qui implique que les variations liées à des variations de pression seront négligées.

1. Dans un contexte industriel, et notamment dans les fours verriers ou les chaudières industrielles, pour lesquelles les dimensions peuvent devenir très importantes, les effets de flottabilité devraient être pris en compte

5. *Diffusion différentielle* : Pour quantifier les effets de diffusion différentielle des espèces, le nombre de Lewis global d'espèce Le_k est introduit :

$$Le_k = \frac{\lambda_{ref}}{\rho_{ref} C_{p,ref} D_k} \quad (\text{A.29})$$

Ce nombre représente le ratio entre les diffusivités thermiques et d'espèces. Il est relié aux nombres sans dimension de Schmidt Sc , caractérisant le rapport entre la diffusivité de quantité de mouvement et de la diffusivité massique, et de Prandtl Pr , rapport entre la diffusivité de quantité de mouvement et la diffusivité thermique.

$$Le_k = \frac{Sc}{Pr} \quad \text{avec} \quad Sc = \frac{\mu_{ref}}{\rho_{ref} D_k} \quad ; \quad Pr = \frac{\mu_{ref} C_{p,ref}}{\lambda} \quad (\text{A.30})$$

[Williams \(1985\)](#) a montré au moyen d'une étude asymptotique que la diffusion différentielle, qui se traduit par des nombres de Lewis différents de un, affectait la structure et la stabilité des flammes laminaires. En régime turbulent, ces effets ont aussi été montrés expérimentalement ([Bergmann et al. \(1998\)](#), [Meier et al. \(2000\)](#)) et numériquement ([Pitsch and Peters \(1998\)](#)). En particulier, lorsque le combustible contient de l'hydrogène, les effets de diffusion différentielle deviennent importants, notamment proche en amont de l'écoulement. Cependant, ils deviennent moins importants à mesure que l'on s'éloigne des injecteurs et/ou que le Reynolds de l'écoulement est élevé.

Pour des flammes turbulentes, l'hypothèse de Lewis unitaire pour chaque espèces est souvent retenue, elle est justifiée par le fait que le transport de combustible et de comburant dans la zone de réaction doit se faire sur de larges distances dans l'espace physique. Ce transport est en effet majoritairement causé par le transport turbulent plutôt que par diffusion moléculaire.

Dans le cas particulier de la combustion MILD ou de la combustion sans flamme cependant, la zone de réaction est *a priori* distribuée sur une large zone de l'espace par rapport à une flamme de diffusion turbulente non confinée classique. De plus, les zones de recirculation jouxtant les injections de combustible, et souvent les injections de combustible même, sont animées par des vitesses très faibles et à caractère quasi laminaire, ce qui tendrait à montrer que le rôle de la diffusion différentielle est à prendre en compte pour modéliser la combustion sans flamme. [Christo and Dally \(2005\)](#) préconisent d'utiliser des modèles incluant la diffusion différentielle, celle-ci ayant un effet sur la température maximale atteinte, mais aussi sur des espèces comme H_2O , CO et CO_2 , en simulant la configuration à combustion MILD ouverte de [Dally et al. \(2002\)](#) en RANS au moyen de plusieurs modèles de combustion différents sur lesquels nous reviendrons au chapitre 4. Très récemment cependant, en faisant l'hypothèse de Lewis unitaire et en utilisant un modèle de combustion FPV

avancé (décrit et discuté au chapitre 2), [Ihme and See \(2011\)](#) arrivent à capturer très précisément ces mêmes grandeurs avec une simulation LES de la même configuration. Les différences entre les deux approches choisies dans ces publications sont telles qu’une conclusion sur l’impact de la diffusion différentielle en combustion sans flamme n’est pas aisée. [Parente et al. \(2008\)](#) ont, quant à eux, estimé négligeable cet effet sur la température et les espèces majoritaires en simulant un tube à flamme fonctionnant en régime de combustion MILD. Une étude de [A. Mardani and Ghamari \(2010\)](#), basée sur la simulation de la configuration de [Dally et al. \(2002\)](#), clarifie quelque peu les différences obtenues entre les différents groupes de recherche en montrant que l’ajout d’hydrogène (présent dans la configuration étudiée par [Christo and Dally \(2005\)](#)) dans le combustible renforce les effets de diffusion différentielle, mais aussi que la modélisation de la diffusion moléculaire est primordiale pour la modélisation de la combustion sans flamme. Dans cette même étude, ils montrent que la diffusion différentielle joue un rôle de moins en moins important à mesure que la teneur en hydrogène du combustible diminue. Ce comportement est similaire aux observations effectuées pour des flammes de diffusion turbulentes. Dans cette thèse, et au vu des applications cibles, les configurations étudiées ne contiennent pas d’hydrogène dans le combustible. Par conséquent, il a été retenu d’utiliser des Lewis unitaires pour chaque espèce, et de supposer par là-même que la diffusivité thermique et d’espèces sont équivalentes.

L’inclusion de ces hypothèses dans le système d’équations de la section [A.3](#) permet d’écrire le système d’équations de conservation utilisé dans ce manuscrit :

- *Continuité* :

$$\mathcal{D}_t \rho = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (\text{A.31})$$

- *Quantité de mouvement* :

$$\rho \mathcal{D}_t(\mathbf{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}} \quad (\text{A.32})$$

- *Espèces²* :

$$\rho \mathcal{D}_t(Y_k) = -\nabla \cdot (\rho D \nabla Y_k) + \rho \dot{\omega}_k \quad (\text{A.33})$$

- *Enthalpie* :

$$\rho \mathcal{D}_t(\mathcal{H}) = -\nabla \cdot (\rho D \nabla \mathcal{H}) - \dot{q}_R \quad (\text{A.34})$$

