



**HAL**  
open science

# Modélisation de la formation des polluants au sein des foyers aéronautiques par une méthode de chimie tabulée

Aymeric Boucher

► **To cite this version:**

Aymeric Boucher. Modélisation de la formation des polluants au sein des foyers aéronautiques par une méthode de chimie tabulée. Autre. Ecole Centrale Paris, 2015. Français. NNT : 2015ECAP0006 . tel-01148352

**HAL Id: tel-01148352**

**<https://theses.hal.science/tel-01148352>**

Submitted on 4 May 2015

**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

**Aymeric Boucher**

pour l'obtention du

GRADE de DOCTEUR

Formation doctorale : **Énergétique**

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

## Modélisation de la formation des polluants au sein des foyers aéronautiques par une méthode de chimie tabulée

### Composition du Jury :

Mme <b>Bénédicte Cuénot</b>	<b>Chef de projet CFD/Combustion, CERFACS</b>	<b>Rapporteur</b>
Mme <b>Pascale Domingo</b>	<b>Directrice de recherche, CORIA</b>	<b>Rapporteur</b>
MM. <b>Roland Borghi</b>	<b>Professeur, École Centrale Marseille</b>	<b>Examineur</b>
<b>Philippe Guibert</b>	<b>Professeur, Université Pierre et Marie Curie</b>	<b>Examineur</b>
<b>Benoit Fiorina</b>	<b>Professeur, École Centrale Paris</b>	<b>Examineur</b>
<b>Francis Dupoirieux</b>	<b>Adjoint scientifique du DEFA, Onera</b>	<b>Directeur</b>
<b>Nicolas Bertier</b>	<b>Ingénieur de Recherche, Onera</b>	<b>Encadrant</b>
<b>Lisa Bouheraoua</b>	<b>Responsable technologies d'injection, SAFRAN</b>	<b>Membre invité</b>

École Centrale des Arts et Manufactures  
Grand Établissement sous tutelle du Ministère de l'Éducation Nationale  
Grande Voie des Vignes  
92295 Châtenay-Malabry Cedex Tél. : 33 (1) 41 13 10 00 (standard)  
Télex : 634 991 F EC PARIS  
site web : [www.ecp.fr](http://www.ecp.fr)

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



<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>I Développement du modèle FTC pour la prédiction de polluants dans les chambres de combustion aéronautiques</b>	<b>7</b>
<b>1 Problématiques liées au couplage indirect entre le code de calcul et la table FTC</b>	<b>9</b>
1.1 Problèmes de conservativité liés à la technique d'implémentation indirecte du modèle de chimie tabulée . . . . .	10
1.1.1 Conservation de la masse . . . . .	11
1.1.2 Conservation de l'énergie . . . . .	11
1.1.3 Propriétés de transport . . . . .	12
1.1.4 Méthode de conservation de la masse et de l'énergie retenue dans CEDRE . . . . .	13
1.2 Déviation de la concentration des espèces par rapport aux trajectoires tabulées - consistance des termes sources vis-à-vis de la composition du mélange . . . . .	13
1.2.1 Terme source chimique reconstruit . . . . .	13
1.2.2 Terme source chimique tabulé avec terme de relaxation . . . . .	14
1.2.3 Méthode hybride d'évaluation du terme source . . . . .	16
1.2.4 Bilan de l'implémentation indirecte du modèle FTC et validation . . . . .	17
1.3 Modélisation thermodynamique du mélange d'espèces non transportées au moyen d'une espèce fictive. . . . .	20
Bilan . . . . .	25
<b>2 Extension du modèle FTC au régime de diffusion</b>	<b>27</b>
2.1 Choix d'un modèle FTC adapté aux flammes de diffusion pour CEDRE . . . . .	28
2.1.1 Modèles de flamme tabulée adapté au régime de diffusion . . . . .	28
2.1.2 Modèles de flamme tabulée pour le régime mixte . . . . .	31
2.1.3 Approche retenue pour l'extension du modèle FTC de CEDRE au régime de diffusion. . . . .	33
2.2 Simulation d'une flamme de diffusion laminaire . . . . .	33
2.2.1 Description du cas test . . . . .	33
2.2.2 Domaine de calcul, modélisation et conditions limites . . . . .	34
2.2.3 Comparaison des profils obtenus avec les différents modèles . . . . .	36
Bilan . . . . .	42
<b>3 Couplage de l'approche FTC avec un modèle de suies non tabulé</b>	<b>43</b>
3.1 Modèle de Leung et al. pour la formation des suies . . . . .	44
3.2 Modification du couplage FTC - modèle de Leung et al. . . . .	47
3.3 Validation du couplage FTC - modèle de Leung sur une flamme de diffusion laminaire	48
3.3.1 Rappel du cas de validation . . . . .	48

3.3.2	Modélisation des transferts radiatifs . . . . .	49
3.3.3	Comparaison du calcul avec suies avec les résultats expérimentaux . . . . .	49
	Bilan . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Traitement des NO<sub>x</sub> et des espèces à chimie « lente »</b>	<b>55</b>
4.1	Mécanismes de formation des NO <sub>x</sub> . . . . .	56
	A method to extend flamelet manifolds for prediction of NOx and long time scale species with tabulated chemistry . . . . .	57
	Introduction . . . . .	58
	Tabulated chemistry approach . . . . .	59
	NO <sub>x</sub> modelling . . . . .	61
	NO modelling analysis in the framework of 1D laminar premixed flame . . . . .	67
	NO prediction in TAPS type burner simulation . . . . .	69
	Conclusions . . . . .	76
4.2	Similitudes entre la méthode d'extension de la table FTC par calcul PFR et les récents travaux de Pecquery . . . . .	79
<b>5</b>	<b>Application du modèle FTC aux flammes diphasiques</b>	<b>81</b>
5.1	Modification du modèle FTC de CEDRE pour traiter la combustion diphasique . . . . .	82
5.1.1	Limites du modèle FTC dans CEDRE en cas d'injection du carburant sous forme liquide . . . . .	82
5.1.2	Choix d'une approche de la littérature pour contourner ces limites . . . . .	82
5.2	Validation du modèle FTC sur flamme diphasique 1D . . . . .	83
5.2.1	Gouttes de 5 µm de diamètre . . . . .	84
5.2.2	Gouttes de 25 µm . . . . .	87
5.2.3	Gouttes de 50 µm et 100 µm de diamètre . . . . .	88
5.3	Remarques sur l'influence du temps de relaxation du modèle FTC . . . . .	90
	Bilan . . . . .	92
<b>6</b>	<b>Modélisation de l'interaction chimie/turbulence par une approche de type flamme épaissie adaptée au modèle FTC</b>	<b>93</b>
6.1	Modélisation de l'interaction chimie/turbulence . . . . .	94
6.1.1	Approches statistiques . . . . .	94
6.1.2	Approches de type flamme épaissie . . . . .	95
6.1.3	Approche flamme filtrée . . . . .	97
6.2	Approche retenue dans CEDRE pour des calculs LES . . . . .	98
6.3	Régime prémélangé : adaptation de l'approche flamme épaissie pour le modèle FTC . . . . .	99
6.3.1	Validation du couplage entre chimie tabulée et flamme épaissie, dans le cas d'un épaississement constant . . . . .	99
6.3.2	Choix d'un senseur de flamme adapté au couplage flamme épaissie/FTC . . . . .	100
6.4	Régimes partiellement prémélangés et de diffusion : couplage des approches statistique et de flamme épaissie . . . . .	107
	Bilan . . . . .	110
<b>7</b>	<b>Bilan des développements du modèle FTC</b>	<b>111</b>
 <b>II Validation de l'approche FTC sur une chambre de combustion dotée d'un injecteur aéronautique</b>		<b>113</b>
<b>8</b>	<b>Avancées dans la simulation de configurations représentatives des foyers aéronautiques</b>	<b>115</b>

<b>9</b>	<b>Présentation de la configuration TLC</b>	<b>119</b>
9.1	Géométrie de la configuration . . . . .	120
9.2	Point de fonctionnement étudié . . . . .	121
9.3	Mesures expérimentales . . . . .	122
<b>10</b>	<b>Modélisation</b>	<b>125</b>
10.1	Maillage et mise en donnée, hors combustion . . . . .	126
10.1.1	Domaine de calcul et maillage . . . . .	126
10.1.2	Stratégie de calcul . . . . .	126
10.1.3	Mise en donnée du solveur CHARME pour la phase gazeuse . . . . .	126
10.1.4	Mise en donnée du solveur SPARTE pour la phase liquide dispersée . . . . .	128
10.2	Modélisation FTC . . . . .	131
10.2.1	Génération de la table FTC . . . . .	131
10.2.2	Modélisation de l'interaction chimie-turbulence . . . . .	131
10.2.3	Couplage avec le modèle de Leung pour le calcul de la formation des suies . . .	131
10.2.4	Extension de la table FTC pour le traitement des espèces à « chimie lente » . .	132
10.2.5	Choix des espèces à transporter dans CEDRE . . . . .	132
<b>11</b>	<b>Analyse des résultats</b>	<b>135</b>
11.1	Aérodynamique de l'écoulement . . . . .	137
11.2	Structure de la phase dispersée . . . . .	138
11.3	Pression au sein du foyer et pertes de charge du système d'injection . . . . .	140
11.4	Richesse locale de l'écoulement . . . . .	140
11.5	Position de la flamme dans le foyer TLC . . . . .	144
11.6	Dégagement de chaleur, et température en sortie de foyer . . . . .	145
11.7	Température de l'écoulement gazeux . . . . .	149
11.8	Comparaison avec les profils de température expérimentaux . . . . .	154
11.9	Prédictions des niveaux de suie dans la chambre . . . . .	156
11.10	Émissions de $\text{NO}_x$ . . . . .	161
11.11	Indices d'émission de CO et d'imbrûlés . . . . .	166
11.12	Effet de la valeur de $\kappa$ sur les résultats. . . . .	169
11.13	Effet du couplage des approches « PDF de $Z$ présumée » et « flamme épaissie » sur le calcul du facteur d'épaississement. . . . .	171
<b>12</b>	<b>Bilan des calculs sur la configuration TLC</b>	<b>175</b>
	<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>177</b>
<b>A</b>	<b>Présentation du code CEDRE et des modèles pour l'énergétique.</b>	<b>183</b>
A.1	Solveur CHARME : modélisation de la phase gazeuse réactive . . . . .	184
A.1.1	Modélisation d'un écoulement multi-espèces réactif . . . . .	184
A.1.2	Modélisation des écoulements laminaires . . . . .	184
A.1.3	Modélisation de la turbulence . . . . .	185
A.2	Solveur SPARTE : modélisation lagrangienne de la phase dispersée . . . . .	187
A.2.1	Modélisation de la phase dispersée . . . . .	187
A.2.2	Solveur lagrangien et modèles physiques pour les gouttes . . . . .	188
A.3	Solveur ASTRE : calcul des transferts radiatifs . . . . .	191
A.3.1	Modélisation des transferts radiatifs . . . . .	191
A.3.2	Calcul des transferts radiatifs par une méthode de Monte-Carlo . . . . .	192
<b>B</b>	<b>Outil de génération des tables</b>	<b>195</b>
B.1	Table FTC basée sur des flammes de prémélange . . . . .	195
B.2	Table FTC basée sur des flammes de diffusion . . . . .	196

<b>C</b>	<b>Modification des propriétés thermodynamiques du mélange induite par le couplage indirect du modèle FTC</b>	<b>199</b>
C.1	Modification de l'enthalpie de formation du mélange suite à la sélection d'un jeu d'espèces chimiques . . . . .	200
C.2	Impact sur la température . . . . .	201
<b>D</b>	<b>Discrétisation de la table dans la direction <math>c</math> (variable d'avancement) : distribution des points en fonction de la courbure des taux de réaction</b>	<b>203</b>
<b>E</b>	<b>Flamme de Santoro : profils supplémentaires pour la validation de FTC en régime de diffusion</b>	<b>207</b>
<b>F</b>	<b>Remarques à propos de l'influence du modèle de diffusion moléculaire sur la prédiction des suies</b>	<b>213</b>
<b>G</b>	<b>Tests additionnels sur un senseur de flamme basé sur les taux de réaction</b>	<b>215</b>
<b>H</b>	<b>Résultats supplémentaires pour la configuration TLC</b>	<b>217</b>
H.1	Champs de dégagement de chaleur dans le plan médian de la chambre, obtenus avec une valeur de $\kappa$ égale à 100 . . . . .	217
H.2	Champs et profils des espèces jouant le rôle d'oxydant des suies, obtenus avec une valeur de $\kappa$ égale à 100 . . . . .	219
H.3	Résultats obtenus avec une valeur de $\kappa$ égale à 10 . . . . .	222
	<b>Bibliographie</b>	<b>233</b>

# Introduction

---

La réduction des émissions de certaines espèces chimiques dans l'atmosphère est devenue un enjeu majeur de notre siècle pour l'ensemble des secteurs économiques : celle des espèces polluantes qui ont un effet néfaste sur la santé ou peuvent être toxiques pour l'environnement et celle des gaz à effet de serre qui sont responsables d'une accélération brutale du réchauffement climatique. Le secteur aéronautique représentait jusqu'ici une part mineure de ces émissions (de l'ordre de 2,5 % des gaz à effet de serre). Néanmoins, avec la croissance du trafic aérien (+5 % par an), celui-ci est confronté à la nécessité de réduire fortement les émissions qu'il génère.

Les principales émissions des aéronefs concernent les espèces suivantes :

- Le dioxyde de carbone  $\text{CO}_2$  est un contributeur majeur à l'augmentation de l'effet de serre.
- La vapeur d'eau  $\text{H}_2\text{O}$ , à l'altitude de croisière, peut entraîner la formation de traînées de condensation, qui peuvent à leur tour donner naissance à des cirrus, lesquels seraient responsables d'une augmentation de l'effet de serre nocturne, diminuant le refroidissement terrestre durant la nuit. De nouvelles études sont néanmoins nécessaires pour quantifier avec précision cet effet.
- Le monoxyde de carbone  $\text{CO}$  est un gaz incolore et inodore qui réduit l'oxygénation du sang, en prenant la place des molécules de dioxygène. Celui-ci peut causer des malaises plus ou moins importants (vertiges, nausées, pertes de connaissance) pouvant dans le pire des cas entraîner la mort, mais uniquement inhalé à forte dose. Par ailleurs, une exposition chronique à de faibles concentrations peut affecter le système cardiovasculaire.
- Les oxydes d'azote, en terme de pollution atmosphérique sont généralement restreints au monoxyde d'azote  $\text{NO}$ , et au dioxyde d'azote  $\text{NO}_2$ , que l'on regroupe sous le terme générique de  $\text{NO}_x$ . Parmi les oxydes d'azote, en plus des  $\text{NO}_x$ , on trouve également le  $\text{N}_2\text{O}$  qui est un puissant gaz à effet de serre, mais celui-ci n'est présent dans les moteurs aéronautiques qu'en tant que produit intermédiaire de la combustion. Par conséquent, ces moteurs n'en émettent qu'en infimes quantités. Émis à faible altitude, le  $\text{NO}$  est toxique, causant l'irritation des bronches, et réduisant le pouvoir d'oxygénation du sang. De plus, celui-ci peut être oxydé par l'oxygène atmosphérique pour former du  $\text{NO}_2$ , qui est très nocif pour les voies respiratoires (plus encore que le  $\text{NO}$ ). De plus, sous l'effet du rayonnement solaire ultra-violet, celui-ci se dissocie, ce qui peut entraîner indirectement la formation d'ozone troposphérique, responsable lui-aussi de problèmes respiratoires, ainsi que de la baisse du rendement de certaines cultures céréalières. Les  $\text{NO}_x$  contribuent également à la formation des pluies acides<sup>1</sup>. Selon l'altitude de croisière, les rejets de  $\text{NO}_x$  participent à la formation ou à la destruction d'ozone qui, à haute altitude, renforce l'effet de serre. Dans le même temps, les  $\text{NO}_x$  détruisent du méthane  $\text{CH}_4$ , lequel est un autre gaz à effet de serre. Par conséquent, le bilan global de l'effet des  $\text{NO}_x$  sur le forçage radiatif est à l'heure actuelle encore mal connu. Signalons que dans les applications militaires, les émissions de  $\text{NO}_x$  nuisent également à la furtivité des avions, puisque ces espèces sont détectables par des moyens optiques à de très faibles concentrations. Il est également utile de préciser que les niveaux des émissions de  $\text{NO}_x$  sont exprimés en équivalent  $\text{NO}_2$ .

---

1. Une acidification excessive des sols peut entraîner la destruction de micro-organismes qui produisent en temps normal les éléments nutritifs indispensables à de nombreux végétaux. Les pluies acides peuvent aussi plus directement brûler les feuilles des arbres et entraîner leur asphyxie. L'acidification des lacs peut entraîner une forte mortalité des poissons, impactant indirectement certains oiseaux et mammifères aquatiques, tandis que l'acidification des océans nuit aux coraux, aux crustacés et aux planctons, lesquels produisent la moitié de l'oxygène terrestre.

- Les particules de suie, émises à haute altitude, sont impliquées dans la formation des traînées de condensation, car elles constituent les noyaux à partir desquels se forment les cristaux de glace composant le nuage. A basse altitude, ces particules sont responsables de problèmes respiratoires. Elles peuvent notamment pénétrer profondément dans les alvéoles pulmonaires lorsqu'elles sont suffisamment fines. Elles sont classées dans le groupe des « cancérogènes certains pour l'homme ».
- Les hydrocarbures imbrûlés HC, posent également des problèmes de santé publique et l'un d'eux, le méthane CH<sub>4</sub>, est aussi un puissant gaz à effet de serre.
- Les oxydes de soufre SO<sub>x</sub> jouent un rôle dans la formation d'aérosols nocifs pour la santé. Il contribuent également à la formation de pluies acides.