- *Équation d’état* :

$$P = \rho r T \quad (\text{A.35})$$

2. Ici, on néglige aussi les gradients de W

Références

- A. Mardani, S. T. and M. Ghamari (2010). Numerical study of influence of molecular diffusion in the mild combustion regime. *Combustion Theory and Modelling* 14(5), 747–774. (p. 192)
- Abtahizadeh, E., J. van Oijen, and P. de Goey (2012). Numerical study of mild combustion with entrainment of burned gas into oxidizer and/or fuel streams. *Combustion and Flame* 159(6), 2155 – 2165. (p. 61, 62, 65)
- Arghode, V. K. and A. K. Gupta (2010). Effect of flow field for colorless distributed combustion (cdc) for gas turbine combustion. *Applied Energy* 87(5), 1631 – 1640. (p. 9)
- Arghode, V. K., A. K. Gupta, and K. M. Bryden (2012). High intensity colorless distributed combustion for ultra low emissions and enhanced performance. *Applied Energy* 92(0), 822 – 830. (p. 8)
- Awosope, I. and F. Lockwood (2005). Prediction of combustion and nox emission characteristics of flameless oxidation combustion. *IFRRF Combustion Journal* (200501). (p. 29, 30)
- Bakali, A. E., L. Pillier, P. Desgroux, B. Lefort, L. Gasnot, J. Pauwels, and I. da Costa (2006). No prediction in natural gas flames using gdf-kin@3.0 mechanism ncn and hcn contribution to prompt-no formation. *Fuel* 85(7–8), 896 – 909. (p. 87)
- Balarac, G., H. Pitsch, and V. Raman (2008). Modeling of the subfilter scalar dissipation rate using the concept of optimal estimators. *Physics of Fluids* 20(9), 091701. (p. 112)
- Barlow, R. (1996). Web site for the international workshop on measurement and computation of turbulent nonpremixed flames (tnf), <http://www.ca.sandia.gov/tnf/>. (p. 54)
- Barlow, R. and J. Frank (1998). Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames. *Symposium (International) on Combustion* 27(1), 1087 – 1095. (p. 39)
- Barlow, R., N. Smith, J.-Y. Chen, and R. Bilger (1999). Nitric oxide formation in dilute hydrogen jet flames : isolation of the effects of radiation and turbulence-chemistry submodels. *Combustion and Flame* 117(1-2), 4 – 31. (p. 174)
- Becker, H. A. and S. Yamazaki (1978). Entrainment, momentum flux and

- temperature in vertical free turbulent diffusion flames. *Combustion and flame* 2(33), 123–149. (p. 190)
- Bergmann, V., W. Meier, D. Wolff, and W. Stricker (1998). Application of spontaneous raman and rayleigh scattering and 2d lif for the characterization of a turbulent $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{N}_2$ jet diffusion flame. *Applied Physics B : Lasers and Optics* 66, 489–502. (p. 191)
- Bilger, R. W. (1976). The structure of diffusion flames. *Combustion Science and Technology* 13(1-6), 155–170. (p. 39)
- Bobba, M. K., P. Gopalakrishnan, K. Periagaram, and J. M. Seitzman (2007). Product Recirculation and Mixing Studies in a Stagnation Point Reverse Flow Combustor. *AIAA-2007-0173 45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 8 - 11 January 2007, Reno, Nevada*. (p. 116)
- Bowman, C., R. Hanson, D. Davidson, W. Gardiner, J. V. Lissianski, G. Smith, D. Golden, M. Frenklach, and M. Goldenberg (1995). <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>. (p. 68)
- Bray, K., P. Domingo, and L. Vervisch (2005). Role of the progress variable in models for partially premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame* 141(4), 431 – 437. (p. 96)
- Cabra, R., J.-Y. Chen, R. Dibble, A. Karpetis, and R. Barlow (2005). Lifted methane-air jet flames in a vitiated coflow. *Combustion and Flame* 143(4), 491 – 506. Special Issue to Honor Professor Robert W. Bilger on the Occasion of His Seventieth Birthday. (p. 23, 140)
- Cabra, R., T. Myhrvold, J. Chen, R. Dibble, A. Karpetis, and R. Barlow (2002). Simultaneous laser raman-rayleigh-lif measurements and numerical modeling results of a lifted turbulent H_2/N_2 jet flame in a vitiated coflow. *Proceedings of the Combustion Institute* 29(2), 1881 – 1888. (p. 21, 23, 24)
- Carbonell, D., C. Perez-Segarra, P. Coelho, and A. Oliva (2009). Flamelet mathematical models for non-premixed laminar combustion. *Combustion and Flame* 156(2), 334 – 347. (p. 42)
- Castela, M., A. S. Verissimo, A. M. A. Rocha, and M. Costa (2012). Experimental study of the combustion regimes occurring in a laboratory combustor. *Combustion Science and Technology* 184(2), 243–258. (p. 10, 93, 115, 116, 117, 118, 120, 128, 138, 151, 176)
- Cavaliere, A. and M. de Joannon (2004). Mild combustion. *Progress in Energy and Combustion Science* 30(4), 329 – 366. (p. 9, 10)
- Cavigiolo, A., M. A. Galbiati, A. Effuggi, D. Gelosa, and R. Rota (2003). Mild combustion in a laboratory-scale apparatus. *Combustion Science and Technology* 175(8), 1347–1367. (p. 16)
- Chang, C., Y. Zhang, K. N. C. Bray, and B. Rogg (1996). Modelling and simulation of autoignition under simulated diesel-engine conditions. *Combustion Science and Technology* 113(1), 205–219. (p. 42)

- Chen, J. H. (2011). Petascale direct numerical simulation of turbulent combustion—fundamental insights towards predictive models. *Proceedings of the Combustion Institute* 33(1), 99 – 123. (p. 37)
- Chen, J. H., A. Choudhary, B. de Supinski, M. DeVries, E. R. Hawkes, S. Klasky, W. K. Liao, K. L. Ma, J. Mellor-Crummey, N. Podhorszki, R. Sankaran, S. Shende, and C. S. Yoo (2009). Terascale direct numerical simulations of turbulent combustion using s3d. *Computational Science & Discovery* 2(1), 015001. (p. 37)
- Chen, J. H., E. R. Hawkes, R. Sankaran, S. D. Mason, and H. G. Im (2006). Direct numerical simulation of ignition front propagation in a constant volume with temperature inhomogeneities : I. fundamental analysis and diagnostics. *Combustion and Flame* 145(1–2), 128 – 144. (p. 37)
- Choi, G.-M. and M. Katsuki (2001). Advanced low nox combustion using highly preheated air. *Energy Conversion and Management* 42(5), 639 – 652. (p. 12)
- Choi, G.-M. and M. Katsuki (2002). Chemical kinetic study on the reduction of nitric oxide in highly preheated air combustion. *Proceedings of the Combustion Institute* 29(1), 1165 – 1171. (p. 13, 60)
- Chorin, A. J. (1968). Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of Computation*. (p. 119)
- Christo, F. and B. Dally (2005). Modeling turbulent reacting jets issuing into a hot and diluted coflow. *Combustion and Flame* 142(1-2), 117 – 129. (p. 24, 31, 191, 192)
- Coelho, P. J. and N. Peters (2001). Numerical simulation of a mild combustion burner. *Combustion and Flame* 124(3), 503 – 518. (p. 25, 26)
- Cuenot, B. and T. Poinsot (1994). Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames. implications for turbulent diffusion combustion. *Symposium (International) on Combustion* 25(1), 1383 – 1390. Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion. (p. 47)
- Cuenot, B. and T. Poinsot (1996). Asymptotic and numerical study of diffusion flames with variable lewis number and finite rate chemistry. *Combustion and Flame* 104(1-2), 111 – 137. (p. 46)
- Curtiss, C. and J. Hirschfelder (1985). Transport properties of multicomponent gas mixtures. *The Journal of Chemical Physics* 6(17), 550–555. (p. 188)
- Dally, B., A. Karpetsis, and R. Barlow (2002). Structure of turbulent non-premixed jet flames in a diluted hot coflow. *Proceedings of the Combustion Institute* 29(1), 1147 – 1154. (p. 23, 59, 191, 192)
- Dally, B. B., E. Riesmeier, and N. Peters (2004). Effect of fuel mixture on moderate and intense low oxygen dilution combustion. *Combustion and Flame* 137(4), 418 – 431. (p. 25, 26, 29)
- Darabiha, N. and S. Candel (1992). The influence of the temperature on

- extinction and ignition limits of strained hydrogen-air diffusion flames. *Combustion Science and Technology* 86(1-6), 67–85. (p. 15)
- De, A., E. Oldenhof, P. Sathiah, and D. Roekaerts (2011). Numerical simulation of delft-jet-in-hot-coflow (djhc) flames using the eddy dissipation concept model for turbulence–chemistry interaction. *Flow, Turbulence and Combustion* 87, 537–567. (p. 24)
- de Joannon, M., A. Cavaliere, T. Faravelli, E. Ranzi, P. Sabia, and A. Tregrossi (2005). Analysis of process parameters for steady operations in methane mild combustion technology. *Proceedings of the Combustion Institute* 30(2), 2605 – 2612. (p. 29)
- de Joannon, M., A. Matarazzo, P. Sabia, and A. Cavaliere (2007). Mild combustion in homogeneous charge diffusion ignition (hc-di) regime. *Proceedings of the Combustion Institute* 31(2), 3409 – 3416. (p. 29, 68)
- de Joannon, M., P. Sabia, G. Sorrentino, and A. Cavaliere (2009). Numerical study of mild combustion in hot diluted diffusion ignition (hddi) regime. *Proceedings of the Combustion Institute* 32(2), 3147 – 3154. (p. 68)
- Delhaye, S., L. Somers, J. van Oijen, and L. de Goey (2008). Incorporating unsteady flow-effects in flamelet-generated manifolds. *Combustion and Flame* 155(1–2), 133 – 144. (p. 48)
- Delhaye, S., L. Somers, J. van Oijen, and L. de Goey (2009). Incorporating unsteady flow-effects beyond the extinction limit in flamelet-generated manifolds. *Proceedings of the Combustion Institute* 32(1), 1051 – 1058. (p. 48)
- Derudi, M., A. Villani, and R. Rota (2007). Sustainability of mild combustion of hydrogen-containing hybrid fuels. *Proceedings of the Combustion Institute* 31(2), 3393 – 3400. (p. 16)
- Domingo, P., L. Vervisch, and K. Bray (2002). Partially premixed flamelets in les of nonpremixed turbulent combustion. *Combustion Theory and Modelling* 6(4), 529–551. (p. 144)
- Domingo, P., L. Vervisch, and J. Réveillon (2005). Dns analysis of partially premixed combustion in spray and gaseous turbulent flame-bases stabilized in hot air. *Combustion and Flame* 140(3), 172 – 195. (p. 144)
- dos Santos, R. G., M. Lecanu, S. Ducruix, O. Gicquel, E. Iacona, and D. Veynante (2008). Coupled large eddy simulations of turbulent combustion and radiative heat transfer. *Combustion and Flame* 152(3), 387 – 400. (p. 174)
- Duwig, C., B. Li, Z. Li, and M. Aldèn (2012). High resolution imaging of flameless and distributed turbulent combustion. *Combustion and Flame* 159(1), 306 – 316. (p. 29, 143)
- Duwig, C., D. Stankovic, L. Fuchs, G. Li, and E. Gutmark (2007). Experimental and numerical study of flameless combustion in a model gas turbine combustor. *Combustion Science and Technology* 180(2), 279–295. (p. 25, 41)