L'émission des espèces listées ci-dessus est liée au processus de combustion du kérosène utilisé pour apporter l'énergie dont le moteur a besoin pour fournir une poussée à l'avion. La réduction des émissions de CO<sub>2</sub> et de H<sub>2</sub>O ne peut être obtenue que par celle de la consommation de carburant par les moteurs, puisque ces espèces sont les produits finaux de la combustion. Une part importante de cette réduction (environ deux tiers) consiste à améliorer les performances globales de l'avion de façon à limiter sa traînée, son poids, et ainsi la quantité d'énergie nécessaire à sa propulsion. La part restante consiste à optimiser le moteur, ce qui se traduit par une augmentation du taux de dilution et du taux de compression de ce dernier. Malheureusement, l'augmentation du taux de compression conduit à une augmentation de la production de NO<sub>x</sub>. La réduction des émissions de SO<sub>x</sub> est obtenue par la diminution de la teneur en soufre des carburants aéronautiques et ne concerne pas les technologies mises en œuvre pour la combustion. Pour le reste (NO<sub>x</sub>, CO, HC), la principale voie de réduction de leurs émissions consiste à développer des chambres de combustion et des technologies d'injection associées, permettant d'éviter l'obtention dans la chambre de conditions propices à leur formation. On évitera, par exemple, la création au sein du foyer de zones présentant à la fois de fortes températures et un excès d'oxygène et d'azote, afin de prévenir la formation des NO<sub>x</sub>. Comme on l'a déjà indiqué, les concepts récents de moteurs reposent sur une augmentation du taux de compression qui permet de réduire la consommation spécifique, mais entraîne une production plus importante de NO<sub>x</sub>. Par conséquent, le développement de technologies dites « bas-NO<sub>x</sub> » est d'autant plus critique que celles-ci doivent plus que compenser cette augmentation de production de NO<sub>x</sub> liée à l'augmentation du taux de compression, si on souhaite réduire les émissions de NO<sub>x</sub> par rapport aux moteurs de conception plus ancienne.

L'Organisation de l'Aviation Civile Internationale (OACI) définit des normes concernant les émissions polluantes des aéronefs. Les états membres de l'organisation ont ensuite la responsabilité de retranscrire ces normes au niveau national. Celles-ci portent sur les émissions de fumées, d'hydrocarbures imbrûlés, d'oxydes d'azote, et de monoxyde de carbone. Elles consistent en la définition de méthodes de mesure standardisées des émissions polluantes en sortie des moteurs, associées à des seuils définis sur un cycle LTO (Landing Take-Off). Ce cycle correspond aux phases de vol et de roulage d'un avion ayant lieu aux alentours de l'aéroport. Il est défini par la durée de chacune de ces phases, à laquelle est associée la puissance du moteur correspondante :

- approche, 4 minutes, 30 % de la puissance maximale ;
- roulage, 26 minutes, 7 % de la puissance maximale ;
- décollage, 42 secondes, 100 % de la puissance maximale ;
- montée, 3 minutes, 85 % de la puissance maximale ;

Le CAEP (Committee on Aviation and Environmental Protection) est l'entité de l'OACI qui définit les niveaux d'émissions autorisés pour un moteur sur la base de ce cycle. La réglementation en vigueur actuellement est la norme CAEP/8. Celle-ci réduit de 5 % le seuil concernant les émissions de NO<sub>x</sub> des petits moteurs par rapport à la norme précédente (CAEP/6) et de 15 % le seuil concernant les gros moteurs. Cette norme concerne uniquement la certification de moteurs nouvellement conçus. Néanmoins, la production et la vente des moteurs ne satisfaisant pas la norme CAEP/6 est interdite depuis 2013. Les objectifs du CAEP sont de réduire progressivement les niveaux autorisés concernant l'émission des NO<sub>x</sub> de 60 % par rapport à la norme CAEP/6 d'ici 2026. Cet objectif ambitieux a pour but de compenser l'effet de l'augmentation du trafic aérien sur la production de NO<sub>x</sub> par l'ensemble des aéronefs. En effet, les émissions de NO<sub>x</sub> des aéronefs, à une altitude inférieure à 3000 pieds, ont atteint en 2006 0,25 millions de tonnes et des projections montrent que cette quantité pourrait avoisiner

0,6 millions de tonnes en 2026, si les technologies en vol étaient inchangées.

Les normes définies par l'OACI ne concernent que les moteurs d'une puissance au décollage supérieure à 26,7 kN. De plus, on constate que la réglementation, basée sur le cycle LTO, ne concerne pas les émissions en régime de croisière. Signalons également que les émissions de particules de suie ne sont actuellement réglementées qu'au travers d'un indice d'émission de fumées. Cependant, des méthodes de mesure standardisées des émissions ces particules sont actuellement mises au point et devraient conduire à la mise en place d'une réglementation plus précise portant sur la concentration de particules de suie en sortie des moteurs. Concernant les émissions de gaz à effet de serre, les émissions de CO<sub>2</sub> ne font actuellement l'objet d'aucune norme. Néanmoins, la réduction de consommation de carburant est un enjeu économique pour les avionneurs et motoristes, ce qui conduit naturellement à réduire la production de CO<sub>2</sub> des aéronefs.

Au niveau européen, l'ACARE (Advisory Council for Aeronautics Research in Europe) a fixé un objectif ambitieux concernant les NO<sub>x</sub>, consistant en une diminution de 80 % de leur émission par les avions produits en 2020, par rapport à ceux produits en 2000. De la même façon, l'ACARE a fixé pour objectif une réduction de 50 % des émissions de CO<sub>2</sub>. Ces objectifs n'ont pas de caractère réglementaire, mais orientent tout de même le financement de la recherche européenne de façon à créer les ruptures technologiques permettant de les atteindre.

En résumé, concernant les émissions polluantes, les avionneurs, et plus particulièrement les motoristes, doivent impérativement concevoir des technologies permettant à court terme une réduction drastique de la production de NO<sub>x</sub>, malgré l'augmentation du taux de compression, et très probablement une réduction des émissions de particules de suie.

Pour développer ces technologies, les motoristes ont besoin d'outils permettant de comprendre les mécanismes de formation des espèces polluantes au sein des foyers, mais aussi de tester les nouveaux concepts nés de la compréhension de ces mécanismes. Un des outils répondant à ces besoins est la réalisation de mesures sur banc d'essai. Néanmoins, le coût des expériences sur lesquelles portent ces mesures est très élevé, ce qui contraint fortement le nombre de mesures réalisables. De plus, les moyens expérimentaux actuels ne permettent pas d'effectuer ces mesures à l'intérieur même des moteurs, ce qui limite la compréhension des phénomènes physiques en jeu. Il est possible de les reproduire partiellement sur des configurations académiques, mais celles-ci n'offrent pas toujours des conditions représentatives de la combustion au sein des foyers aéronautiques.

La simulation numérique est un outil complémentaire aux mesures, permettant de lever les limitations de l'expérience. En effet, le résultat d'une simulation numérique permet de connaître l'état thermo-chimique de l'écoulement en tout point du moteur. De plus, le coût d'une simulation est nettement moins élevé que celui d'un ensemble de mesures expérimentales. Toutefois, les modèles utilisés pour produire de telles simulations doivent préalablement être validés par une confrontation avec les mesures expérimentales, afin de vérifier la prédictibilité des simulations numériques. De plus, compte-tenu des capacités informatiques actuelles, les modélisations mises en œuvre doivent, le plus souvent, présenter un niveau de complexité limité, de manière à offrir un temps de restitution compatible avec les temps caractéristiques de R&D de l'industrie (allant de quelques jours à quelques heures suivant la phase de développement concernée). C'est notamment le cas de la modélisation de la combustion turbulente dans un foyer aéronautique.

Pour traiter des phénomènes comme la formation d'espèces polluantes dans une simulation numérique, il est impératif de tenir compte de l'ensemble des temps caractéristiques chimiques liés à cette production. Ces temps caractéristiques sont le fruit du déroulement des nombreuses réactions chimiques élémentaires qui se produisent simultanément dans le mélange. La compétition entre ces réactions élémentaires induit des vitesses de consommation ou de production plus ou moins rapides pour chaque espèce du mélange. Les temps caractéristiques de formation ou consommation des espèces majoritaires lors de la combustion hydrocarbure-air sont relativement proches et souvent très rapides devant les temps caractéristiques de mélange, ce qui a permis le développement, d'une part, de modèles basés sur une hypothèse de chimie infiniment rapide, ou chimie brusque, et d'autre part, de cinétiques chimiques globales, ou très réduites. Chimie brusque et cinétiques réduites permettent ainsi d'obtenir une description peu coûteuse des principaux effets de la combustion. En revanche, le manque d'informations concernant les temps caractéristiques des espèces minoritaires rend ces modèles inadapés

à la prédiction des émissions polluantes lors de la combustion. Il est alors nécessaire d'utiliser des cinétiques chimiques complexes pour décrire correctement l'ensemble des réactions élémentaires ayant lieu dans le mélange.

L'utilisation de cinétiques chimiques complexes nécessite la résolution d'un grand nombre d'équations de transport puisqu'il faut résoudre autant d'équations de transport qu'il y a d'espèces dans la cinétique. Pour la combustion de certains hydrocarbures comme le kérosène, ce nombre dépasse rapidement la centaine. Le coût d'une simulation CFD avec ce type de modélisation de la chimie est à ce jour inabordable dans un contexte industriel. Afin d'utiliser des chimies complexes en gardant un coût de calcul réduit, des modèles dans lesquels la chimie est tabulée à partir de solutions de flammes ont été proposés. Parmi ceux-ci se trouvent l'approche FPI [34]-FGM [70], qui a été implémentée dans le code CEDRE dans le cadre de la thèse de Julien Savre [92].

L'hypothèse de base de ce type de modèle est que dans certaines configurations, la structure d'une flamme turbulente peut être localement assimilée à celle d'une flamme laminaire, qui n'est que plissée par la turbulence. On parle alors de régime de flammelette (voir par exemple les ouvrages de Borghi et Destriau [7] ou Poinso et Veynante [85] sur la structure des flammes turbulentes). Se plaçant dans un régime de flammelette, on suppose l'existence d'un jeu de variables réduit qui permet de décrire complètement cette structure de flamme. Cela signifie que toute grandeur thermo-chimique peut alors être exprimée comme une fonction de ce jeu de variables réduit. Dans ces conditions, on ne résout en plus du système de Navier-Stokes que les équations de transport de ces variables, et non celles des fractions massiques des espèces chimiques. C'est pourquoi on parle de chimie tabulée. Le coût CPU est ainsi nettement réduit bien que l'on conserve une description détaillée de la chimie. Par exemple, dans le modèle FPI-FGM, pour de la combustion prémélangée, on fait l'hypothèse qu'en l'absence de pertes thermiques, la structure de flamme peut être décrite par une variable d'avancement normalisée,  $c$ , qui varie de façon monotone le long de la flamme, entre les gaz frais et les gaz brûlés. Cette variable  $c$  est généralement définie comme une combinaison linéaire des fractions massiques d'un nombre réduit d'espèces :

$$c(\phi) = \frac{\hat{c}}{\hat{c}^{eq}(Z)} = \frac{\sum_{k=1}^{n_c} \gamma_k Y_k}{\sum_{k=1}^{n_c} \gamma_k Y_k^{eq}(\phi)}, \quad (1)$$

où  $n_c$  est le nombre d'espèces intervenant dans la combinaison linéaire, et les  $\gamma_k$  sont des coefficients constants. L'indice  $eq$  fait référence à la valeur à l'équilibre du mélange de richesse  $\phi$  déterminée. Il est courant d'utiliser  $\gamma_k = 1$  ou encore  $\gamma_k = \frac{1}{\mathcal{M}_k}$ , où  $\mathcal{M}_k$  désigne la masse molaire de l'espèce  $k$ . Les dimensions de  $\hat{c}$  sont donc fonction du coefficient  $\gamma_k$  choisi, mais la variable  $c$  reste sans dimension, monotone, et bornée entre 0 et 1. Une fois cette variable définie, on peut décrire l'ensemble des états thermo-chimiques tout au long de la flamme comme une fonction de  $c$ . Toujours dans le modèle FPI-FGM en prémélange, la table est générée préalablement au calcul CFD, à partir de la solution des équations de flamme laminaire 1D prémélangée, obtenue à la même richesse que la richesse du calcul CFD. Les grandeurs thermo-chimiques d'intérêt (température, concentrations d'espèces chimiques, masse volumique, etc...) sont exprimées à l'aide de cette solution comme fonction de la variable  $c$ , et stockées dans la table indexée par cette variable.

Le nombre de variables utilisées pour décrire la structure de flamme et indexer la table dépend de la complexité du problème à traiter. En effet, s'il y a dans l'écoulement des effets d'étirement, des pertes thermiques, une variation de richesse locale, etc..., le nombre de structures de flamme pouvant être rencontrées dans l'écoulement va augmenter. Tous les états thermo-chimiques rencontrés dans ces différentes structures de flamme doivent être présents dans la table afin que le modèle de chimie tabulée puisse décrire correctement l'écoulement réactif en tout point. Par exemple afin de prendre en compte la variation de richesse  $\phi$  dans les écoulements partiellement prémélangés (ou stratifiés), il est proposé dans le modèle FPI-FGM d'utiliser les solutions d'une flamme laminaire obtenues pour différentes richesses couvrant l'ensemble du domaine compris entre les limites d'extinction riche et pauvre. Il est alors possible de décrire les états thermo-chimiques de cet ensemble de flammes à l'aide de deux variables ( $\phi, c$ ). Ces états sont donc stockés dans une table ayant cette fois deux dimensions. Dans la simulation avec le modèle FPI-FGM, on utilise la richesse locale pour sélectionner une flamme appropriée dans la table, et l'avancement  $c$  permet de se positionner dans cette flamme. En pratique, on utilise la fraction de mélange  $Z$  à la place de la richesse, car elle présente l'avantage d'être bornée

entre 0 et 1, ce qui est plus approprié pour résoudre numériquement son équation de transport. Cette fraction de mélange peut être formulée de différentes façons. Dans ce travail, on utilise une formulation basée sur les atomes d'hydrogène et de carbone :

$$Z = \frac{Y_C + Y_H - (Y_C + Y_H)^O}{(Y_C + Y_H)^F - (Y_C + Y_H)^O} \quad (2)$$

L'exposant  $F$  pour *fuel* indique que les valeurs sont prises dans le carburant pur, alors que l'exposant  $O$  pour *oxidizer* indique que les valeurs sont prises dans le mélange oxydant.  $Y_C$  et  $Y_H$  désignent respectivement les fractions massiques de carbone et d'hydrogène et peuvent s'exprimer comme (définition équivalente pour  $Y_H$ ) :

$$Y_C = \mathcal{M}_C \sum_i \frac{n_C^i Y_i}{\mathcal{M}_i} \quad (3)$$

où  $\mathcal{M}_C$  désigne la masse atomique du carbone,  $\mathcal{M}_i$  la masse molaire de l'espèce  $i$ ,  $i$  étant l'indice de sommation sur les espèces constituant le mélange, et  $n_C^i$  désigne le nombre d'atomes de carbone dans l'espèce  $i$ . Pour un hydrocarbure classique réagissant avec l'air, la quantité  $(Y_C + Y_H)^F$  est égale à 1, tandis que le terme  $(Y_C + Y_H)^O$  est nul. Par conséquent, l'équation 2 se simplifie généralement pour donner  $Z = Y_C + Y_H$ .

L'utilisation d'un modèle de chimie tabulée permet de décrire les processus chimiques de façon détaillée tout en conservant un coût CPU raisonnable. On vient toutefois d'évoquer que la dimension de la table pouvait croître avec la complexité de l'écoulement réactif que l'on souhaite calculer. Les foyers aéronautiques sont justement le cœur de nombreux phénomènes physiques venant s'ajouter aux réactions chimiques. Les transferts radiatifs peuvent ainsi jouer un rôle important au niveau de la redistribution de l'énergie au sein de l'écoulement. Le carburant est injecté sous forme liquide, ce qui implique une forte interaction entre les gouttes de carburant et la flamme, en plus de forts gradients de richesse locale. Le kérosène est composé de molécules carbonées assez longues, susceptibles de produire des particules de suie qui, en plus de créer une pollution redoutable, agissent sur l'écoulement au travers des transferts radiatifs. La géométrie des chambres de combustion est conçue de façon à induire des écoulements fortement turbulents avec d'une part la présence de zones de recirculation mettant en jeu une très grande variété d'échelles temporelles au sein de l'écoulement, et d'autre part des effets d'étirement et de mélange, qui génèrent des phénomènes transitoires comme l'extinction ou le réallumage.

Le modèle de chimie tabulée type FPI-FGM implémenté dans le code CEDRE par Savre [92] ne permet pas de tenir compte de l'ensemble de ces effets dans les simulations. Il est donc nécessaire de poursuivre son développement en fonction des spécificités de l'écoulement dans les foyers aéronautiques, de façon à modéliser correctement ces phénomènes qui peuvent avoir une influence significative sur les niveaux de polluants en sortie du foyer. De plus, la modélisation de certains de ces polluants, notamment les oxydes d'azotes et les particules de suie, n'est pas nativement prise en compte par le modèle FPI-FGM, les oxydes d'azotes, parce qu'ils peuvent avoir un temps de formation très long (NO dit « thermique »), les particules de suie parce qu'elles font intervenir des mécanismes de formation supplémentaires par rapport aux réactions chimiques, mécanismes qui ne sont pas décrits dans les cinétiques utilisées pour générer la table FPI-FGM. Un effort de modélisation supplémentaire est donc à prévoir pour ces espèces.