- Duwig, C., D. Stankovic, L. Fuchs, G. Li, and E. Gutmark (2008). Study of flameless combustion in a model gas turbine combustor. *Combustion Science and Technology* (180), 279 – 295. (p. 25, 41)
- Effuggi, A., D. Gelosa, M. Derudi, and R. Rota (2008). Mild combustion of methane-derived fuel mixtures : Natural gas and biogas. *Combustion Science and Technology* 180(3), 481–493. (p. 16)
- Embouazza, M. (2005). Etude de l’auto-allumage par réduction des schémas cinétiques chimiques. application à la combustion homogène diesel. *PhD thesis, Ecole Centrale Paris*. (p. 41)
- Enjalbert, N. (2011). Modélisation avancée de la combustion turbulente diphasique en régime de forte dilution par les gaz brûlés. *PhD thesis, INSA de Rouen*. (p. 38)
- Fichet, V. (2008). Modélisation de la combustion du gaz naturel par réseaux de réacteurs avec cinétique chimique détaillée. *PhD thesis, Ecole Centrale Paris*. (p. 41)
- Fiorina, B., R. Baron, O. Gicquel, D. Thevenin, S. Carpentier, and N. Darabiha (2003). Modelling non-adiabatic partially premixed flames using flameprolongation of ildm. *Combustion Theory and Modelling* 7(180), 449 – 470. (p. 41, 61, 77)
- Fiorina, B., O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, and N. Darabiha (2005a). Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using fpi flamelet tabulation. *Combustion and Flame* 140(3), 147 – 160. (p. 40)
- Fiorina, B., O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, and N. Darabiha (2005b). Premixed turbulent combustion modeling using tabulated detailed chemistry and pdf. *Proceedings of the Combustion Institute* 30(1), 867 – 874. (p. 41, 77)
- Fiorina, B., O. Gicquel, and D. Veynante (2009). Turbulent flame simulation taking advantage of tabulated chemistry self-similar properties. *Proceedings of the Combustion Institute* 32(2), 1687 – 1694. (p. 56)
- Fiorina, B., R. Vicquelin, P. Auzillon, N. Darabiha, O. Gicquel, and D. Veynante (2010). A filtered tabulated chemistry model for les of premixed combustion. *Combustion and Flame* 157(3), 465 – 475. (p. 41)
- Fiveland, W. (1984, November). Discrete-ordinates solutions of the radiative transport equation for rectangular enclosures. *ASME Transactions Journal of Heat Transfer* 106, 699–706. (p. 26)
- Flemming, F., A. Sadiki, and J. Janicka (2005). Les using artificial neural network for chemistry representation. *Progress in computational fluid dynamics* 5(7), 375–385. (p. 56)
- Floyd, J., A. M. K. A. Kronenburg, and R. H. Ram (2009). A simple model for the filtered density function for passive scalar combustion les. *Combustion Theory and Modelling* 13(4), 559–588. (p. 183)

- Franzelli, B., B. Fiorina, and N. Darabiha (2013). A tabulated chemistry method for spray combustion. *Proceedings of the Combustion Institute* 34(1), 1659 – 1666. (p. 182)
- Galletti, C., A. Parente, M. Derudi, R. Rota, and L. Tognotti (2009). Numerical and experimental analysis of no emissions from a lab-scale burner fed with hydrogen-enriched fuels and operating in mild combustion. *International Journal of Hydrogen Energy* 34(19), 8339 – 8351. (p. 25, 26, 37)
- Galletti, C., A. Parente, and L. Tognotti (2007). Numerical and experimental investigation of a mild combustion burner. *Combustion and Flame* 151(4), 649 – 664. (p. 25, 26, 27)
- Galpin, J., C. Angelberger, A. Naudin, and L. Vervisch (2008). Large-eddy simulation of h₂-air auto-ignition using tabulated detailed chemistry. *Journal of Turbulence*, N13. (p. 41)
- Gao, F. and E. E. O'Brien (1993). A large-eddy simulation scheme for turbulent reacting flows. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* 5(6), 1282–1284. (p. 107)
- Germano, M., U. Piomelli, P. Moin, and W. H. Cabot (1991). A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* 3(7), 1760–1765. (p. 104)
- Gicquel, O. (1999). Développement d'une nouvelle méthode de réduction des schémas cinétiques : Application au méthane. *PhD thesis, Ecole Centrale Paris*. (p. 40)
- Gicquel, O., N. Darabiha, and D. Thévenin (2000). Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ildm with differential diffusion. *Proceedings of the Combustion Institute* 28(2), 1901 – 1908. (p. 40)
- Giovangigli, V. and M. D. Smooke (1987). Extinction of strained premixed laminar flames with complex chemistry. *Combustion Science and Technology* 53(1), 23–49. (p. 46)
- Girimaji, S. S. (1992). On the modeling of scalar diffusion in isotropic turbulence. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* 4(11), 2529–2537. (p. 109)
- Gopalakrishnan, P., M. Bobba, and J. Seitzman (2007). Controlling mechanisms for low nox emissions in a non-premixed stagnation point reverse flow combustor. *Proceedings of the Combustion Institute* 31(2), 3401 – 3408. (p. 18)
- Gordon, R. L., A. R. Masri, S. B. Pope, and G. M. Goldin (2007). Transport budgets in turbulent lifted flames of methane autoigniting in a vitiated co-flow. *Combustion and Flame* 151(3), 495 – 511. (p. 23)
- Graca, M., A. Duarte, P. Coelho, and M. Costa (2012). Numerical simulation of a reversed flow small-scale combustor. *Fuel Processing Technology* (0), -. (p. 37, 116, 118, 131, 135)

- Grandmaison, E. W., I. Yimer, H. A. Becker, and A. Sobiesiak (1998). The strong-jet/weak-jet problem and aerodynamic modeling of the cgri burner. *Combustion and Flame* 114(3-4), 381 – 396. (p. 17)
- Gupta, A. (2004). Thermal characteristics of gaseous fuel flames using high temperature air. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 126(1), 9–19. (p. 9)
- Gupta, A. K., S. Bolz, and T. Hasegawa (1999). Effect of air preheat temperature and oxygen concentration on flame structure and emission. *Journal of Energy Resources Technology* 121(3), 209–216. (p. 9)
- Hamdi, M., B. Hmaeid, and M. Sassi (2009). Numerical modeling of the effects of fuel dilution and strain rate on reaction zone structure and nox formation in flameless combustion. *Combustion Science and Technology* 181(8), 1078–1091. (p. 13, 61)
- Hasse, C. and N. Peters (2005). A two mixture fraction flamelet model applied to split injections in a di diesel engine. *Proceedings of the Combustion Institute* 30(2), 2755 – 2762. (p. 59, 60)
- Haworth, D. (2010). Progress in probability density function methods for turbulent reacting flows. *Progress in Energy and Combustion Science* 36(2), 168 – 259. (p. 182)
- Hilbert, R. and D. Thevenin (2002). Autoignition of turbulent non-premixed flames investigated using direct numerical simulations. *Combustion and Flame* 128(1-2), 22–37. (p. 140)
- Ihme, M. (2007). Pollutant formation and noise emission in turbulent non-premixed flames. *Ph.D. thesis, Stanford University*. (p. 49, 50)
- Ihme, M., C. M. Cha, and H. Pitsch (2005). Prediction of local extinction and re-ignition effects in non-premixed turbulent combustion using a flamelet/progress variable approach. *Proceedings of the Combustion Institute* 30(1), 793 – 800. (p. 52, 108)
- Ihme, M., A. L. Marsden, and H. Pitsch (2008, February). Generation of optimal artificial neural networks using a pattern search algorithm : Application to approximation of chemical systems. *Neural Comput.* 20(2), 573–601. (p. 56)
- Ihme, M. and H. Pitsch (2008). Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent nonpremixed flames using a flamelet/progress variable formulation. *Physics of Fluids* 20(5), 055110. (p. 42, 53, 54, 55)
- Ihme, M., C. Schmitt, and H. Pitsch (2009). Optimal artificial neural networks and tabulation methods for chemistry representation in les of a bluff-body swirl-stabilized flame. *Proceedings of the Combustion Institute* 32(1), 1527 – 1535. (p. 56)
- Ihme, M. and Y. C. See (2010a). Characterization and sensitivity analysis of a turbulent diffusion flame in diluted hot coflow. *AIAA Paper*. (p. 32)
- Ihme, M. and Y. C. See (2010b). Prediction of autoignition in a lifted

- methane/air flame using an unsteady flamelet/progress variable model. *Combustion and Flame* 157(10), 1850 – 1862. (p. 42, 52)
- Ihme, M. and Y. C. See (2011). Les flamelet modeling of a three-stream mild combustor : Analysis of flame sensitivity to scalar inflow conditions. *Proceedings of the Combustion Institute* 33, 1309–1317. (p. 31, 32, 192)
- Ihme, M., L. Shunn, and J. Zhang (2012). Regularization of reaction progress variable for application to flamelet-based combustion models. *Journal of Computational Physics* 231(23), 7715 – 7721. (p. 49)
- Ihme, M., J. Zhang, G. He, and B. Dally (2012). Large-eddy simulation of a jet-in-hot-coflow burner operating in the oxygen-diluted combustion regime. *Flow, Turbulence and Combustion*, 1–16. (p. 24, 26, 32, 59, 60, 87)
- Im, H., C. Law, J. Kim, and F. Williams (1995). Response of counterflow diffusion flames to oscillating strain rates. *Combustion and Flame* 100(1 - 2), 21 – 30. (p. 167)
- Im, H. G., J. H. Chen, and J. Y. Chen (1999). Chemical response of methane/air diffusion flames to unsteady strain rate. *Combustion and Flame* 118(1 - 2), 204 – 212. (p. 167)
- Jones, W. and B. Launder (1972). The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 15(2), 301 – 314. (p. 25)
- Katsuki, M. and T. Hasegawa (1998). The science and technology of combustion in highly preheated air. *Symposium (International) on Combustion* 27(2), 3135 – 3146. (p. 9)
- Kee, R., J. Grear, M. Smooke, and J. Miller (1985). A fortran program for modeling steady laminar one-dimensional premixed flames. *Technical Report SAND85-8240, Sandia National Laboratories*. (p. 65)
- Kempf, A., A. Sadiki, and J. Janicka (2002). Prediction of finite chemistry effects using large eddy simulation. *Proceedings of the Combustion Institute* 29(2), 1979 – 1985. (p. 42)
- Khalil, A. E. E., V. K. Arghode, and A. K. Gupta (2010). Colorless distributed combustion (cdc) with swirl for gas turbine application. *ASME Conference Proceedings* 2010(49354), 77–88. (p. 8)
- Khazaei, K. A., A. A. Hamidi, and M. Rahimi (2009). Numerical investigation of fuel dilution effects on the performance of the conventional and the highly preheated and diluted air combustion furnaces. *Chinese Journal of Chemical Engineering* 17(5), 711 – 726. (p. 25)
- Kim, J., U. Schnell, G. Scheffknecht, and A. Benim (2007). Numerical modeling of mild combustion for coal. *Prog. Comput. Fluid Dynamics* (7), 337–346. (p. 25)
- Kim, J. P., U. Schnell, and G. Scheffknecht (2008). Comparison of different global reaction mechanisms for mild combustion of natural gas. *Combustion Science and Technology* 180(4), 565–592. (p. 21)

- Kim, S. H., K. Y. Huh, and B. Dally (2005). Conditional moment closure modeling of turbulent nonpremixed combustion in diluted hot coflow. *Proceedings of the Combustion Institute* 30(1), 751 – 757. (p. 24, 26)
- Knudsen, E. and H. Pitsch (2009). A general flamelet transformation useful for distinguishing between premixed and non-premixed modes of combustion. *Combustion and Flame* 156(3), 678 – 696. (p. 182)
- Kumar, S., P. Paul, and H. Mukunda (2002). Studies on a new high-intensity low-emission burner. *Proceedings of the combustion institute* 29, 1131 – 1137. (p. 9, 116)
- Kumar, S., P. Paul, and H. Mukunda (2007). Prediction of flame liftoff height of diffusion/partially premixed jet flames and modeling of mild combustion burners. *Combustion Science and Technology* (179), 2219 – 2253. (p. 18, 25)
- Lee, K. and D. Choi (2009). Analysis of soot formation in high temperature diluted air combustion in a coaxial jet flame using an unsteady flamelet model. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 52(5-6), 1412 – 1420. (p. 13)
- Li, P., J. Mi, B. Dally, F. Wang, L. Wang, Z. Liu, S. Chen, and C. Zheng (2011). Progress and recent trend in mild combustion. *SCIENCE CHINA Technological Sciences* 54, 255–269. (p. 3)
- Lien, F. S., H. Liu, E. Chui, and C. J. McCartney (2009). Development of an analytical beta-function pdf integration algorithm for simulation of non-premixed turbulent combustion. *Flow, Turbulence and Combustion* 83(2), 205 – 226. (p. 111)
- Lilly, D. K. (1992). A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* 4(3), 633–635. (p. 105)
- Lockwood, F. and N. Shah (1981). A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures. *Symposium (International) on Combustion* 18(1), 1405 – 1414. Eighteenth Symposium (International) on Combustion. (p. 26)
- Lueckerath, R., W. Meier, and M. Aigner (2008, JAN). FLOX (R) combustion at high pressure with different fuel compositions. *Journal of Engineering for gas turbines and power-transactions of the ASME* 130(1). 52nd ASME Turbo Expo 2007, Montreal, CANADA, MAY 14-17, 2007. (p. 12)
- Magnussen, B. and B. Hjertager (1977). On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Symposium (International) on Combustion* 16(1), 719 – 729. (p. 24, 26, 118)
- Mancini, M., P. Schwebpe, R. Weber, and S. Orsino (2007). On mathematical modelling of flameless combustion. *Combustion and Flame* 150(1-2), 54 – 59. (p. 17, 25, 27, 41)