L'ensemble des développements et les calculs de validation associés effectués dans le cadre de cette thèse sont présentés en première partie de ce mémoire. On présente dans un premier chapitre la méthode d'implémentation indirecte du modèle type FPI-FGM dans CEDRE, c'est-à-dire le couplage de la table via les termes source chimiques d'un nombre réduit d'espèces à transporter. Dans un deuxième chapitre, on s'intéresse à l'extension du modèle de chimie tabulée au régime de diffusion, puisque jusqu'à présent (Savre [92]), seuls les régimes prémélangé, ou partiellement prémélangé associé à des gradients de richesse modérés ont été considérés. Le chapitre suivant est consacré à la modélisation de la formation des suies au moyen du couplage du modèle de chimie tabulée avec le modèle de Leung et al.[58] qui offre une description simplifiée des mécanismes de formation des suies. Vient ensuite un chapitre traitant de l'adaptation de la méthode de génération des tables chimiques pour prendre en compte les temps caractéristiques relativement long d'espèces comme les  $\text{NO}_x$ . On

décrit ensuite l'utilisation du modèle de chimie tabulée dans le cadre d'une injection du carburant sous forme liquide. Pour conclure cette première partie du mémoire, un dernier chapitre traite de la modélisation de l'interaction chimie-turbulence avec une chimie tabulée, dans le cas d'une approche « simulation aux grandes échelles » (LES). La seconde partie de ce mémoire présente l'utilisation du modèle de chimie tabulée de CEDRE pour la simulation d'une application semi-industrielle représentative des foyers aéronautiques civils. Il s'agit d'une chambre de combustion dotée d'un injecteur swirlé étagé multi-points, instrumentée dans le cadre du projet européen TLC (Towards Lean Combustion [100]). Cette configuration présente l'avantage de reproduire des conditions de pression et température représentatives de différentes phases de vol d'un avion commercial, d'être équipée d'une technologie d'injection que l'on retrouvera sur les nouvelles générations de moteur, et a fait l'objet de mesures expérimentales concernant les niveaux de polluants en sortie et au sein du foyer. On s'intéresse notamment, dans cette partie du mémoire, à la capacité du modèle de chimie tabulée à prédire correctement les émissions polluantes de ce foyer.

Notons que les développements portant sur le modèle de chimie-tabulée de CEDRE s'inspirent de modèles autres que FPI-FGM, qui partagent tout de même de nombreuses similitudes avec ce dernier : tous reposent sur l'hypothèse de flammelette et sur la tabulation de la chimie. C'est pourquoi, dans la suite de ce mémoire, on fera référence au modèle de chimie tabulée de CEDRE sous le nom générique de FTC (Flamelet Tabulated Chemistry).

Le code CEDRE utilisé comme support de ces travaux de thèse, est présenté en annexe A. On fera également souvent référence dans ce mémoire au solveur CHARME qui est le solveur de la phase gazeuse du code CEDRE dans lequel les développements du modèle FTC ont été implémentés, et qui est également présenté en A.

## Première partie

# Développement du modèle FTC pour la prédiction de polluants dans les chambres de combustion aéronautiques



# CHAPITRE 1

## Problématiques liées au couplage indirect entre le code de calcul et la table FTC

Dans ce chapitre, on propose des solutions pour résoudre les problèmes de conservativité et de déviation de la composition par rapport aux trajectoires tabulées. Ces problèmes apparaissent du fait que l'approche FTC introduite dans le code d'aérothermochimie CEDRE est une approche indirecte où les échanges entre le solveur CFD et la table chimique se font via les termes source des équations de transport des espèces. Les solutions proposées reposent sur une méthode simple, issue de la littérature, et adaptée au contexte CEDRE, qui assure la conservation de la masse du mélange gazeux. On lui adjoint une méthode de sélection des espèces transportées par le solveur CFD qui permet de limiter la déviation des propriétés thermodynamiques du mélange constitué des seules espèces sélectionnées par rapport à celles du mélange réel. On discute également dans cette section de la méthode de relaxation de la composition vers les trajectoires tabulées, qui est aussi liée à l'implémentation indirecte du modèle FTC. La validation de cette stratégie d'implémentation est effectuée sur des calculs de flamme laminaire. Dans un second temps, on développe une méthode de modélisation thermodynamique des espèces non transportées de la table afin de disposer d'une solution permettant d'éviter la dérive des propriétés thermodynamiques du mélange, même lorsque le nombre d'espèces transportées est très limité. La validation de cette solution est également effectuée sur des calculs de flamme laminaire.

### Sommaire

<b>1.1 Problèmes de conservativité liés à la technique d'implémentation indirecte du modèle de chimie tabulée</b>	<b>10</b>
1.1.1 Conservation de la masse	11
1.1.2 Conservation de l'énergie	11
1.1.3 Propriétés de transport	12
1.1.4 Méthode de conservation de la masse et de l'énergie retenue dans CEDRE	13
<b>1.2 Déviation de la concentration des espèces par rapport aux trajectoires tabulées - consistance des termes sources vis-à-vis de la composition du mélange</b>	<b>13</b>
1.2.1 Terme source chimique reconstruit	13
1.2.2 Terme source chimique tabulé avec terme de relaxation	14
1.2.3 Méthode hybride d'évaluation du terme source	16
1.2.4 Bilan de l'implémentation indirecte du modèle FTC et validation	17
<b>1.3 Modélisation thermodynamique du mélange d'espèces non transportées au moyen d'une espèce fictive.</b>	<b>20</b>
<b>Bilan</b>	<b>25</b>

## 1.1 Problèmes de conservativité liés à la technique d'implémentation indirecte du modèle de chimie tabulée

Les méthodes de type FTC mettent à profit le fait que sous certaines hypothèses, dans les zones réactives, la composition du mélange peut-être entièrement déterminée à partir d'un nombre réduit de variables ( $c$  et  $Z$ , par exemple) pour ne transporter effectivement que ces dernières. Cette manière de procéder possède des avantages (identité stricte des états thermochimiques entre le code de calcul et la table, nombre d'équations de transport réduit), mais également un inconvénient majeur : il ne s'agit plus d'un modèle de combustion turbulente à strictement parler, mais d'un modèle de thermochimie dont les limites sont celles de l'expérience de base. Ainsi, ce type d'approche, très utile pour effectuer un travail précis dans des configurations où l'essentiel des effets thermodynamiques est imposé par la combustion, peut trouver ses limites lorsque ce n'est plus le cas (variations de masse volumique liées au nombre de Mach par exemple, perturbations acoustiques<sup>1</sup>).

C'est la raison pour laquelle, dans ce travail de thèse, une autre approche a été retenue. Dans cette approche, introduite dans le code CEDRE par Savre [92], le couplage entre le code de calcul et la table est indirect. Autrement dit, un jeu d'espèces considéré comme représentatif du mélange (nous reviendrons plus en détail sur ce point) est sélectionné parmi les espèces de la cinétique chimique utilisée pour générer la table. Les équations de transport de ces espèces « majoritaires » sont résolues par le solveur compressible CHARME, et ce sont les termes source chimiques intervenant dans ces équations, qui sont extraits de la table. La variable d'avancement normalisée  $c$  est alors recalculée à partir de ces espèces au lieu d'être obtenue par la résolution d'une équation de transport. On résout également une équation de transport pour la fraction de mélange  $Z$ .

Plutôt que d'être extraites de la table, les propriétés thermodynamiques du mélange sont recalculées dans CEDRE, à partir des fractions massiques et de la température obtenues par la résolution des équations de transport. Cela apporte donc une certaine souplesse dans l'utilisation du modèle. Par exemple, il est possible d'inclure un col sonique, souvent présent dans les dispositifs expérimentaux dans le domaine de calcul. La masse volumique étant recalculée, elle prend en compte la variation de pression au passage du col. On note également que les fluctuations des propriétés du fluide sont directement retranscrites par le modèle thermodynamique, ce qui permet d'avoir une réponse correcte aux perturbations telles que celles produites par les ondes acoustiques. Seule une contrainte sur la pression dans la zone de flamme doit être respectée. Là où s'appliquent les termes source chimique tabulés, la pression doit être la même que celle de la table, pour que les taux de réaction qui en sont extraits soient corrects.

Du point de vue de l'écriture du code, une implémentation directe de la chimie dans CEDRE entraînerait des difficultés. En effet, de nombreuses opérations devraient être particularisées pour le modèle FTC. Il s'agit par exemple des échanges entre les solveurs, puisque si  $c$  et  $Z$  étaient transportés dans CHARME, sans que les fractions massiques des espèces soient obtenues par une équation de transport, la composition chimique transmise aux autres solveurs devrait être extraite de la table dans les procédures d'échanges. Notons que cette information (composition du mélange) est essentielle pour un couplage avec les solveurs de rayonnement, ou de phase dispersée. Avec une implémentation directe de FTC, les conditions aux limites devraient également être particularisées, ainsi que le calcul des propriétés thermodynamiques et de transport que l'on vient d'évoquer. Cela peut même devenir assez compliqué dans le cas, par exemple, d'un fluide multiphasique où une partie des propriétés (celles de la phase gazeuse) serait tabulée et le reste calculé. Le code CEDRE étant utilisé dans de nombreuses applications multiphysiques, il était important que le modèle de chimie tabulée soit suffisamment souple pour être utilisable dans ces applications sans introduire de contraintes dans la mise en œuvre des calculs, ou dans le maintien du code, d'où le choix de l'implémentation via les termes sources chimiques.

Néanmoins, cette implémentation indirecte a aussi des inconvénients, dont il faut tenir compte. Le principal inconvénient de cette méthode est que, sans traitement particulier, la masse, l'énergie et

---

1. La prise en compte des effets acoustiques est rendue possible par la méthode TTC [104], mais puisqu'elle se limite par construction aux variations suffisamment faibles pour être linéarisées, cette méthode ne permet pas de lever toutes les contraintes de la tabulation directe

la composition atomique ne sont plus conservées lors des réactions chimiques dans le code CFD (ici CEDRE). Par ailleurs, cette implémentation entraîne une augmentation du coût de calcul, car même si le nombre d'espèces transportées est nettement réduit par rapport aux nombre d'espèces de la cinétique chimique tabulée, il y a tout de même des équations supplémentaires à résoudre par rapport à une implémentation directe. Nous allons dans ce qui suit nous intéresser à chacune de ces difficultés, puis au traitement mis en place dans CEDRE pour résoudre ces problèmes.

### 1.1.1 Conservation de la masse

La conservation de la masse est normalement assurée par le modèle de chimie qui impose usuellement que la somme des taux de création et de consommation des espèces soit nulle. Si l'on considère une cinétique faisant intervenir  $N$  espèces, on a :

$$\sum_{i=1}^N \dot{\omega}_i = 0. \quad (1.1)$$

Dans le cadre d'un modèle FTC indirect, les termes sources stockés dans la table comme fonction de  $(Z, c)$  respectent aussi l'équation 1.1. Néanmoins, l'intérêt principal du modèle est de permettre de ne transporter qu'un sous-ensemble de  $M$  espèces parmi les  $N$  espèces de la cinétique chimique utilisée pour générer la table. On a donc généralement :

$$\sum_{i=1}^M \dot{\omega}_i \neq 0. \quad (1.2)$$

Pour remédier à ce problème, Colin et al. [18] proposent d'utiliser une méthode de correction des termes source permettant de conserver la masse, mais aussi les atomes. Une espèce est ainsi choisie pour la conservation de chaque atome. On attribue à cette espèce un terme source destiné à compenser la perte ou création de cet atome induite par le suivi d'un nombre réduit d'espèces chimiques dans le code CFD :

$$\dot{\omega}_i = \frac{\mathcal{M}_i}{x_i} \times \left[ - \sum_{k=1, k \neq i}^M \left( x_k \frac{\dot{\omega}_k}{\mathcal{M}_k} \right) \right] \quad (1.3)$$

où  $k$  est l'indice des espèces contenant l'atome  $x$ ,  $x_i$  (resp.  $x_k$ ) le nombre d'atomes  $x$  dans l'espèce  $i$  (resp.  $k$ ), et  $\mathcal{M}_i$  (resp.  $\mathcal{M}_k$ ) la masse molaire de l'espèce  $i$  (resp.  $k$ ). Dans nos applications, où la combustion fait intervenir l'air et des hydrocarbures, on doit conserver les atomes C, H, O et N. Il faut donc y affecter quatre espèces, sur lesquelles est répartie la masse des  $N-M$  espèces de la cinétique qui ne sont pas transportées.

### 1.1.2 Conservation de l'énergie

La méthode consistant à imposer la conservation de la masse en distribuant la masse manquante des espèces non transportées sur certaines des espèces transportées a une répercussion sur la partie énergétique du calcul. On rappelle tout d'abord que l'enthalpie d'un mélange d'espèces peut être exprimée comme :

$$h_{mel} - h_{f_{mel}}^0 = \int_{T_{ref}}^T c_{p_{mel}} dT', \quad (1.4)$$

où l'indice  $mel$  fait référence au mélange d'espèces,  $h_f^0$  est l'enthalpie de formation,  $T_{ref}$  est la température de référence à laquelle sont définies les enthalpies de formation des espèces et  $c_p$  est la capacité calorifique massique à pression constante.

Dans les simulations numériques multi-espèces, la température est obtenue par résolution de l'équation (1.4). Dans le cas où toutes les espèces intervenant dans la cinétique sont transportées, on a :

$$h_{f_{mel}}^0 = \sum_{i=1}^N Y_i h_{f_i}^0 \quad \text{et} \quad c_{p_{mel}} = \sum_{i=1}^N Y_i c_{p_i}, \quad (1.5)$$

où  $N$  est le nombre d'espèces intervenant dans la cinétique,  $Y_i$  est la fraction massique de l'espèce  $i$ ,  $h_{f_i}^0$  son enthalpie de formation et  $c_{p_i}$  sa capacité calorifique massique à pression constante. Avec la technique consistant à redistribuer la masse des espèces non transportées, les quantités  $h_{f_{mel}}^0$  et  $c_{p_{mel}}$  sont évaluées ainsi :

$$h_{f_{mel}}^0 = \sum_{i=1}^M Y_i h_{f_i}^0 \quad \text{et} \quad c_{p_{mel}} = \sum_{i=1}^M Y_i c_{p_i}, \quad (1.6)$$

où  $M$  est le nombre d'espèces transportées, évidemment inférieur à  $N$ . Outre le fait que les sommations portent sur un nombre inférieur à  $N$ , les fractions massiques sont différentes de celles figurant dans les équations (1.5) puisqu'elles prennent en compte la redistribution de masse sur les espèces transportées. Dans ces conditions, on conçoit que l'utilisation des relations (1.6) pour fermer l'équation (1.4) puisse conduire à l'obtention d'une température différente de celle résultant de l'utilisation des relations (1.5) qui elles, prennent en compte toutes les espèces. L'évaluation de cette déviation artificielle de la température est détaillée en annexe C. Comme montré ci-après (section 1.2.4, figure 1.1), ce biais peut conduire à des erreurs de plusieurs centaines de Kelvin.

Pour remédier à cela, on propose de sélectionner chaque espèce à transporter en fonction, d'une part, de l'écart entre son enthalpie de formation  $h_{f_i}^0$  et celle du mélange d'espèces la remplaçant<sup>2</sup>,  $h_{f_{CHON,i}}^0$ , et d'autre part, de l'écart entre sa capacité calorifique  $c_{p_i}$  et celle,  $c_{p_{CHON,i}}$  de ce même mélange. On peut en effet montrer (voir annexe C.2) que la déviation de température dans le code CFD est fonction de ces deux écarts (sur l'enthalpie de formation et sur la capacité calorifique). Selon cette méthode, les espèces sélectionnées pour être transportées dans le code CFD sont celles qui satisfont l'inégalité suivante, au moins en un point des différentes flammes prises en compte dans la table chimique :

$$\frac{1}{T^{TAB}} \frac{Y_i \cdot |c_{p_{CHON,i}} - c_{p_i}| \cdot |T^{TAB} - T^{ref}| + Y_i \cdot |h_{f_{CHON,i}}^0 - h_{f_i}^0|}{\sum_{i=1}^N Y_i c_{p_i}^{TAB}} > \alpha \quad (1.7)$$

où  $\alpha$  est un nombre positif arbitraire qui pilote le nombre d'espèces sélectionnées, et  $T^{ref}$  la température à laquelle est évaluée l'enthalpie de formation des espèces. Le critère de sélection proposé ici a un caractère local dans l'espace défini par les coordonnées de la table chimique, à savoir  $Z$  et  $c$ . Ainsi, même si une espèce n'impacte le calcul de la température que dans une zone d'étendue limitée en  $Z$  et  $c$ , elle sera tout de même sélectionnée pour être transportée. On peut toutefois appliquer une restriction sur la plage de richesse  $[\phi_{min}; \phi_{max}]$  sur laquelle on effectue la sélection afin de ne pas retenir inutilement des espèces sélectionnées sur la base de richesses non atteintes dans le calcul CFD.