- Mancini, M., R. Weber, and U. Bollettini (2002). Predicting nox emissions of a burner operated in flameless oxidation mode. *Proceedings of the Combustion Institute* 29(1), 1155 – 1163. (p. 14, 25)
- Maruta, K., K. Muso, K. Takeda, and T. Niioka (2000). Reaction zone structure in flameless combustion. *Proceedings of the Combustion Institute* 28(2), 2117 – 2123. (p. 32)
- Masri, A. R., R. W. Dibble, and R. S. Barlow (1996). The structure of turbulent nonpremixed flames revealed by raman-rayleigh-lif measurements. *Progress in Energy and Combustion Science* 22(4), 307 – 362. (p. 54)
- Masson, E. (2005). Etude expérimentale des champs dynamiques et scalaires de la combustion sans flamme. *PhD thesis, INSA de Rouen*. (p. 10)
- Mastorakos, E. (2009). Ignition of turbulent non-premixed flames. *Progress in Energy and Combustion Science* 35(1), 57 – 97. (p. 140)
- Mastorakos, E., A. Taylor, and J. Whitelaw (1995). Extinction of turbulent counterflow flames with reactants diluted by hot products. *Combustion and Flame* 102(1-2), 101 – 114. (p. 15)
- Medwell, P. R., P. A. Kalt, and B. B. Dally (2007). Simultaneous imaging of oh, formaldehyde, and temperature of turbulent nonpremixed jet flames in a heated and diluted coflow. *Combustion and Flame* 148(1-2), 48 – 61. (p. 23)
- Medwell, P. R., P. A. Kalt, and B. B. Dally (2008). Imaging of diluted turbulent ethylene flames stabilized on a jet in hot coflow (jhc) burner. *Combustion and Flame* 152(1-2), 100 – 113. (p. 23)
- Meier, W., R. Barlow, Y. Chen, and J. Chen (2000). Raman/rayleigh/lif measurements in a turbulent ch₄/h₂/n₂ jet diffusion flame : experimental techniques and turbulence-chemistry interaction. *Combustion and Flame* 123(3), 326–343. (p. 191)
- Mell, W. E., V. Nilsen, G. Kosaly, and J. J. Riley (1994). Investigation of closure models for nonpremixed turbulent reacting flows. *Physics of Fluids* 6(3), 1331–1356. (p. 47)
- Miller, J. A. and C. T. Bowman (1989). Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion. *Progress in Energy and Combustion Science* 15(4), 287 – 338. (p. 13)
- Min, J. and F. Baillot (2012). Experimental investigation of the flame extinction processes of nonpremixed methane flames inside an air coflow diluted with co₂, n₂, or ar. *Combustion and Flame* (0), -. (p. 15)
- Min, J., F. Baillot, H. Guo, E. Domingues, M. Talbaut, and B. Patte-Rouland (2011). Impact of co₂, n₂ or ar diluted in air on the length and lifting behavior of a laminar diffusion flame. *Proceedings of the Combustion Institute* 33(1), 1071 – 1078. (p. 15)
- Mittal, V., D. J. Cook, and H. Pitsch (2012). An extended multi-regime flamelet model for ic engines. *Combustion and Flame* 159(8), 2767 – 2776. <ce :title>Special Issue on Turbulent Combustion</ce :title>. (p. 182)

- Mizobuchi, Y., S. Tachibana, J. Shinio, S. Ogawa, and T. Takeno (2002). A numerical analysis of the structure of a turbulent hydrogen jet lifted flame. *Proceedings of the Combustion Institute* 29(2), 2009 – 2015. (p. 37)
- Moureau, V., P. Domingo, and L. Vervisch (2011a). Design of a massively parallel cfd code for complex geometries. *Comptes Rendus Mécanique* 339(2-3), 141 – 148. (p. 118)
- Moureau, V., P. Domingo, and L. Vervisch (2011b). 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. (p. 118)
- Mueller, M. E. and H. Pitsch (2012, JUN). LES model for sooting turbulent nonpremixed flames. *Combustion and Flame* 159(6), 2166–2180. (p. 42, 54)
- Naudin, A. (2008). Simulation des grandes échelles de la combustion turbulente avec chimie détaillée tabulée. *PhD thesis, INSA de Rouen*. (p. 37)
- Naudin, A., B. Fiorina, X. Paubel, D. Veynante, and L. Vervisch (2006). Self-similar behavior of chemistry tabulation in laminar and turbulent multi-fuel injection combustion systems in studying turbulence by using numerical simulation databases. *Eds Center for Turbulence Research XI*, 349–360. (p. 56, 59, 60)
- Nguyen, P.-D., L. Vervisch, V. Subramanian, and P. Domingo (2010). Multi-dimensional flamelet-generated manifolds for partially premixed combustion. *Combustion and Flame* 157(1), 43 – 61. (p. 43, 144, 182)
- Nicoud, F. and F. Ducros (1999). Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, Turbulence and Combustion* 62, 183–200. (p. 104)
- Nicoud, F., H. B. Toda, O. Cabrit, S. Bose, and J. Lee (2011). Using singular values to build a subgrid-scale model for large eddy simulations. *Physics of Fluids* 23(8), 085106. (p. 104)
- Oberlack, M., R. Arlitta, and N. Peters (2000). On stochastic damköhler number variations in a homogeneous flow reactor. *Combustion Theory and Modelling* 4(4), 495–509. (p. 9, 31, 32, 79, 85, 87)
- Olbricht, C., O. Stein, J. Janicka, J. van Oijen, S. Wysocki, and A. Kempf (2012). Les of lifted flames in a gas turbine model combustor using top-hat filtered pfgm chemistry. *Fuel* 96(0), 100 – 107. (p. 183)
- Orsino, S., R. Weber, and U. Bollettini (2001). Numerical simulation of combustion of natural gas with high-temperature air. *Combustion Science and Technology* 170(1), 1–34. (p. 18)
- Parente, A., C. Galletti, and L. Tognotti (2008). Effect of the combustion model and kinetic mechanism on the mild combustion in an industrial burner fed with hydrogen enriched fuels. *International Journal of Hydrogen Energy* 33(24), 7553 – 7564. (p. 14, 25, 26, 37, 192)