### 1.1.3 Propriétés de transport

De la même manière que pour l'énergie, le remplacement de la masse d'une espèce non transportée par la même masse d'un mélange d'espèces fermant le bilan atomique impacte les propriétés de transport, telles que la viscosité du mélange, ou encore sa conductivité thermique. Dans la version actuelle du code CEDRE, la conductivité thermique ou les coefficients de diffusion moléculaire, sont exprimés en fonction la viscosité des espèces, en utilisant une loi d'Eucken<sup>3</sup> ou une hypothèse de Prandtl constant<sup>4</sup> pour la conductivité thermique, et une hypothèse de Schmidt constant<sup>5</sup> pour la diffusion des espèces. La loi d'Eucken n'a pas été utilisée dans ce travail, et avec les hypothèses de Prandtl et Schmidt constants, l'erreur commise sur l'évaluation de la conductivité thermique du mélange et sur le calcul du coefficient de diffusion des espèces est proportionnelle à l'erreur portant sur la viscosité du mélange. L'ensemble des déviations des propriétés de transport liées au transport d'un jeu réduit d'espèce dans CEDRE est donc uniquement lié à la modification de la viscosité moléculaire du mélange. Or, dans la

2. Ce mélange est constitué des espèces fermant le bilan atomique pour C, H, O et N dont les fractions massiques varie pour chaque espèce  $i$ . Le calcul des grandeurs  $h_{f_{CHON,i}}^0$  et  $c_{p_{CHON,i}}$  est détaillé en annexe C.1.

3.  $\lambda_i = \mu_i c_{p,i}(T) + \frac{5R}{4M_i}$

4.  $\lambda_i = \frac{\mu_i}{P_r} c_{p,i}(T)$

5.  $D_i = \frac{\mu_i}{Sc_i}$

quasi totalité des applications industrielles, la diffusion turbulente est très grande devant la diffusion laminaire. C'est pourquoi, on fait l'hypothèse que l'erreur induite sur les propriétés de transport est négligeable dans les applications visées, et aucun traitement particulier n'est effectué dans le modèle FTC concernant ce point.

#### 1.1.4 Méthode de conservation de la masse et de l'énergie retenue dans CEDRE

On a vu dans la section 1.1.1 qu'il existait des méthodes de redistribution de la masse des espèces non transportées permettant d'assurer la conservation des atomes. L'essentiel étant, de notre point de vue d'énergéticien, de reproduire le bon niveau de température dans un mélange doté des bonnes propriétés thermophysiques, des précautions ont été prises pour assurer une conservation globale de la masse et une évaluation correcte de la température et de la capacité calorifique du mélange. Ainsi, la masse des espèces non transportées est redistribuée sur une espèce majoritaire en masse et peu réactive, à savoir l'azote  $N_2$ . Par construction, le taux de réaction de l'azote  $\dot{\omega}_{N_2}$  est donné par :

$$\dot{\omega}_{N_2} = - \sum_{i=1}^{M-1} \dot{\omega}_i, \quad (1.8)$$

où  $\dot{\omega}_i$  est le taux de réaction de chacune des  $M - 1$  espèces transportées autres que l'azote. Dans ces conditions, les espèces sélectionnées pour être transportées sont celles qui vérifient au moins en un point de la table l'inégalité :

$$\frac{1}{T^{TAB}} \frac{|c_{p_{N_2,i}} - c_{p_i}| |T^{TAB} - T^{ref}| + |h_{f_{N_2,i}}^0 - h_{f_i}^0|}{\sum_{i=1}^N Y_i c_{p_i}^{TAB}} > \alpha, \quad (1.9)$$

On pourrait objecter que cette méthode de conservation de la masse risque de conduire à une mauvaise évaluation de la richesse locale, contrairement à la méthode assurant la conservation des atomes. Cependant, dans l'implémentation retenue dans CEDRE, la fraction de mélange est transportée, ce qui assure une évaluation correcte de la richesse locale. Par ailleurs, comme cela sera expliqué par la suite, les fractions massiques des espèces transportées autres que  $N_2$  sont relaxées vers les valeurs tabulées, et sont donc cohérentes avec la richesse locale calculée à partir de  $Z$ .

En résumé, la redistribution de la masse sur  $N_2$  ne permet pas de conserver la masse de chaque atome, mais permet celle de la masse totale, n'impacte pas le calcul de la richesse locale, et impacte peu le calcul de la température et des propriétés thermophysiques du mélange.

La conservation de la masse n'était pas assurée dans la version implémentée dans CEDRE par Savre [92]. Pour limiter l'erreur induite, le jeu d'espèces transportées devait donc représenter l'essentiel de la masse du mélange, ce qui implique le transport d'un nombre important d'espèces, nuisant à la performance des calculs avec le modèle FTC. Le choix fait ici apporte d'avantage de souplesse dans la mise en œuvre de ce modèle, tout en garantissant la conservation de la masse. Il reste tout de même des contraintes sur le nombre d'espèces à transporter liées à la conservation des propriétés du mélange, pour assurer une évaluation correcte de sa température. En section 1.3 une méthode sera proposée pour lever ces contraintes.

## 1.2 Déviation de la concentration des espèces par rapport aux trajectoires tabulées - consistance des termes sources vis-à-vis de la composition du mélange

### 1.2.1 Terme source chimique reconstruit

Un autre problème de l'implémentation indirecte (via les termes sources) d'un modèle de type FTC est la difficulté à conserver la consistance entre la composition locale et la composition correspondante dans la table soit  $Y_i(\vec{x}) = Y_i^{TAB}[Z(\mathbf{x}), c(\mathbf{x})]$ . En effet, l'utilisation d'un tel modèle est basée sur une hypothèse de type flammelette, c'est à dire, que l'on suppose que la structure locale de la flamme

turbulente est la même que celle de la flamme mono-dimensionnelle laminaire résolue pour générer la table. Si c'est bien le cas, pour un écoulement adiabatique, on a :

$$\dot{\omega}_i(\mathbf{x}) = \dot{\omega}_i[\rho(\mathbf{x}), Y_i(\mathbf{x}), T(\mathbf{x})] = \dot{\omega}_i^{TAB}[Z(\mathbf{x}), c(\mathbf{x})] = \dot{\omega}_i[\rho^{TAB}(Z, c), Y_i^{TAB}(Z, c), T^{TAB}(Z, c)] \quad (1.10)$$

Évidemment, dans le cadre d'écoulements tri-dimensionnels turbulents, cette hypothèse peut ne pas être respectée strictement. Les gradients de vitesse et de concentration peuvent différer légèrement, impactant les flux convectifs et diffusifs des espèces. En conséquence, on observe une déviation de la concentration des espèces vis à vis des concentrations tabulées. On a donc  $Y_i(\mathbf{x}) \neq Y_i^{TAB}[Z(\mathbf{x}), c(\mathbf{x})]$ , ce qui implique que les taux de réaction extraits de la table sont découplés de la composition locale, et donc erronés :

$$\dot{\omega}_i^{TAB}[Z(\mathbf{x}), c(\mathbf{x})] \neq \dot{\omega}_i[\rho(\mathbf{x}), Y_i(\mathbf{x}), T(\mathbf{x})] \quad (1.11)$$

Pour éviter cela, Colin et al. [18] utilisent des termes sources chimiques reconstruits plutôt que tabulés. Il définissent ainsi les termes source comme :

$$\dot{\omega}_i(Z, c) = \rho \frac{Y_i^{TAB}(Z, c^{t+\tau}) - Y_i}{\tau} \quad (1.12)$$

où  $\tau$  est un temps caractéristique choisi par l'utilisateur, et  $c^{t+\tau}$  est une estimation de l'avancement à l'instant  $t + \tau$ , définie comme  $c^{t+\tau} = c(t) + \tau\Omega_c(Z, c)$ ,  $\Omega_c(Z, c)$  étant le taux de production de  $c$ . L'avantage de ce terme source reconstruit est qu'il assure une relaxation de la composition locale vers les trajectoires tabulées. Néanmoins l'évaluation de  $c^{t+\tau}$  ne prend en compte que la chimie. L'avancement  $c(t + \tau)$  à l'instant  $t + \tau$  sera différent de l'avancement estimé  $c^{t+\tau}$  du fait des flux convectifs et diffusifs. Par ailleurs, le temps caractéristique  $\tau$  peut être difficile à choisir. Galpin [32] recommande une valeur de cinq fois le pas de temps. Cette valeur obtenue sur un cas simple de réacteur prémélangé, permettait d'obtenir une convergence assez rapide vers les trajectoires tabulées, tout en limitant les oscillations à l'état stationnaire. Cette façon de procéder soulève deux questions. D'une part, le terme source devient fonction du pas de temps utilisé pour la simulation, or le résultat d'une simulation ne doit pas dépendre du pas de temps. D'autre part, le choix de ce temps  $\tau$  pilote directement la dynamique de la flamme puisqu'il change la raideur des termes source, ce qui est ennuyeux, compte tenu du caractère arbitraire du choix de  $\tau$ .

### 1.2.2 Terme source chimique tabulé avec terme de relaxation

Savre et al. [93] proposent une méthode alternative pour assurer la relaxation vers les trajectoires tabulées. En linéarisant les termes sources chimiques tabulée autour des fractions massiques tabulées, et en négligeant la dépendance de  $\dot{\omega}_i$  vis-à-vis des espèces autres que  $i$ , les taux de réaction peuvent être exprimés comme :

$$\dot{\omega}_i = \dot{\omega}_i^{TAB} - \left. \frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial Y_i} \right|^{TAB} (Y_i^{TAB} - Y_i) \quad (1.13)$$

Pour un réactif, le taux de réaction  $\dot{\omega}_i$  est négatif et sa vitesse de réaction croît quand sa fraction massique  $Y_i$  augmente. Pour un produit, le taux de réaction  $\dot{\omega}_i$  est positif, et sa vitesse de réaction diminue quand sa fraction massique  $Y_i$  augmente. Dans les deux cas, la dérivée  $\frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial Y_i}$  est donc négative.

On peut ainsi définir un temps chimique par espèce  $\tau_c^i = -\frac{1}{\rho} \left( \left. \frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial Y_i} \right|^{TAB} \right)^{-1}$ , ce qui donne :

$$\dot{\omega}_i = \dot{\omega}_i^{TAB} + \rho \frac{(Y_i^{TAB} - Y_i)}{\tau_c^i}. \quad (1.14)$$

Le terme source est donc composé du terme tabulé et d'un terme de relaxation vers les trajectoires tabulées noté dans la suite  $\dot{\omega}_i^{relax}$ . L'avantage de cette méthode est d'être basée sur un temps dont la valeur n'a plus à être fixée de manière arbitraire par l'utilisateur. De plus, quand l'écart entre la composition locale et tabulée diminue, on tend vers le terme source tabulé, dont la raideur ne dépend que de la physique de problème. On peut donc, de ce point de vue, s'attendre à une meilleure reproduction de la dynamique de la flamme qu'avec la méthode précédente. Le terme de relaxation apparait comme un terme correctif dont la valeur absolue est faible par rapport à celle du taux de

réaction pris dans la table, tout au moins tant que l'hypothèse de flammelette est respectée (dans ce cas, les concentrations de la table s'écartent peu des valeurs tabulées). Compte tenu de ses avantages, c'est cette approche qui a été retenue pour être implémentée dans le code CEDRE.

Néanmoins, il faut garder à l'esprit que les déviations entre la composition locale et tabulée sont pilotées par des flux diffusifs et convectifs. Il n'est donc pas garanti que le terme de relaxation rende parfaitement compte de ces déviations par rapport à la table, puisque le temps  $\tau_c^i$  est purement chimique. Par ailleurs, le fait d'introduire des temps caractéristiques  $\tau_c^i$  qui diffèrent selon l'espèce  $i$  peut conduire à une évaluation non satisfaisante de la variable  $c$  comme nous allons le constater ci-après. Or, une évaluation correcte de  $c$  est cruciale puisque c'est une variable d'entrée de la tabulation. On rappelle que  $c$  est définie comme une combinaison linéaire des fractions massiques de certaines espèces, choisie de sorte que  $c$  soit une fonction monotone croissante de l'avancement du processus chimique global :

$$c = \frac{\hat{c}}{\hat{c}^{eq}} = \frac{\sum_{k=1}^{n_c} \gamma_k Y_k}{\hat{c}^{eq}}, \quad (1.15)$$

où  $n_c$  est le nombre d'espèces intervenant dans la combinaison linéaire, et les  $\gamma_k$  des coefficients constants<sup>6</sup>. Dans le cas d'une implémentation directe de FTC, la variable d'avancement normalisée  $c$  est solution d'une équation de transport, dont le terme source est obtenu à partir de la table chimique :

$$\dot{\omega}_c = \dot{\omega}_c^{TAB}(Z, c). \quad (1.16)$$

Le terme  $\dot{\omega}_c^{TAB}(Z, c)$  est par définition une combinaison linéaire des termes source  $\dot{\omega}_k^{TAB}$  des espèces composant la variable d'avancement :

$$\dot{\omega}_c^{TAB}(Z, c) = \frac{1}{\hat{c}^{eq}} \sum_{k=1}^{n_c} \gamma_k \dot{\omega}_k^{TAB}(Z, c). \quad (1.17)$$

Dans l'implémentation retenue pour FTC dans CEDRE, l'équation de transport pour  $c$  n'est pas résolue puisque sa valeur est directement recalculée à partir des fractions massiques. Afin d'éviter que cette valeur de  $c$  ne dépende de la technique d'évaluation des termes source chimiques, on s'arrange pour conserver une évolution de  $c$  similaire à celle que l'on obtiendrait en résolvant son équation de transport. Ainsi, on choisit de garder vraie l'égalité  $\dot{\omega}_c = \dot{\omega}_c^{TAB}$  ce qui, en tenant compte des équations (1.14) et (1.15) se réécrit :

$$\dot{\omega}_c = \frac{1}{\hat{c}^{eq}} \sum_{k=1}^{n_c} \gamma_k (\dot{\omega}_k^{TAB} + \dot{\omega}_k^{relax}) = \dot{\omega}_c^{TAB}. \quad (1.18)$$

ce qui se traduit par le fait que les termes de relaxation des espèces intervenant dans la définition de  $c$  doivent respecter la condition :

$$\sum_{k=1}^{n_c} \gamma_k \dot{\omega}_k^{relax} = \sum_{k=1}^{n_c} \rho \gamma_k \frac{Y_k^{TAB} - Y_k}{\tau_c^k} = 0. \quad (1.19)$$

Si tous les temps caractéristiques  $\tau_c^k$  sont égaux, l'équation (1.19) devient :

$$\sum_{k=1}^{n_c} \gamma_k Y_k = \sum_{k=1}^{n_c} \gamma_k Y_k^{TAB}, \quad (1.20)$$

soit  $c = c^{TAB}$ . Cette dernière égalité est vraie par construction, puisque la valeur  $c$  recalculée à partir des fractions massiques est utilisée pour extraire les données de la table en un point  $c^{TAB} = c$ . En revanche, lorsque les temps  $\tau_c^k$  diffèrent d'une espèce à l'autre, l'égalité  $\dot{\omega}_c = \dot{\omega}_c^{TAB}$  n'est plus vérifiée, rendant l'évolution de  $c$ , et donc la propagation de la flamme, dépendante de la méthode d'évaluation des termes source, ce qui n'est pas satisfaisant. Il semble donc préférable de considérer un temps de relaxation unique pour toutes les espèces transportées.

6. Il est courant d'utiliser  $\gamma_k = 1$ , ou encore  $\gamma_k = \frac{1}{\mathcal{M}_k}$ , où  $\mathcal{M}_k$  est la masse molaire de l'espèce  $k$ . La dimension de la variable  $\hat{c}^{eq}$  dépend donc de la variable utilisée, mais la variable d'avancement normalisée  $c$  reste sans dimension.

En outre, ne faire intervenir que des temps chimiques dans les termes de relaxation ne paraît pas totalement pertinent du fait que les écarts des fractions massiques transportées par rapport aux fractions massiques tabulées trouvent leur origine dans les transferts convectifs et diffusifs qui diffèrent dans le calcul CFD 3D vis-à-vis des flammelettes 1D tabulées. Il faudrait donc évaluer dans le calcul CFD des temps convectifs et diffusifs pour les introduire, avec une pondération à définir, dans la formulation des temps caractéristiques  $\tau_c^k$ . On préfère dans ce travail choisir un temps de relaxation unique  $\tau_c$  pour toutes les espèces, et défini par l'utilisateur. Ce choix conduit néanmoins à une difficulté similaire à celle rencontrée avec la formulation de Colin et al. [18], qui est la détermination du temps caractéristique  $\tau_c$  par l'utilisateur.

Parmi les difficultés que l'on peut rencontrer avec une implémentation directe du modèle FTC, il en est une qui concerne la discrétisation de la table. Galpin montre que le nombre de points nécessaire pour discrétiser les profils de fractions massiques issus des solutions de flammelettes est plus faible que pour la discrétisation des termes sources du fait de la raideur des gradients des taux de réaction. Cela conduit à une réduction de l'occupation mémoire de la table, lorsque l'on doit récupérer les fractions massiques dans la table plutôt que les taux de réaction. Néanmoins, ce constat est basé sur une discrétisation à pas constant du domaine en  $c$ . Nous utilisons dans ce travail une distribution des points en  $c$  fonction de la courbure des profils des taux de réaction issus des solutions de flammelettes, ce qui permet de diminuer le nombre de points nécessaires pour discrétiser correctement ces derniers (voir Annexe D).

En revanche, pour les espèces transportées, il faut prévoir de la place mémoire dans le calcul CFD à la fois pour la fraction massique  $Y_i^{TAB}$  et pour le terme source chimique tabulé  $\dot{\omega}_i^{TAB}$ . Comme le nombre d'espèces transportées est réduit, l'augmentation de l'occupation mémoire sera heureusement limitée.

### 1.2.3 Méthode hybride d'évaluation du terme source

Galpin [32] a proposé une méthode hybride entre celle basée sur l'utilisation directe du taux de réaction tabulé, et celle présentée en section 1.2.1 :

$$\dot{\omega}_i = \alpha \dot{\omega}_i^{TAB} + (1 - \alpha) \rho \frac{Y_i^{TAB}(Z, c^{t+\tau}) - Y_i}{\tau} \quad (1.21)$$

où  $\alpha \in [0, 1]$  est un coefficient de pondération choisi par l'utilisateur. L'idée est de tirer avantage des deux méthodes (contrôle du dégagement de chaleur et relaxation vers la trajectoire tabulée). On remarque que l'on obtient alors une formulation semblable à celle utilisée dans ce travail. Notons que cette méthode hybride donne un terme source qui tend vers  $\dot{\omega}_i^{TAB}$  quand la déviation par rapport aux trajectoires tabulées tend vers zéro, car le terme  $\frac{Y_i^{TAB}(Z, c^{t+\tau}) - Y_i}{\tau}$  est alors strictement égal à  $\dot{\omega}_i^{TAB}$  par construction. Cette méthode hybride, tout comme la méthode avec relaxation proposée dans cette thèse (section 1.2.2) donnera tout de même des termes source irréalistes en cas de déviation forte par rapport aux trajectoires tabulées. Afin de limiter ces déviations, il convient donc d'utiliser le modèle FTC dans des configurations qui respectent au mieux l'hypothèse de base de ce modèle, à savoir, l'hypothèse de flammelette, et ce quel que soit la formulation choisie pour les termes source.

Notons que la méthode de calcul des sources chimiques retenue dans cette étude, qui se situe dans la continuité de la thèse de Savre [92], impose de transporter la fraction de mélange pour conserver la richesse locale. Il faut cependant noter que la méthode proposée par Colin et reprise par Galpin, utilisant un terme source reconstruit et doté d'une correction conservant les atomes, permet a priori de conserver la richesse locale sans transport de  $Z$ . Cette dernière approche a donc été implémentée dans CEDRE et testée succinctement. C'est la version présentée en section 1.2.1 qui a été testée, et les termes sources chimiques obtenus semblaient alors présenter une forte sensibilité à la valeur du temps chimique choisi, conduisant à des solutions allant d'une flamme bien accrochée jusqu'à une flamme soufflée. La méthode hybride que l'on vient d'évoquer n'a pas été explorée car cette problématique n'était pas au cœur de cette thèse, dédiée à l'étude de la prévision des émissions polluantes. On a finalement conservé la méthode initiée par Savre, en lui apportant les améliorations décrites dans ce chapitre, car le surcoût engendré par le transport de la fraction de mélange reste tout à fait acceptable, et la méthode s'est avérée robuste sur l'ensemble des calculs réalisés.

## 1.2.4 Bilan de l'implémentation indirecte du modèle FTC et validation

L'implémentation du modèle se fait via les termes source chimiques que l'on exprime comme :

$$\dot{\omega}_i = \dot{\omega}_i^{TAB} + \rho \frac{(Y_i^{TAB} - Y_i)}{\tau_c} \quad (1.22)$$

où  $\tau_c$  est un temps caractéristique choisi par l'utilisateur. Le second terme du membre de droite doit être vu comme un terme correctif, dont la valeur absolue est faible par rapport à celle de  $\dot{\omega}_i^{TAB}$ , qui représente la contribution principale du terme source.

La conservation de la masse est assurée en sélectionnant une espèce (ici  $N_2$ ) sur laquelle est répercutée la masse des espèces non transportées de la table. Son terme source s'écrit donc :

$$\dot{\omega}_{N_2} = - \sum_i \dot{\omega}_{i=1}^{M-1} \quad (1.23)$$

où  $M$  est le nombre d'espèces transportées. Par conséquent, la masse d'azote transporté dans CEDRE est la somme de la masse d'azote tabulée et de la masse des espèces non transportées, soit :

$$Y_{N_2} = Y_{N_2}^{TAB} + \sum_{i=1}^{N-M} Y_i, \quad (1.24)$$

ce qui assure que la somme des fractions massiques transportées respecte :

$$\sum_{i=1}^M Y_i = 1 \quad (1.25)$$

Enfin, on doit limiter les erreurs sur la température liées au remplacement des espèces non transportées par une espèce aux propriétés thermodynamiques différentes. Pour cela, on sélectionne les espèces dont le remplacement entraîne une forte modification de la capacité calorifique massique et de l'enthalpie de formation du mélange. Cette sélection est basée sur le seuil  $\alpha$  choisi par l'utilisateur (voir section 1.1.2). Les espèces ainsi sélectionnées devront nécessairement être transportées.

L'effet de la valeur du seuil  $\alpha$  est étudié dans ce qui suit. Le cas test est une flamme laminaire  $C_{10}H_{22}$ -air prémélangée libre. La température des gaz frais est choisie aux alentours de 700 K et la pression est proche de 20 bar, donnant des conditions représentatives de celles pouvant être rencontrées dans les moteurs aéronautiques. La cinétique de Luche [60] contenant 91 espèces a été utilisée pour générer la table FTC. Différentes richesses de gaz frais ont été choisies pour les simulations. La plage balayée se situe dans la zone riche  $\phi \in [1, 5; 5]$  puisque, dans ce régime, de nombreuses espèces sont produites dans les gaz brûlés en plus des produits classiques de la combustion d'hydrocarbures  $H_2O$ ,  $CO$  ou  $CO_2$ . Cette situation permet donc de mettre en évidence les problèmes de modification de température causés par le remplacement des espèces tabulées par l'azote. Notons que, si la richesse globale des écoulements dans les foyers aéronautiques se situe plutôt dans le régime pauvre, certaines zones de l'écoulement peuvent tout de même atteindre des valeurs de richesse assez fortes. On peut voir par exemple dans les travaux de Dorey [23], que certaines zones de la flamme ont une richesse de l'ordre de  $\phi = 3.0$  dans la configuration TLC étudiée. Pour réaliser ces calculs avec CEDRE, le domaine est initialisé avec un profil de type discontinuité de contact avec des gaz frais dans la première moitié du domaine et des gaz de même richesse à l'équilibre dans la seconde moitié du domaine. La vitesse d'injection des gaz frais est choisie pour que la flamme soit en position stationnaire dans le domaine (ou que la propagation soit modérée). La vitesse d'injection est donc proche de la vitesse de flamme laminaire calculée au préalable dans Cantera [37].

Pour effectuer la sélection des espèces à transporter, deux valeurs du critère  $\alpha$  ont été essayées. On a également réalisé les calculs avec un jeu d'espèces réduit constitué des espèces d'une cinétique globale, typique de celles utilisées dans nos applications. On obtient ainsi trois jeux d'espèces qui sont listés dans le tableau 1.1.

La figure 1.1 présente la température des gaz brûlés en fonction de la richesse obtenue lors de la simulation d'une flamme laminaire 1D avec le code CEDRE, d'une part, et le code Cantera [37] (qui

Critère de sélection	Jeu d'espèces correspondant	Nombre d'espèces
espèces de la cinétique réduite (« jeu d'espèces réduit »)	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> O <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O CO <sub>2</sub> CO N <sub>2</sub>	6
$\alpha = 5\%$	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> O <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O CO <sub>2</sub> CO N <sub>2</sub> H <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> CH <sub>4</sub>	10
$\alpha = 1\%$	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> O <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O CO <sub>2</sub> CO N <sub>2</sub> H <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> CH <sub>4</sub> C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> H O CH <sub>2</sub> O	15

TABLE 1.1 – Liste des espèces de la table FTC générée avec la cinétique de Luche [60] qui sont transportées dans le calcul CEDRE selon le seuil  $\alpha$  choisi.

est utilisé pour générer les tables FTC), d'autre part. Trois calculs CEDRE ont été réalisés, l'un avec le jeu d'espèce de la cinétique réduite, et deux autres avec les valeurs respectives de 5 % et 1 % pour le critère de sélection des espèces. Deux calculs Cantera ont été réalisés, l'un avec la même cinétique que celle utilisée dans les calculs CEDRE, à savoir la cinétique de Luche [60], mais en chimie non tabulée, donc sans les hypothèse de CEDRE liées au suivi d'un nombre réduit d'espèces dans la partie CFD, l'autre, avec la cinétique à deux étapes de Westbrook et Dryer [110], appliquée au carburant C<sub>10</sub>H<sub>22</sub>. Du fait qu'il ne contient pas d'hypothèse sur le jeu d'espèces, on peut considérer que le premier calcul Cantera est le calcul de référence. La figure 1.1 indique que le calcul CEDRE réalisé avec la valeur de 1 % pour le critère de sélection est en parfait accord avec le calcul de référence. Avec une valeur de 5 %, on note un certain écart, qui varie en fonction de la richesse, mais reste inférieur à 9 %. Ce résultat n'est pas totalement satisfaisant mais est tout de même nettement meilleur que ceux obtenus avec CEDRE et un jeu d'espèces réduit, et que ceux obtenus avec Cantera et la cinétique réduite de Westbrook et Dryer. Notons tout de même que le transport d'un nombre important d'espèces dans CEDRE induit un coût de calcul non négligeable. On constate ainsi pour un schéma en temps implicite d'ordre 1, une augmentation du temps CPU d'environ 100 % lorsqu'on passe du jeu réduit d'espèces à celui correspondant à  $\alpha = 5\%$ , et d'environ 200 % lorsqu'on passe du jeu réduit au jeu d'espèces correspondant à  $\alpha = 1\%$ .

La figure 1.2 présente l'écart relatif obtenu pour la vitesse de flamme en fonction de la richesse pour la même flamme laminaire 1D que précédemment. Cet écart est calculé en prenant comme référence la vitesse de flamme obtenue dans le calcul Cantera réalisé avec la cinétique de Luche. Trois courbes sont présentées. Elles sont relatives à des calculs CEDRE en chimie tabulée, et obtenues comme précédemment avec le jeu d'espèces réduit pour l'une, avec le jeu d'espèces correspondant à  $\alpha = 5\%$ , pour l'autre, et avec le jeu correspondant à  $\alpha = 1\%$  pour la dernière. Comme précédemment, l'écart le plus important est obtenu avec le jeu d'espèce réduit, tandis que les jeux d'espèces obtenus avec les critères de sélection de 5 % et 1 % permettent de réduire significativement cette erreur dans l'estimation de la vitesse de flamme. Cela s'explique par le fait qu'avec le jeu d'espèces réduit, les propriétés thermophysiques du mélange, en particulier les propriétés diffusives, sont mal évaluées. En effet, l'évaluation de ces propriétés requiert une prédiction correcte de la température locale de l'écoulement. Or, avec le jeu d'espèces réduit, cette température est fortement surestimée comme l'indique la figure 1.1, d'où une forte surestimation de la vitesse de flamme.

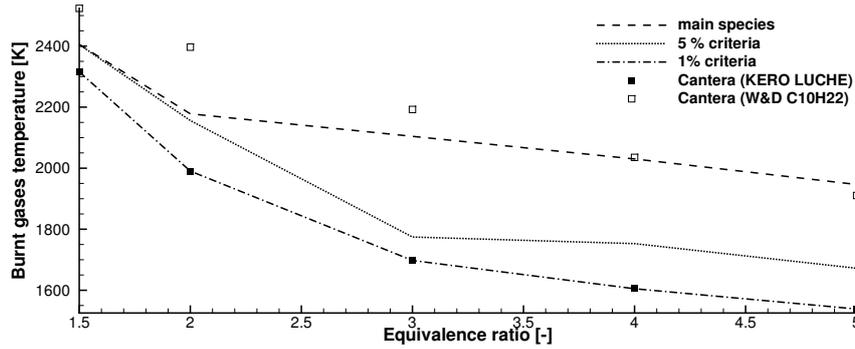


FIGURE 1.1 – Température de gaz brûlés d’une flamme 1D laminaire prémélangée pour différentes richesses, dans CEDRE avec modèle FTC et différents jeux d’espèces transportées, dans Cantera avec la même cinétique (Luche[60]), et avec une cinétique réduite (W&D [110]). Pour les résultats CEDRE : « main species » fait référence au transport du jeu d’espèces réduit ; « 5% criteria » fait référence au cas  $\alpha = 5\%$  (voir tableau 1.1) ; « 1% criteria » fait référence au cas  $\alpha = 1\%$  (voir tableau 1.1).

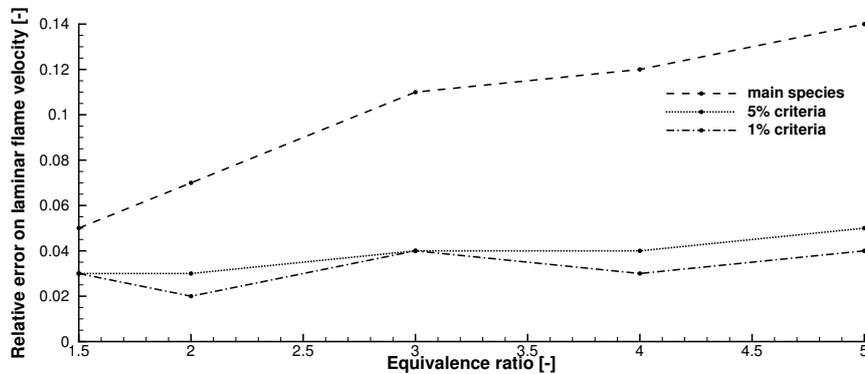


FIGURE 1.2 – Erreur relative sur la vitesse de flamme 1D laminaire prémélangée pour différentes richesses, obtenue dans CEDRE avec modèle FTC et différents jeux d’espèces transportées. « main species » fait référence au transport du jeu d’espèces réduit ; « 5% criteria » fait référence au cas  $\alpha = 5\%$  (voir tableau 1.1) ; « 1% criteria » fait référence au cas  $\alpha = 1\%$  (voir tableau 1.1).

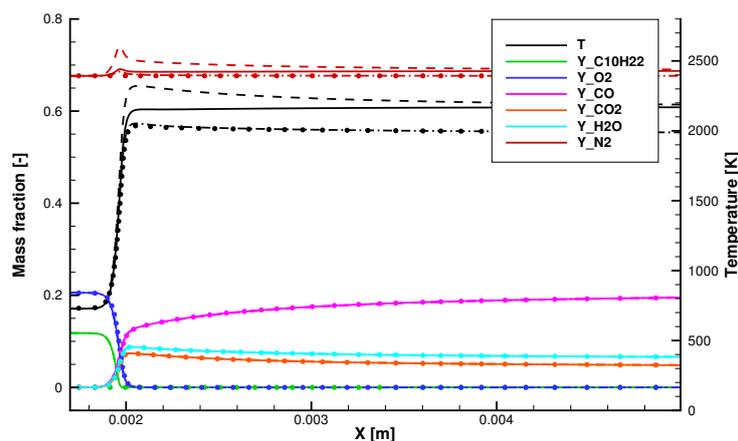


FIGURE 1.3 – Profils de température et composition (espèces principales) d’une flamme laminaire 1d prémélangée de richesse  $\phi = 2,0$  calculée dans Cedre avec modèle FTC pour différents jeux d’espèces transportées. Tirets : jeu d’espèces réduit ; trait plein :  $\alpha = 5\%$  (voir tableau 1.1) ; tirets-pointillés :  $\alpha = 1\%$  (voir tableau 1.1).

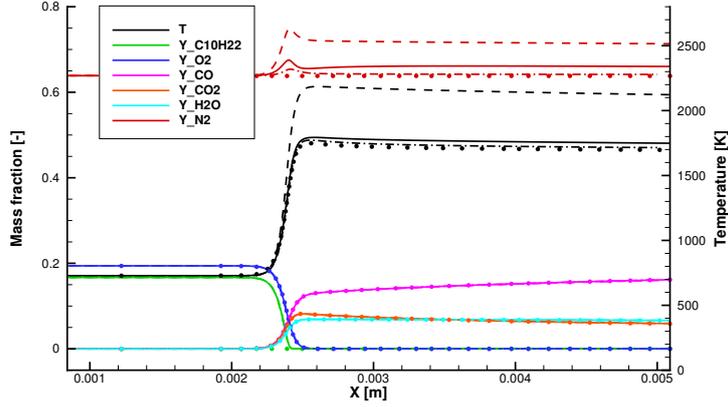


FIGURE 1.4 – Profils de température et composition (espèces principales) d’une flamme laminaire 1d prémélangée de richesse  $\phi = 3,0$  calculée dans Cedre avec modèle FTC pour différents jeux d’espèces transportées. Tirets : jeu d’espèces réduit ; trait plein :  $\alpha = 5\%$  (voir tableau 1.1) ; tirets-pointillés :  $\alpha = 1\%$  (voir tableau 1.1).

Les résultats qui viennent d’être présentés montrent que la méthode choisie pour l’implémentation du modèle FTC via les termes de source chimique donne des résultats satisfaisants puisqu’elle permet de reproduire une bonne vitesse de flamme tout en limitant les écarts de température à condition de transporter suffisamment d’espèces. Néanmoins, on a vu que ce nombre d’espèces pouvait vite devenir pénalisant concernant le temps de calcul puisque pour limiter l’erreur sur l’estimation de la température sous les 10 %, on doublait le temps CPU, sur le cas étudié, par rapport au calcul avec un jeu d’espèce réduit. Il est donc intéressant de chercher une méthode alternative permettant de substituer la masse des espèces non transportées, sans modifier significativement les propriétés du mélange, et sans avoir à augmenter le nombre d’espèces à transporter. On propose pour cela, une méthode permettant de modéliser le mélange d’espèces non transportées au moyen d’une unique espèce fictive, qui sera donc la seule espèce supplémentaire qu’il faille transporter.