- Payet, S. (2007). Analyse de l'oxy-combustion en régime dilué par simulation des grandes échelles de la turbulence. *PhD thesis, INSA de Rouen.* (p. 15)
- Peters, N. (1983). Local quenching due to flame stretch and non-premixed turbulent combustion. *Combustion Science and Technology* 30(1-6), 1–17. (p. 45)
- Peters, N. (1984). Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science* 10(3), 319 – 339. (p. 24, 31, 32, 42, 115)
- Peters, N. (2000). Turbulent combustion. *Cambridge University Press.* (p. 44, 45, 46, 86)
- Pierce, C. (2001). Progress-variable approach for large eddy simulation of turbulent combustion. *Ph.D. thesis, Stanford University.* (p. 48, 52)
- Pierce, C. D. and P. Moin (1998). A dynamic model for subgrid-scale variance and dissipation rate of a conserved scalar. *Physics of Fluids* 10(12), 3041–3044. (p. 112)
- Pierce, C. D. and P. Moin (2004). Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *Journal of Fluid Mechanics* 7(504), 73 – 97. (p. 32, 42, 44, 48, 116, 150)
- Pitsch, H. (1998). Flamemaster v3.1 : A c++ computer program for 0d combustion and 1d laminar flame calculations. <http://www.stanford.edu/group/pitsch>. (p. 45)
- Pitsch, H., M. Chen, and N. Peters (1998). Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames. *Symposium (International) on Combustion* 27(1), 1057 – 1064. Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion Volume One. (p. 47, 53)
- Pitsch, H. and N. Peters (1998). A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects. *Combustion and Flame* 114(1-2), 26 – 40. (p. 42, 44, 136, 191)
- Pitsch, H. and H. Steiner (2000). Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (sandia flame d). *Physics of Fluids* 12(10), 2541–2554. (p. 53, 54)
- Poinsot, T. and D. Veynante (2005). Theoretical and numerical combustion. *R. T. Edwards, Inc., 2nd edition.* (p. 15, 28, 105, 188)
- Pope, S. (1985). Pdf methods for turbulent reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science* 11(2), 119 – 192. (p. 108, 118)
- Pope, S. (1997). Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modelling* 1(1), 41–63. (p. 55)
- Pope, S. B. (2012). Small scales, many species and the manifold challenges of turbulent combustion. *Proceedings of the Combustion Institute* (0), –. (p. 182)

- Rao, G. and Y. Levy (2010). A new combustion methodology for low emission gas turbine engines. *8th HiTACG conference, Poznan July 5-8 2010*. (p. 13)
- Rebola, A., P. Coelho, and M. Costa (2010). Assessment of the performance of several turbulence and combustion models in the numerical simulation of mild combustion in a laboratory combustor. *V European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECCOMAS CFD*. (p. 31)
- Ribert, G., O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Veynante (2006). Tabulation of complex chemistry based on self-similar behavior of laminar premixed flames. *Combustion and Flame* 146(4), 649 – 664. (p. 56)
- Ribert, G., K. Wang, and L. Vervisch (2012). A multi-zone self-similar chemistry tabulation with application to auto-ignition including cool-flames effects. *Fuel* 91(1), 87 – 92. (p. 56)
- Riechelmann, D., T. Fujimori, and J. Sato (2002). Effect of dilution on extinction of methane diffusion flame in high temperature air up to 1500 k. *Combustion Science and Technology* 174(2), 23–46. (p. 15)
- Rottier, C. (2010). Etude expérimentale de l'influence des mélanges gazeux sur la combustion sans flamme. *PhD thesis, INSA de Rouen*. (p. 10)
- Sabia, P., M. de Joannon, S. Fierro, A. Tregrossi, and A. Cavaliere (2007). Hydrogen-enriched methane mild combustion in a well stirred reactor. *Experimental Thermal and Fluid Science* 31(5), 469 – 475. Fourth Mediterranean Combustion Symposium - MCS04. (p. 29)
- Sagaut, P. (2006). Large eddy simulation for incompressible flow (3rd edition). *Springer*. (p. 104)
- Schaffel, N., M. Mancini, A. Szlek, and R. Weber (2009). Mathematical modeling of mild combustion of pulverized coal. *Combustion and Flame* 156(9), 1771 – 1784. (p. 25, 26, 41)
- Schütz, H., R. Luckerath, T. Kretschmer, B. Noll, and M. Aigner (2008). Analysis of the pollutant formation in the flox[®] combustion. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 130(1), 011503. (p. 25, 27, 41)
- Shih, T.-H., W. W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang, and J. Zhu (1995). A new k- ϵ eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. *Computers and Fluids* 24(3), 227 – 238. (p. 118)
- Smith, G., D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song, W. C. William, J. Gardiner, V. V. Lissianski, and Z. Qin (1999). <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>. (p. 36, 68, 121, 136)
- Sripakagorn, P., S. Mitarai, G. Kosály, and H. Pitsch (2004). Extinction and reignition in a diffusion flame : a direct numerical simulation study. *Journal of Fluid Mechanics* 518, 231–259. (p. 48)
- Stadler, H., D. Ristic, M. Förster, A. Schuster, R. Kneer, and G. Scheffknecht (2009). Nox-emissions from flameless coal combustion in air, ar/o2