### 1.3 Modélisation thermodynamique du mélange d’espèces non transportées au moyen d’une espèce fictive.

La méthode proposée vise à substituer la masse des espèces non transportées de la table, non pas par une espèce réelle transportée comme  $N_2$ , mais par une espèce fictive dont les propriétés thermodynamiques (enthalpie, capacité thermique, masse molaire) sont représentatives de celles des espèces non transportées de la table. Ainsi, la température qui est recalculée à partir du mélange composé des espèces transportées et de l’espèce fictive est la même que celle que l’on obtiendrait à partir de l’état du mélange composé de toute les espèces de la table.

Rappelons que l’enthalpie d’un mélange s’exprime comme :

$$h_{mel} = \sum_i h_i Y_i \quad (1.26)$$

que l’enthalpie dans CEDRE est donnée sous forme de polynômes d’ordre  $K$  :

$$h(T) = \sum_k a_k T^k \quad ; \quad k \in [0; K] \quad (1.27)$$

et que la masse molaire d’un mélange est donnée par :

$$\mathcal{M}_{mel} = \left( \sum_i \frac{Y_i}{\mathcal{M}_i} \right)^{-1} \quad (1.28)$$

Pour que l’enthalpie, la capacité calorifique massique et la masse molaire de l’espèce fictive représentent correctement celles du mélange non transporté, on tabule les propriétés de cette espèce à

partir de la solution des flammelettes utilisée pour générer la table FTC de façon à ce qu'en chaque point  $(Z, c)$  on assure l'égalité suivante :

$$\xi_{mel}(Z, c) = \xi_{tr}(Z, c) + \xi_{nt}(Z, c) = \xi_{tr}(Z, c) + \xi_{fic}(Z, c) \quad (1.29)$$

où  $\xi$  peut être l'enthalpie, la capacité calorifique massique à pression constante ou la masse molaire du mélange, l'indice *mel* fait référence aux propriétés du mélange, l'indice *tr* fait référence à la partie transportée du mélange (espèces de la table présentes dans le calcul CFD), l'indice *nt* fait référence à la partie non-transportée du mélange (espèces de la table non présentes dans le calcul CFD), et l'indice *fic* fait référence aux propriétés de l'espèce tabulée (fictive). Cette égalité peut être réécrite de la manière suivante (en prenant l'exemple de l'enthalpie) :

$$h_{nt}(Z, c) = \frac{1}{\sum_{i=1}^n Y_i(Z, c)} \sum_{i=1}^n \{Y_i(Z, c) h_i[T(Z, c)]\} = h_{fic}(Z, c) \quad (1.30)$$

où  $n$  est le nombre d'espèces de la table non-transportées dans le calcul CFD,  $Y_i$  est la fraction massique de l'espèce  $i$  et  $h_i[T(Z, c)]$  son enthalpie à la température  $T$  au point  $(Z, c)$ .

On souhaite également que les propriétés thermodynamiques de l'espèce fictive ne soient pas définies uniquement pour la température adiabatique de la flammelette  $T(Z, c)$ , mais pour une température quelconque, afin de prendre en compte l'effet des fluctuations de température sur les propriétés thermodynamiques du mélange dans le calcul CFD. Plutôt que l'égalité 1.29, c'est donc l'égalité suivante qui est respectée pour définir l'espèce fictive :

$$\xi_{nt}(Z, c, T) = \xi_{fic}(Z, c, T) \quad (1.31)$$

Pour cela, on se fixe comme contrainte de conserver une enthalpie exprimée sous forme de polynôme. Cette contrainte assure une dépendance des propriétés de l'espèce fictive vis-à-vis des variations locales de température, tout en gardant un formalisme compatible avec l'architecture de la librairie thermodynamique du code CEDRE.

Enfin, comme expliqué en section 1.1.3, on fait l'hypothèse que la modélisation des propriétés de transport du mélange d'espèces non transportées n'a pas d'impact significatif dans le calcul CFD. Les propriétés de transport de l'espèce fictive sont donc celles d'une espèce majoritaire, telle que  $N_2$  dans nos applications.

On a évoqué en début de chapitre la méthode TTC [104], dans laquelle le mélange est représenté par une espèce unique, dont les propriétés sont tabulées et linéarisées autour de l'état tabulé pour prendre en compte de faibles perturbations de la température, d'origine acoustique. Cette méthode n'entre pas dans le cadre que l'on s'est fixé (approche indirecte, avec transport d'espèces principales ne remettant pas en cause l'architecture du code, prise en compte d'effets compressibles importants tel que le passage d'un col sonique, thermodynamique hétérogène (gaz/liquide)), c'est pourquoi on propose ici la modélisation des espèces non transportées par une espèce fictive.

La méthodologie utilisée pour générer les propriétés thermodynamiques de l'espèce fictive est la suivante :

- Génération de la table avec Cantera. Pour cette étape préalable, la méthode de génération de la table est la méthode habituelle (voir Annexe B).
- Choix des  $M$  espèces transportées. Ce choix dépend entièrement de l'utilisateur. Les espèces à transporter sont, au minimum, les espèces servant à calculer la variable  $c$  et le carburant dans le cas d'un écoulement diphasique pour permettre le calcul des échanges de masse entre les solvants fluide et phase dispersée. On ajoutera les espèces majoritaires en masse, de façon à ne pas trop impacter les propriétés de transport du mélange, soit généralement  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $N_2$ . En choisissant les espèces transportées, on définit en même temps les espèces qui seront uniquement tabulées, et qui constitueront ce que l'on appellera par la suite le mélange fictif, qui sera modélisé par l'espèce fictive.
- Choix d'une discrétisation de la température  $[T_{min} : T_{max}]$  pour générer les coefficients du polynôme enthalpie.

- Pour chaque point  $(Z,c)$  de la table et pour chaque point  $T$  de  $[T_{min} : T_{max}]$ , calcul de l'enthalpie  $h^{fic}(Z, c, T)$  du mélange fictif d'après l'équation (1.26). Calcul de la masse molaire du mélange fictif  $\mathcal{M}^{fic}(Z, c)$  d'après l'équation 1.28.
- Pour chaque point  $(Z,c)$ , calcul des coefficients  $a_0(Z, c), \dots, a_K(Z, c)$  du polynôme fittant les points  $h^{fic}(Z, c, T)$  sur l'intervalle  $[T_{min} : T_{max}]$ .
- Stockage des coefficients  $a_0(Z, c), \dots, a_K(Z, c)$  et  $\mathcal{M}^{fic}(Z, c)$  dans une table de propriétés thermodynamiques.

Dans le code CEDRE, on transporte donc les  $M$  espèces choisies par l'utilisateur, plus une espèce fictive dont la masse molaire, l'enthalpie et la capacité thermique sont recalculées à partir de la table et de la température locale. Le terme source de l'espèce fictive est alors défini comme :

$$\dot{\omega}^{fic} = - \sum_i \dot{\omega}_i \quad ; \quad i \in [1; M - 1] \quad (1.32)$$

C'est donc l'espèce fictive qui assure la conservation de la masse tandis que le terme source de  $N_2$  est maintenant donné par l'équation (1.22).

La validation de cette méthode a été effectuée en répétant la simulation de la flamme 1D libre comme effectuée dans la section précédente. Les espèces transportées sont  $C_{10}H_{22}$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CO$  et  $N_2$  auxquelles on a ajouté l'espèce fictive aux propriétés thermodynamiques tabulées. Pour réduire la taille de la table associée, le nombre de points dans la direction de la variable d'avancement normalisée  $c$  a été réduit à 10 (pour la table thermodynamique uniquement). La température de gaz brûlés obtenue sur la plage de richesse étudiée a été reportée sur la figure 1.5. On remarque que celle-ci montre un excellent accord avec la température de référence issue de Cantera. La vitesse de flamme (figure 1.6) est également très bien reproduite avec cette méthode, l'erreur étant inférieure ou égale à l'erreur obtenue en transportant les espèces respectant un critère  $\alpha = 1\%$ . De plus, on voit sur la figure 1.7 que le profil de température est en accord avec le profil issu de Cantera tout au long de la flamme, bien que la variable d'entrée dans la table  $c$  n'ait été discrétisée que sur 10 points.

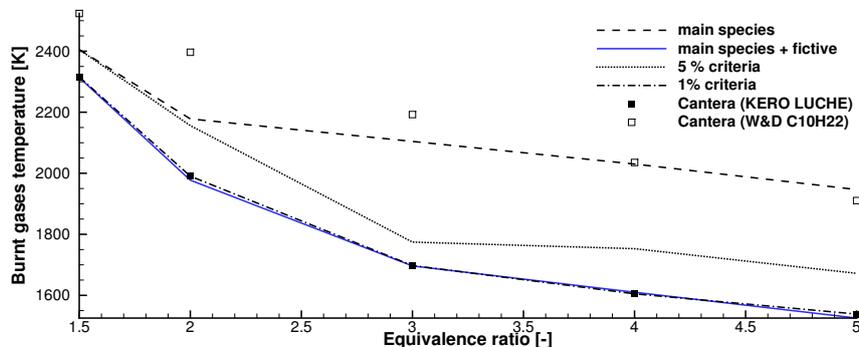


FIGURE 1.5 – Température de gaz brûlés d'une flamme 1D laminaire prémélangée pour différentes richesses, dans CEDRE avec modèle FTC et différents jeux d'espèces transportées, dans Cantera avec la même cinétique (Luche[60]), et avec une cinétique réduite (W&D [110]). Pour les résultats CEDRE : « main species » et « main species + fictive » font référence au jeu d'espèce réduit respectivement sans et avec ajout d'une espèce fictive ; « 5% criteria » fait référence au cas  $\alpha = 5\%$  (voir tableau 1.1) ; « 1% criteria » fait référence au cas  $\alpha = 1\%$  (voir tableau 1.1).

Cette méthode utilisant une espèce fictive est très prometteuse au vu des résultats que l'on vient de présenter, mais entraîne tout de même une augmentation du temps CPU de l'ordre de 50% sur les cas testés, par rapport au transport du jeu d'espèces réduit uniquement. Cette augmentation est nettement inférieure à celle observée dans la section précédente (+100% CPU pour  $\alpha = 5\%$  donnant moins de 9% d'erreur sur la température, et +100% CPU pour obtenir une erreur comparable à l'utilisation d'une espèce fictive), mais reste tout de même conséquente.

Signalons également que quelques difficultés ont été rencontrées concernant son implémentation dans le code CEDRE. En effet, il n'est pas envisageable de modifier l'architecture du code pour toute la

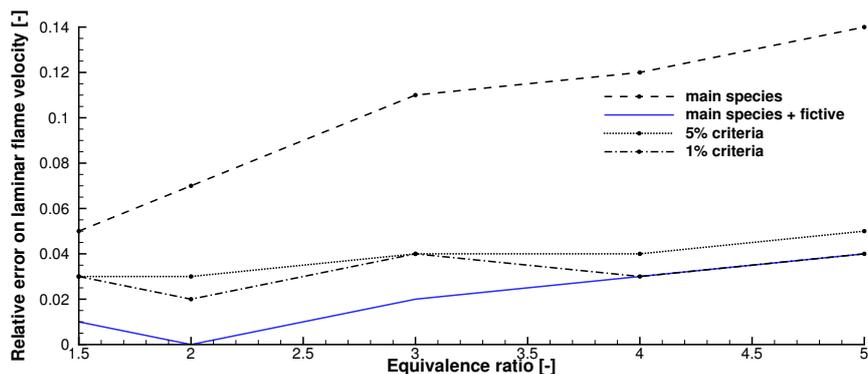


FIGURE 1.6 – Erreur relative sur la vitesse de flamme 1D laminaire prémélangée pour différentes richesses, obtenue dans CEDRE avec modèle FTC et différents jeux d’espèces transportées. « main species » et « main species + fictive » font référence au transport du jeu d’espèces réduit respectivement sans et avec ajout d’une espèce fictive ; « 5% criteria » fait référence au cas  $\alpha = 5\%$  (voir tableau 1.1) ; « 1% criteria » fait référence au cas  $\alpha = 1\%$  (voir tableau 1.1).

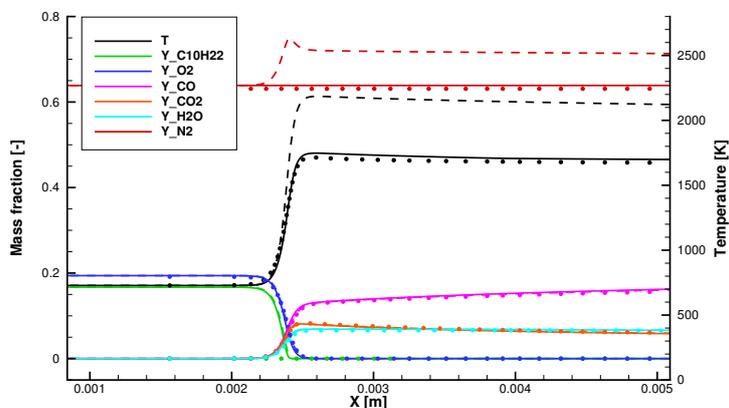


FIGURE 1.7 – Profils de température et composition (espèces principales) d’une flamme laminaire 1d prémélangée de richesse  $\phi = 3,0$  calculée dans Cedre avec modèle FTC pour différents jeux d’espèces transportées. Tirets : jeu d’espèces réduit ; trait plein : jeu d’espèce réduit complété par l’espèce fictive aux propriétés thermodynamiques tabulées.

partie qui a trait à l’utilisation des bibliothèques thermodynamiques. Or, pour les espèces chimiques classiques, le jeu de paramètres qui sert d’entrée dans la bibliothèque thermodynamique est constitué de la température  $T$ , la pression  $P$ , et les fractions massiques des espèces  $Y_i$ . Ce jeu de paramètres est différent de celui qui sert à définir les propriétés de l’espèce fictive représentative de l’état thermodynamique des espèces non suivies dans le calcul CFD. Pour l’espèce fictive, les paramètres sont en effet  $Z$ ,  $c$ , et  $T$ . Il a donc été nécessaire d’établir une correspondance entre le jeu  $(T, P, Y_i)$ , et le jeu  $(Z, c, T)$  pour récupérer les propriétés thermodynamiques de l’espèce fictive. En particulier, il a fallu relier de façon univoque  $Z$  à la fraction massique de certaines espèces. L’espèce  $N_2$  étant majoritaire et peu affectée par les réactions chimiques, il a été possible de relier directement  $Z$  à la fraction massique de  $N_2$ . Cette façon de procéder a permis d’éviter un bouleversement de l’architecture du code CEDRE mais présente cependant des limites. En cas de prise en compte de l’interaction chimie-turbulence, un paramètre qui peut-être la variance de la fraction de mélange, se rajoute aux paramètres  $Z$ ,  $c$  et  $T$  qui définissent l’état thermodynamique de l’espèce fictive. Il n’est alors plus possible de relier de façon univoque ces paramètres aux paramètres d’entrée habituels dans la table thermodynamique, à savoir  $T$ ,  $P$  et  $Y_i$ . Dans ce cas, il faut prévoir de grosses transformations du code CEDRE consistant en la création de bibliothèques thermodynamiques ayant un nouveau jeu d’entrée. Un développement aussi lourd étant hors du cadre de cette thèse, la méthode de l’espèce fictive n’est actuellement applicable qu’aux écoulements laminares, sauf si la prise en compte de l’interaction chimie-turbulence ne

nécessite pas l'introduction d'un paramètre supplémentaire (comme dans le modèle de flamme épaisse), auquel cas, l'approche telle qu'elle est implémentée actuellement, est applicable également aux écoulements turbulents.

## Bilan

Le travail présenté dans ce premier chapitre a permis de corriger quelques défauts du modèle FTC tel qu'il avait été implémenté initialement dans CEDRE. La première amélioration vise à assurer la conservation de la masse des espèces en répercutant la masse des espèces non transportées de la table sur une espèce choisie par l'utilisateur (généralement  $N_2$ ). Le second point abordé concerne la formulation du terme de relaxation. Celle-ci a été adaptée afin de garantir que la relaxation ne modifie pas le taux de réaction qui conditionne l'évolution de la variable  $c$ . Un temps caractéristique de relaxation commun à toutes les espèces transportées doit être choisi par l'utilisateur.

Afin de limiter les erreurs sur la température induite par le transport d'un nombre limité d'espèces, une sélection pertinente des espèces à transporter doit être opérée. La méthode utilisée initialement pour réaliser cette sélection d'espèces a ainsi été revue : Le choix de transporter ou non une espèce est maintenant basé sur l'écart entre ses propriétés thermodynamiques et celles de l'espèce susceptible de la remplacer pour conserver la masse si elle n'était pas transportée. Afin d'éviter une forte augmentation du temps de calcul, une nouvelle modélisation permettant de ne pas transporter toutes les espèces obtenues par la méthode de sélection que l'on vient d'évoquer a également été proposée. Cette modélisation permet de représenter du point de vue thermodynamique l'ensemble des espèces non transportées de la table par une espèce unique, dite fictive, ce qui permet d'alléger le coût CPU de la méthode FTC.



## CHAPITRE 2

### Extension du modèle FTC au régime de diffusion

Dans ce chapitre, on propose d'étendre le modèle FTC de CEDRE au régime de diffusion. Pour cela, on choisit dans la littérature une approche de chimie tabulée adaptée à ce régime. On ne traite pas ici le cas d'un régime mixte prémélange pur/prémélange partiel/diffusion. Cependant, l'extension du modèle FTC de CEDRE au régime de diffusion est réalisée de façon à faciliter la mise en place d'un tel traitement par la suite. C'est pourquoi, dans l'optique d'effectuer un choix pertinent, on fait tout de même une revue des travaux portant sur le régime mixte. Ensuite, on présente les calculs tests réalisés avec la nouvelle version du modèle FTC sur une flamme de diffusion laminaire. Différentes simulations sont réalisées : certaines sont effectuées avec le modèle FTC, alors qu'une résolution directe de la chimie est utilisée pour établir la solution de référence.

#### Sommaire

<b>2.1</b>	<b>Choix d'un modèle FTC adapté aux flammes de diffusion pour CEDRE</b>	<b>28</b>
2.1.1	Modèles de flamme tabulée adapté au régime de diffusion	28
2.1.2	Modèles de flamme tabulée pour le régime mixte	31
2.1.3	Approche retenue pour l'extension du modèle FTC de CEDRE au régime de diffusion.	33
<b>2.2</b>	<b>Simulation d'une flamme de diffusion laminaire</b>	<b>33</b>
2.2.1	Description du cas test	33
2.2.2	Domaine de calcul, modélisation et conditions limites	34
2.2.3	Comparaison des profils obtenus avec les différents modèles	36
	Profils de température et de vitesse axiale	36
	Profils d'espèces	36
	Bilan des calculs de validation	37
<b>Bilan</b>		<b>42</b>

## 2.1 Choix d'un modèle FTC adapté aux flammes de diffusion pour CEDRE

### 2.1.1 Modèles de flamme tabulée adapté au régime de diffusion

Peters [79, 80] propose pour le modèle Steady Laminar Flamelet Model (SLFM) de générer une table chimique à partir d'une flamme élémentaire de diffusion à contre-courant stationnaire, dont on fait varier le taux d'étirement  $a$ <sup>1</sup>. Cette proposition part d'une hypothèse selon laquelle la structure d'une flamme de diffusion turbulente peut être localement assimilée à celle d'une flamme de diffusion laminaire dont l'étirement est contrôlé par les structures turbulentes. Il propose alors d'utiliser deux variables pour indexer cette table : la fraction de mélange  $Z$  pour se positionner dans la flamme, et le taux de dissipation scalaire du champs de fraction de mélange  $\chi_Z = f(a)$  pour sélectionner une solution parmi celles obtenues à différents taux d'étirement. Le taux de dissipation scalaire peut s'écrire pour un scalaire  $f$  :

$$\chi_f = 2D_f |\nabla f|^2 \quad (2.1)$$

où  $D_f$  est le coefficient de diffusion du scalaire  $f$ . L'étirement peut, sous certaines hypothèses [80, 85], être relié au taux de dissipation  $\chi_Z$  suivant la relation :

$$\chi_Z = \frac{a}{\pi} \exp \left\{ -2[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z)]^2 \right\}, \quad (2.2)$$

où  $\operatorname{erfc}^{-1}$  est la fonction réciproque de la fonction erreur complémentaire.

Les grandeurs scalaires telles que la température, la densité, les fractions massiques et les propriétés du fluide sont finalement exprimées en fonction de  $Z$  et  $\chi_Z$ , qui sont les seules grandeurs transportées en plus de celles figurant dans le système d'équations de Navier-Stokes :

$$\Phi(\mathbf{x}, t) = \Phi[Z(\mathbf{x}, t), \chi_Z(\mathbf{x}, t)], \quad (2.3)$$

$\Phi$  étant l'une de ces grandeurs scalaires.

Pierce et Moin [82] proposent le modèle Progress Variable Approach (PVA) où l'on utilise aussi une flamme de diffusion à contre-courant stationnaire pour générer la table chimique. En revanche, ils utilisent un jeu de variables légèrement différent pour indexer la table. En effet, on peut voir sur la figure 2.1 que deux solutions de flamme stationnaire existent pour une même valeur de  $\chi_Z$ , l'une stable et l'autre instable. Les auteurs font l'hypothèse que les solutions obtenues sur la branche instable donnent (relativement à la branche stable) une structure de flamme plus proche de celle obtenue lors de phénomènes d'extinction ou de ré-allumage. Ils proposent donc d'incorporer les solutions de la branche instable dans la table, en plus des solutions de la branche stable. Pour ce faire, ils montrent qu'il est possible de formuler une variable d'avancement normalisée  $c$  se substituant à  $\chi_Z$  et permettant d'indexer de manière univoque les branches stable et instable des solutions dans la table. Les grandeurs scalaires extraites de la table sont donc exprimées comme :

$$\Phi(\mathbf{x}, t) = \Phi[Z(\mathbf{x}, t), c(\mathbf{x}, t)] \quad (2.4)$$

On peut voir sur la figure 2.2 que, pour les solutions de la branche stable, il existe une relation bijective entre les couples  $(Z, \chi_Z)$  et  $(Z, c)$ . On peut donc utiliser indifféremment  $\chi_Z$  ou  $c$  pour décrire cette branche. Toutefois, Pierce et Moin précisent que, dans la limite des taux d'étirement tendant vers 0 (non représentés sur la figure 2.2), les solutions de flamme de diffusion ne sont plus indexées de façon unique par la variable  $c$ . Il est cependant peu probable de rencontrer des flammes de diffusion à étirement nul dans un écoulement turbulent. En effet, dans ce type d'écoulement, le taux d'étirement peut tendre vers 0 dans la partie de l'écoulement située en aval de zone de flamme si l'intensité turbulente diminue suffisamment, mais dans cette partie, on peut supposer que le régime de combustion tend dans le même temps vers le prémélange.

---

1. Le taux d'étirement est défini comme  $a = \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{\infty}$ ,  $x$  étant l'abscisse selon la normale au plan d'arrêt et  $u$  la vitesse dans cette même direction. L'indice  $\infty$  fait référence à l'entrée d'oxydant. L'ordre de grandeur du taux d'étirement est généralement donné par  $a = \frac{|U_1| + |U_2|}{L}$ , où  $L$  définit l'écart entre les plans d'injection, et  $|U_1|$  et  $|U_2|$  sont les vitesses d'injection dans chacun de ces plans.

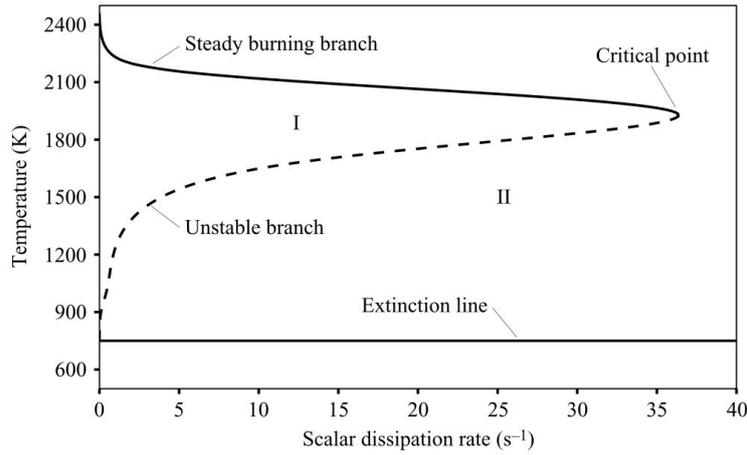


FIGURE 2.1 – Evolution de la température maximale pour un ensemble complet de solutions de flammes stationnaires incluant la branche instable. Extrait d’un article de Pierce et Moin [82].

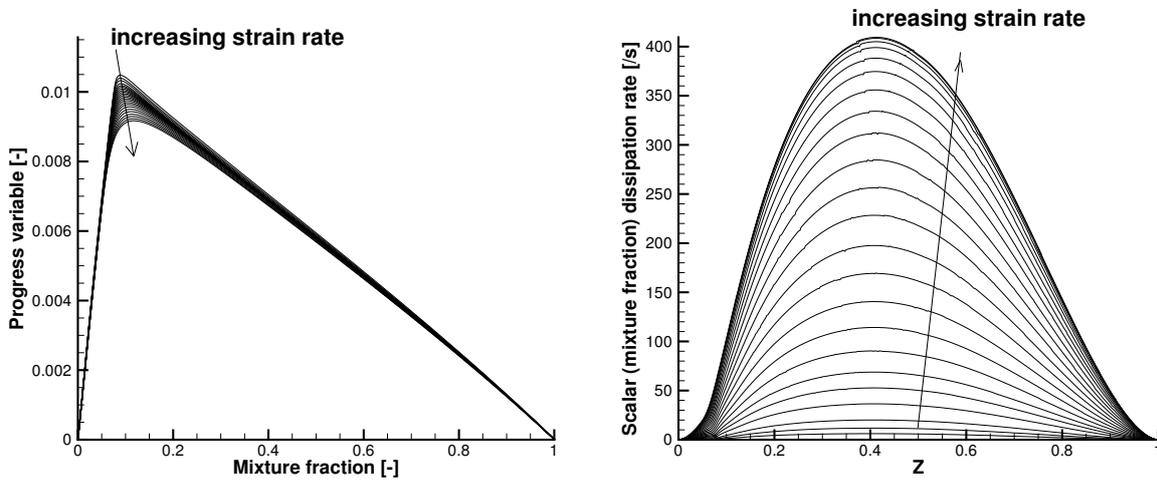


FIGURE 2.2 – Ensemble de solutions stables de flammes à contre-courant stationnaires éthylène-air en conditions ambiantes, représenté sur la vue de gauche dans un repère  $(Z, c)$ , et sur la vue de droite dans un repère  $(Z, \chi_Z)$ .

Ihme et al. [43] ont réalisé une étude a priori<sup>2</sup> du comportement modèle PVA en LES sur un cas de turbulence isotrope décroissante. Un filtrage de résultats obtenus par DNS montre que l’approche PVA permet de reproduire une structure de flamme correcte, y compris dans le cas de phénomènes d’extinction importants.

Chrigui et al. [16] et Verhoeven et al. [102] traitent une flamme de diffusion à contre-courant dans le cadre de l’approche Flamelet Generated Manifold (FGM). Dans ces conditions, leur approche est très similaire à celle du modèle PVA. Nous appellerons cette approche FGM-D pour la distinguer de l’approche FGM avec tabulation de flammes pré-mélangées. La seule différence avec le modèle PVA réside dans le fait d’utiliser une solution de flamme instationnaire à la place de la branche instable des solutions stationnaires. En partant de la solution stationnaire obtenue en limite d’extinction  $a = a^{ext}$ , les équations de la flamme de diffusion à contre-courant instationnaire sont résolues jusqu’à obtenir l’extinction de la flamme. Les états de la flamme sont archivés au cours du temps pour générer la

2. Par « a priori », on entend que les tests n’ont pas été effectués en résolvant l’écoulement tout en décrivant la chimie à l’aide du modèle PVA. L’écoulement a d’abord été résolu par un calcul DNS avec cinétique chimique globale. Les champs de fraction de mélange et de variable d’avancement normalisée ont été recalculés à partir des résultats de cette DNS, puis, la structure de flamme obtenue avec le modèle PVA à partir des champs a pu être comparée localement à celle issue des résultats DNS.

partie instationnaire de la table. Il est montré [16] qu’une relation implicite existe entre la variable  $c$  et le temps, ce qui permet d’indexer la partie instationnaire de la table au moyen du couple  $(Z,c)$ , tout comme la partie stationnaire.

En résumé, la figure 2.3 montre les différentes structures de la flamme de diffusion à contre-courant laminaire accessibles avec les différentes modélisations que l’on vient d’évoquer. Tous les modèles (SLFM, PVA, FGM-D) nécessitent le stockage des solutions stables de flamme de diffusion stationnaire, ainsi que de la solution éteinte, correspondant au mélange des réactifs. L’utilisation de  $\chi_Z$  ou  $c$  permet indifféremment d’indexer de manière univoque ces solutions dans la table. Enfin, l’utilisation de  $c$  comme index de table dans les modèles PVA et FGM-D permet d’accéder à des solutions situées entre la flamme stationnaire en limite d’extinction et la solution éteinte (partie hachurée de la figure 2.3). A cette partie correspond la branche instable de la flamme de diffusion stationnaire dans le modèle PVA, et correspondent les solutions à différents instants d’une flamme instationnaire en cours d’extinction dans le modèle FGM-D.

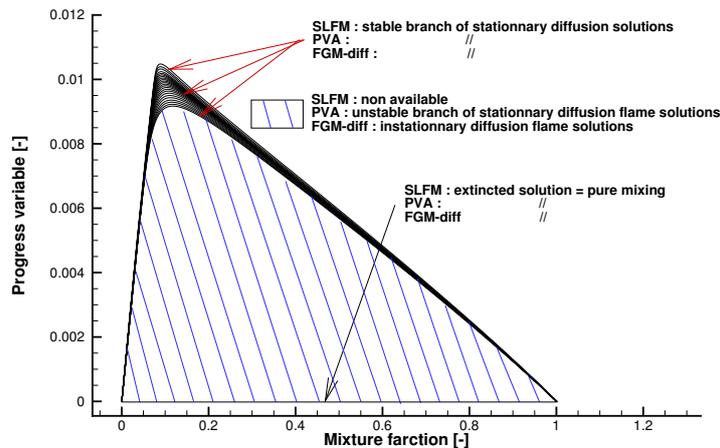


FIGURE 2.3 – Représentation des différentes structures de flamme de diffusion à contre-courant accessibles avec les approches SLFM [80], PVA [82], ou FGM-D [16].

Une approche parfois utilisée pour modéliser le régime de diffusion avec l’approche FTC consiste à utiliser malgré tout une table de prémélange comme dans les approches FPI ou FGM. Ainsi, les travaux de Verhoeven et al. [102] comparent l’utilisation des modèles FGM avec table de prémélange, et FGM-D avec table de diffusion à contre-courant lors de la simulation d’une flamme laminaire de diffusion co-courant. La simulation de cette même flamme avec une résolution directe de la chimie détaillée est prise comme référence. Il en ressort que la modélisation FGM-D reproduit correctement les résultats obtenus avec chimie directe en termes de température et fractions massiques d’espèces. En revanche, la modélisation FGM induit des écarts significatifs pour la température, la concentration de CO ou encore de  $H_2$ . Les travaux de Fiorina et al. [27] montrent également des écarts entre les prédictions du modèle FPI (avec table de prémélange) et une chimie directe lors de la simulation d’une flamme de diffusion 1D à contre-courant laminaire. En revanche, Jha et al. [46] ont effectué une comparaison entre FPI/FGM (avec table de prémélange) et SLFM (avec table de diffusion) sur des flammes de diffusion axisymétriques laminaires à contre-courant et co-courant. Il ressort de leurs travaux que l’approche FPI/FGM permet d’obtenir des prédictions comparables au modèle SLFM, montrant même sur la simulation co-courant une meilleure prédiction de l’espèce OH avec FPI/FGM. Vreman et al. [106] ont réalisé des simulations LES des flammes turbulentes Sandia D et F qui sont dominées par le régime de diffusion. Ils ont trouvé que l’utilisation d’une table de prémélange conduisait à des résultats de qualité comparable à ceux obtenus avec une table de diffusion. Seuls les profils de CO et  $H_2$  étaient mieux prédits avec la table de diffusion, alors que la table de prémélange permettait mieux de retrouver le profil de NO.

L’analyse des travaux issus de la littérature pour la modélisation FTC du régime de diffusion fait ressortir les points suivants :

- L’utilisation d’une approche dans laquelle la table est générée à partir de flammes de diffusion

à contre-courant semble plus appropriée qu’une approche basée sur des flamme de prémélange. Néanmoins, certains travaux viennent nuancer ce résultat.

- Les approches basées sur une flamme de diffusion à contre-courant se distinguent essentiellement par les index de table utilisés  $(Z, \chi_Z)$  ou  $(Z, c)$ . L’utilisation du couple  $(Z, c)$  semble offrir plus de possibilités de modélisation car, contrairement au couple  $(Z, \chi_Z)$ , il permet d’inclure dans la table une description de la structure de flamme adaptée aux cas d’extinction/ré-allumage.

### 2.1.2 Modèles de flamme tabulée pour le régime mixte

Le traitement des écoulements mixtes (prémélange pur/prémélange partiel/diffusion) n’a pas été mis en place dans le code CEDRE durant ce travail de thèse. Toutefois, on s’est efforcé de choisir, pour l’extension du modèle FTC au régime de diffusion, des solutions compatibles avec une extension future du modèle FTC au cas des écoulements mixtes. On s’intéresse donc dans ce qui suit aux approches FTC de la littérature traitant de ces écoulements.

Nguyen et al. [68] proposent d’utiliser une table à cinq dimensions (en laminaire) pour prendre en compte l’effet de l’étirement sur la dissipation scalaire  $\chi_Z$  de la fraction de mélange, sur celle de  $\chi_c$ , de la variable  $c$ , et sur leur dissipation croisée  $\chi_{Z,c}$ . Cette table est générée en résolvant les équations de flamme établies dans l’espace  $(Z, c)$ , et permet d’obtenir une table indexée en  $(Z, c, \chi_Z, \chi_c, \chi_{Z,c})$ . Ces travaux sont récents et n’ont, à la connaissance de l’auteur, pas été testés dans le cadre de calculs de flamme type LES. Néanmoins, cette augmentation du nombre de dimensions de la table correspond à une réduction du nombre d’hypothèses simplificatrices utilisées dans la modélisation. On a donc avec cette table accès à un plus grand nombre de structures de flammes. On peut donc supposer que l’utilisation de cette dernière implique une meilleure description de la flamme dans les régimes de combustion mixtes. En revanche, l’utilisation d’une table à cinq dimensions (sans compter la modélisation de l’interaction chimie/turbulence ni des pertes thermiques) pourrait poser des problèmes évidents d’occupation mémoire, mais aussi augmenter le coût des interpolations dans la table, ce qui constitue un frein à sa mise en œuvre.