- and CO_2/O_2 . *Proceedings of the Combustion Institute* 32(2), 3131 – 3138. (p. 12)
- Szegö, G., B. Dally, and G. Nathan (2008). Operational characteristics of a parallel jet mild combustion burner. *Combustion and Flame* 156(2), 429–438. (p. 10, 16)
- Szegö, G., B. Dally, and G. Nathan (2008). Scaling of NOx emissions from a laboratory-scale mild combustion furnace. *Combustion and Flame* 154, 281–295. (p. 116)
- Tsuji, H., A. Gupta, T. Hasegawa, M. Katsuki, K. Kishimoto, and M. Morita (2003). High temperature air combustion. *CRS Press, New York*. (p. 60)
- van Oijen, J. (2011). Direct numerical simulation of autoigniting mixing layers in mild combustion. *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs 2011* (0), –. (p. 29)
- van Oijen, J. A., F. A. Lammers, and L. P. H. de Goeij (2001). Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds. *Combustion and Flame* 127(3), 2124 – 2134. (p. 40)
- Veríssimo, A. S. (2011). Estudo experimental de uma câmara de combustão operando no regime de combustão sem chama visível. *PhD thesis, Universidade Técnica de Lisboa, Instituto Superior Técnico*. (p. 137)
- Verissimo, A. S., A. M. A. Rocha, and M. Costa (2011). Operational, combustion, and emission characteristics of a small-scale combustor. *Energy & Fuels* 25(6), 2469–2480. (p. 19, 65, 66, 90, 93, 150, 151, 152, 154, 172, 175, 178)
- Veríssimo, A., R. Oliveira, P. J. Coelho, and M. Costa (2012). Numerical simulation of a small-scale mild combustor. *6th European Thermal Sciences Conference, 4-7 september 2012*. (p. 150, 152)
- Veríssimo, A., A. Rocha, and M. Costa (2010a). Characterization of the reaction zone in a flameless combustor. *8th International Symposium on High Temperature Air Combustion and Gasification, Poznan, Poland, 5-7 July 2010*. (p. 150)
- Veríssimo, A., A. Rocha, and M. Costa (2010b). The effect of the inlet air temperature on the combustion behaviour of a flameless combustor. *SPEIC10 Conference Proceedings, Tenerife 16-18 June 2010*. (p. 150)
- Vervisch, L., R. Hauguel, P. Domingo, and M. Rullaud (2004). Three facets of turbulent combustion modelling : Dns of premixed v-flame, les of lifted nonpremixed flame and rans of jet-flame. *Journal of Turbulence* 5(4), 1–36. (p. 41)
- Veynante, D., B. Fiorina, P. Domingo, and L. Vervisch (2008). Using self-similar properties of turbulent premixed flames to downsize chemical tables in high-performance numerical simulations. *Combustion Theory and Modelling* 12(6), 1055–1088. (p. 56)
- Veynante, D. and L. Vervisch (2002). Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science* 28(3), 193 – 266. (p. 112)

- Vicquelin, R. (2010). Tabulation de la cinétique chimique pour la modélisation et la simulation de la combustion turbulente. *PhD thesis, Ecole Centrale Paris*. (p. 23, 37, 42, 108, 136)
- Vicquelin, R., B. Fiorina, N. Darabiha, O. Gicquel, and D. Veynante (2009). Coupling tabulated chemistry with large eddy simulation of turbulent reactive flows. *Comptes Rendus Mecanique* 337(6-7), 329 – 339. (p. 41)
- Voisin, D., A. Marchal, M. Rueillon, J.-C. Boettner, and M. Cathonnet (1998). Experimental and kinetic modeling study of cyclohexane oxidation in a jsr at high pressure. *Combustion Science and Technology* 138(1-6), 137–158. (p. 36)
- Vreman, A. W. (2004). An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow : Algebraic theory and applications. *Physics of Fluids* 16(10), 3670–3681. (p. 104)
- Wang, K., G. Ribert, P. Domingo, and L. Vervisch (2010). Self-similar behavior and chemistry tabulation of burnt-gases diluted premixed flamelets including heat-loss. *Combustion Theory and Modeling* 14(4), 541–570. (p. 56, 59, 61, 86)
- Wang, L., H. Pitsch, K. Yamamoto, and A. Oriei (2011). An efficient approach of unsteady flamelet modeling of a cross-flow-jet combustion system using les. *Combustion Theory and Modelling* 15(6), 849–862. (p. 174)
- Weber, R., A. L. Verlaan, S. Orsino, and N. Lallemand (1999). Combustion of light and heavy fuel oils in high-temperature air. *Journal of the Institute of Energy* (72), 77–83. (p. 60)
- Williams, F. (1985). Combustion theory. *Persus Books, Second Edition*. (p. 39, 188, 191)
- Wunning, J. (1991). Flammenlose oxidation von brennstoff mit hochvorgewärmter luft. *Chemie Ingenieur Technik* 3(12), 1243–1245. (p. 3)
- Wunning, J. A. and J. G. Wunning (1997). Flameless oxidation to reduce thermal no-formation. *Progress in Energy and Combustion Science* 23(1), 81 – 94. (p. 8, 9, 10, 11, 12, 16, 59, 60)
- Yamashita, H., M. Shimada, and T. Takeno (1996). A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames. *Symposium (International) on Combustion* 26(1), 27 – 34. (p. 143)
- Yang, W. and W. Blasiak (2005). Numerical simulation of properties of a lpg flame with high-temperature air. *International Journal of Thermal Sciences* 44(10), 973 – 985. (p. 25, 26)
- Yimer I., B. H. and G. E.W. (2001). The strong-jet/weak-jet problem : new experiments and cfd. *Combustion and Flame* 3(124), 481–502. (p. 17)
- Yokomori, T., S. Mochida, T. Araake, and K. Maruta (2007). Electrostatic probe measurement in an industrial furnace for high-temperature air conditions. *Combustion and Flame* 150(4), 369 – 379. (p. 29)
- Yoo, C. S., R. Sankaran, and J. H. Chen (2009). Three-dimensional direct numerical simulation of a turbulent lifted hydrogen jet flame in heated

- coflow : flame stabilization and structure. *Journal of Fluid Mechanics* 640, 453–481. (p. 37)
- Zhang, Y., B. Rogg, and K. N. C. Bray (1995). 2-d simulation of turbulent autoignition with transient laminar flamelet source term closure. *Combustion Science and Technology* 105(4-6), 211–227. (p. 42)
- Zhu, X., J. Gore, A. Karpetis, and R. Barlow (2002). The effects of self-absorption of radiation on an opposed flow partially premixed flame. *Combustion and Flame* 129(3), 342 – 345. (p. 174)