Franzelli et al. proposent d’utiliser une table à trois dimensions [30] pour reproduire l’aspect multi-régime de la combustion diphasique. Des flammes 1D partiellement prémélangées à contre-courant sont résolues (de l’air est injecté à une entrée alors qu’un prémélange air/carburant est injecté au point d’injection opposé). La fraction de mélange  $Z$ , une variable d’avancement normalisée  $c$  et le taux de dissipation scalaire du champ de fraction de mélange  $\chi_Z$  sont alors utilisés pour indexer la table. On a donc une version réduite de la table multi-dimensionnelle de Nguyen et al. [68]. La différence entre ces travaux réside aussi dans le fait que, pour le calcul de la table, Franzelli et al. résolvent les flammes partiellement prémélangées dans l’espace physique et non dans l’espace  $(Z, c)$ . Cette méthode consistant à ajouter une dimension à la table pose également le problème d’occupation mémoire, mais reste plus envisageable de ce point de vue que la table à cinq dimensions.

Différents travaux (Fiorina et al. [27] sur flammes 1D laminares, Domingo et al. [21] en DNS diphasique, et Domingo et al. [20] en LES) montrent qu’il est possible d’utiliser un index type Takeno [113] pour combiner les taux de réaction issus d’un modèle pour le prémélange et d’un modèle pour la diffusion afin de modéliser les réactions dans les écoulements en régime mixte. La méthode est la suivante : un index  $\xi_p$  est défini de manière à valoir 1 lorsque la structure locale de flamme correspond à du prémélange et 0 quand c’est celle d’une flamme de diffusion. Le terme source chimique peut alors s’écrire comme :

$$\dot{\omega}_i = \xi_p \dot{\omega}_i^p + (1 - \xi_p) \dot{\omega}_i^d, \quad (2.5)$$

où  $\dot{\omega}_i^p$  et  $\dot{\omega}_i^d$  sont les termes issus respectivement du modèle pour le prémélange et du modèle pour la diffusion. Dans le cas d’une approche FTC, il s’agit donc des termes sources chimiques issus d’une table générée à partir de flammes prémélangée ( $\dot{\omega}_i^p$ ) et d’une table générée à partir de flammes de diffusion ( $\dot{\omega}_i^d$ ). La formulation de base de l’index  $\xi_p$  est basée sur le critère de Takeno :

$$\xi_p = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\nabla Y_F \cdot \nabla Y_O}{|\nabla Y_F \cdot \nabla Y_O|} \right) \quad (2.6)$$

Fiorina et al. [27] proposent une correction de cet index pour tenir compte de la dominance du régime de diffusion dans certaines flammes doubles (flamme à contre-courant partiellement prémélangées riches).

Domingo et al. [21] proposent d'adapter l'index aux simulations LES dans lesquelles les gradients sont déterminés à partir des grandeurs filtrées. L'index obtenu à l'échelle du filtre est alors :

$$\Xi_p = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\nabla \bar{Y}_F \cdot \nabla \bar{Y}_O}{|\nabla \bar{Y}_F \cdot \nabla \bar{Y}_O|} \right) \quad (2.7)$$

Ils proposent également d'ajouter une correction pour tenir compte d'un éventuel degré de prémélange à l'échelle de sous-maille dans des situations où le critère  $\Xi_p$  indique pourtant un régime de diffusion à partir des grandeurs filtrées.

Knudsen and Pitsch [49, 50] proposent une autre définition d'index pour distinguer régimes de prémélange et de diffusion. Une pseudo-variable d'avancement  $\Lambda$  est définie, de façon à garantir son indépendance statistique vis à vis de la fraction de mélange  $Z$  (contrairement à la variable d'avancement normalisée  $c$ ). L'équation de flammelette stationnaire pour la variable  $c$  est alors projetée dans l'espace  $(Z, \Lambda)$ , ce qui donne dans la limite asymptotique d'une flamme prémélangée non-étirée :

$$\partial_\Lambda c [\rho_u S_L^0 |\nabla \Lambda| - \nabla \cdot (\rho D \nabla \nabla \Lambda)] - \rho \frac{\chi_\Lambda}{2} \partial_\Lambda^2 c = \dot{\omega}_c \quad (2.8)$$

et dans la limite asymptotique d'une flamme de diffusion :

$$- \rho \frac{\chi_Z}{2} \partial_Z^2 c = \dot{\omega}_c \quad (2.9)$$

En négligeant le terme  $\partial_\Lambda^2 c$ , les auteurs proposent de définir l'index suivant :

$$\Theta = \frac{\Theta_{pre}}{\Theta_{dif}} = \frac{\partial_\Lambda c [\rho_u S_L^0 |\nabla \Lambda| - \nabla \cdot (\rho D \nabla \nabla \Lambda)]}{-\rho \frac{\chi_Z}{2} \partial_Z^2 c} \quad (2.10)$$

Ce terme donne une estimation de la contribution de chacun des deux régimes asymptotiques au terme source  $\dot{\omega}_c$ . Cette contribution est mesurée selon la direction dans laquelle  $c$  diffuse : perpendiculairement au gradient de  $Z$  pour le régime de diffusion, perpendiculairement au gradient de  $\Lambda$  pour le régime prémélangé, et dans les deux directions à la fois pour le régime partiellement prémélangé. Un indicateur de régime de combustion normalisé, défini comme

$$\xi_\Theta = \frac{\theta_{pre}}{\theta_{dif} + \theta_{pre}}, \quad (2.11)$$

est ensuite utilisé de la même manière que l'index de l'équation (2.6) pour prédire le terme source multi-régime via l'équation (2.5).

Les auteurs ont comparé la formulation de l'équation (2.6) avec leur formulation (2.11) sur la simulation d'une flamme triple laminaire. Les deux approches prédisent globalement les mêmes répartitions des régimes prémélangé et de diffusion, excepté dans les zones de prémélange partiel relativement riches ou relativement pauvres dans lesquelles selon les auteurs, l'index de type Takeno (équation (2.6)) ne tient pas compte de la prépondérance de la diffusion. Ce point, comme on l'a évoqué, avait déjà été observé par Fiorina et al. [27] qui avaient proposé une correction de l'index.

En conclusion on retient deux approches pour étendre la modélisation FTC aux régimes mixtes :

- extension du nombre de dimensions de la table pour inclure a minima le niveau de dissipation scalaire  $\chi_Z$  dans celle-ci ;
- combinaison d'une table type flamme prémélangée non étirée, et d'une table type diffusion stationnaire étirée, via un index de flamme.

Les deux approches semblent prometteuses au regard des travaux existants, mais toutes deux ont été peu testées sur des cas de flammes turbulentes. D'un point de vue validation, il n'y a donc pas, à l'heure actuelle, d'argument décisif en faveur de l'une ou l'autre de ces approches. Du point de vue de l'implémentation, la seconde est plus séduisante puisqu'elle entraîne peu d'augmentation de l'occupation mémoire (facteur 2 environ), et aucune équation supplémentaire à résoudre si l'on choisit une indexation par le couple  $(Z, c)$  pour la table de diffusion. Si la variable  $c$  est transportée il faut qu'elle ait une définition commune dans les deux tables. Sinon, il faut que l'on rajoute deux équations de transport pour suivre des variables d'avancement différentes. Mais dans le cas où la variable  $c$  est recalculée à partir des fractions massiques transportées, comme c'est le cas dans CEDRE, cette limitation est levée.

### 2.1.3 Approche retenue pour l’extension du modèle FTC de CEDRE au régime de diffusion.

Compte tenu des résultats issus des travaux existants, on choisit d’utiliser pour la simulation des flammes de diffusion une table générée à partir de flammes de diffusion à contre-courant, indexée par le couple  $(Z,c)$ . Ce choix donne la possibilité d’incorporer les solutions instationnaires de la flamme à contre-courant, ce qui ne peut qu’améliorer la modélisation dans les zones d’extinction/réallumage. De plus, dans l’optique du traitement des écoulements mixtes, ce choix permet de faciliter l’implémentation dans FTC d’une approche visant à combiner table prémélangée et table de diffusion via un index de régime (2.6) (2.11), si cette solution est retenue.

La mise en place de cette extension du modèle FTC a consisté en une modification de l’outil utilisé pour générer les tables (voir annexe B). Celui-ci, basé sur Cantera, permet après modification de réaliser une table contenant au choix les solutions de flammes prémélangées libres, ou celles de flammes de diffusion à contre-courant stationnaires. Il est à signaler que Cantera ne permettait pas jusqu’alors de résoudre les équations instationnaires de flamme 1D. On perd donc le bénéfice d’une indexation par le couple  $(Z,c)$  pour traiter les zones d’extinction/réallumage. Néanmoins, un autre code, Ember [95], que l’on peut considérer comme une extension de Cantera, vient d’être mis à disposition par ses développeurs, et permet précisément de calculer des flammes 1D instationnaires. Il devrait donc être possible de modifier avec peu de difficultés l’outil de génération des tables pour incorporer dans celles-ci les solutions instationnaires obtenue via Ember. D’autres codes sont également disponibles comme FlameMaster [83] ou Chem1D [94].

## 2.2 Simulation d’une flamme de diffusion laminaire

### 2.2.1 Description du cas test

Une configuration expérimentale de flamme laminaire de diffusion a été choisie pour la validation de différents développements du modèle FTC. Dans un premier temps, la configuration retenue sert à valider l’extension du modèle FTC aux flammes de diffusion. La flamme laminaire étudiée a également la particularité de produire des suies. Elle permet donc, dans un second temps, de valider le couplage du modèle FTC avec un modèle de suie, ce qui fera l’objet du chapitre 3. La production de suies dans cette configuration peut entraîner des transferts radiatifs importants. Pour la validation du modèle de diffusion qui nous intéresse maintenant, celle-ci est traitée sans modélisation des pertes radiatives ni de la production des suies. On souhaite ainsi découpler la validation du modèle FTC des problèmes de modélisation du rayonnement et des suies. Cette façon de procéder ne permettant pas la comparaison avec l’expérience, une simulation avec résolution directe de la chimie a été effectuée pour servir de référence. Notons que la comparaison avec l’expérience sera faite au chapitre 3, dans lequel le rayonnement et la production des suies seront pris en compte.

La configuration expérimentale choisie est celle de Santoro et al. [47, 90, 91] car elle réunit des mesures de profils de vitesse et de température, ainsi que des champs de fraction volumique de suie et de concentrations d’espèces intervenant dans le modèle de suie présenté au chapitre 3 ( $C_2H_2, OH$ ). Elle peut donc servir pour les travaux de validation du chapitre 3 tout en constituant une excellente base pour la validation du modèle FTC sur flamme de diffusion. La flamme de Santoro et al. est une flamme co-courant éthylène/air<sup>3</sup> confinée, dont le schéma est présenté sur la figure 2.4.

L’éthylène  $C_2H_4$  est injecté verticalement par un conduit cylindrique et de l’air est injecté via une entrée annulaire co-axiale. Une cheminée (paroi cylindrique) permet de confiner la flamme afin d’éviter toute perturbation de l’environnement extérieur. De plus, l’extrémité de cette dernière est fermée par un disque, lui-même percé en son centre d’un orifice ayant un diamètre de 18 mm, encerclé de trois anneaux de 5 mm de diamètre. Aucune description plus précise de la géométrie des anneaux (largeur de fente, écartement) n’est donnée dans les publications citées [90][91]. L’intérieur des arrivées

---

3. Pour être complet, parmi les différents points expérimentaux, on trouve également du méthane, de l’éthane, ou de l’éthylène dilué par de l’azote, mais la majorité des cas ont été réalisés avec de l’éthylène pur, notamment le cas qui a été retenu ici.

d'air et de carburant présente une structure de type nid d'abeille afin d'homogénéiser la vitesse de l'écoulement. Le tube d'injection du combustible se situe 4 mm au-delà du plan d'injection de l'air.

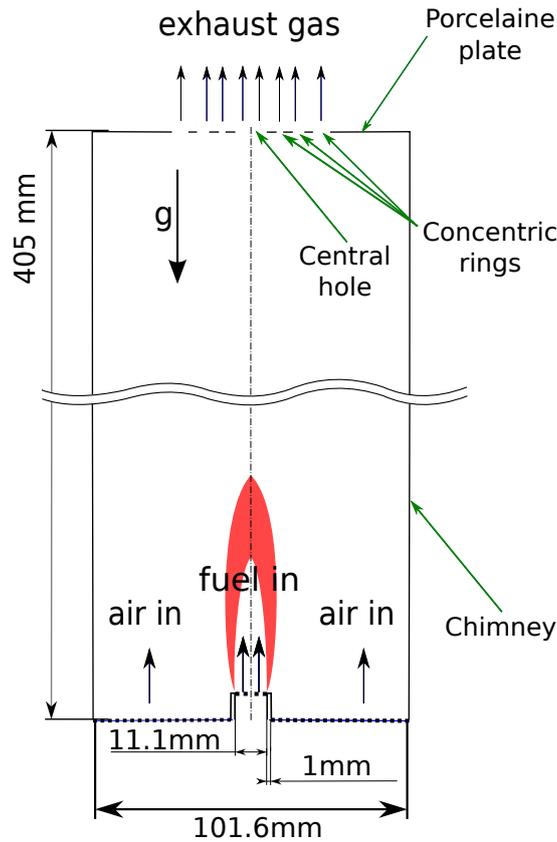


FIGURE 2.4 – Schéma du dispositif expérimental de Santoro et al.[90]

Parmi les différents points de fonctionnement présentés dans [91], c'est l'expérience 2 qui a été retenue puisque des mesures de vitesse et de température sont disponibles en plus des mesures de fraction volumique de suie. Les conditions de cette expérience sont retranscrites dans le tableau 2.1.

Vitesse d'injection du carburant [m/s]	Vitesse d'injection de l'air [m/s]	Pression	Température d'injection
0,0398	0,089	Atmosphérique	Ambiante

TABLE 2.1 – Conditions expérimentales pour le point de fonctionnement numéro 2 de [91].

## 2.2.2 Domaine de calcul, modélisation et conditions limites

Comme indiqué précédemment, on s'inspire de la configuration expérimentale de Santoro et al. pour ces calculs de validation. Néanmoins, on s'affranchit de la modélisation des suies et du rayonnement dans ce chapitre afin de se concentrer sur la validation de l'extension du modèle FTC au régime de diffusion. On choisit donc de comparer les résultats du modèle FTC avec ceux d'une résolution directe de la chimie (Di) plutôt qu'à l'expérience. Pour que les modèles soient comparables, on utilise dans CEDRE avec le modèle Di la même cinétique que celle utilisée pour générer la table FTC. Les écarts entre les résultats des méthodes Di et FTC seront ainsi directement imputables aux hypothèses de modélisation de FTC. Afin d'obtenir un coût de calcul raisonnable pour le modèle Di, la cinétique de Westbrook et Dryer [110] à deux étapes pour l'éthylène est choisie. Le calcul FTC utilisant une table de diffusion générée avec cette cinétique sera désigné FTC1. Une simulation est également réalisée

avec une table générée avec cette même cinétique chimique, mais à partir de solutions de flammes prémélangées libres. Cela signifie qu'on applique aussi le modèle FTC dans sa variante prémélangée à la simulation de la flamme de Santoro et al. Cela permet de quantifier les améliorations apportées par l'extension de FTC aux flammes de diffusion. Ce calcul sera désigné FTC2. Enfin, pour vérifier le fonctionnement de la version modifiée de FTC avec une cinétique détaillée, impliquant le transport d'une sélection restreinte des espèces de la table, on réalise également un calcul FTC avec une table basée sur une flamme de diffusion, générée avec une cinétique détaillée [108]. Celle-ci contient 75 espèces, et on se référera au calcul FTC réalisé avec cette table sous le nom FTC3. Il faut noter que le code Cantera peut fonctionner avec différents modèles de diffusion. L'un de ces modèles, ajouté dans le cadre de la thèse, dénommé « Crude », est un modèle simple basé sur l'introduction de nombres de Schmidt et de Prandtl constants, dont l'utilisateur doit fixer la valeur. Un autre de ces modèles, dénommé « Mix » est un modèle plus complexe dans lequel la conductivité thermique et la diffusion moléculaire sont déterminées à l'aide de relations qui ne sont pas liées par une hypothèse de nombre de Schmidt ou de Prandtl constant. Il aurait été souhaitable de générer des tables avec le modèle de diffusion « Crude » dans la mesure où c'est ce type de modélisation qui est utilisé dans CEDRE et où il faut assurer la meilleure cohérence possible entre les calculs CEDRE et les calculs Cantera.<sup>4</sup> Cependant, cela n'a pas été possible : les solutions obtenues avec le modèle « Crude » et la cinétique chimique simple n'ont pas permis de définir une variable d'avancement normalisée  $c$  permettant un indexage biunivoque de la table chimique. En effet, les espèces disponibles pour construire une variable monotone croissante se réduisent à  $H_2O$ ,  $CO$  et  $CO_2$ , puisque  $N_2$  est inerte, et que  $O_2$  et  $C_2H_4$  sont des réactifs dont les fractions massiques ont une évolution décroissante. Les combinaisons testées avec ces trois espèces ont donné une évolution de  $c$  qui, soit, n'était pas monotone, soit, évoluait entre des bornes minimale et maximale qui étaient quasiment confondues pour certaines valeurs de  $Z$ . Dans le cas de la cinétique complexe, il n'a pas été possible d'obtenir la convergence de Cantera quand le modèle « Crude » était utilisé. C'est par conséquent le modèle « Mix » qui a été utilisé pour générer les tables de type diffusion. Nous verrons par la suite que cela a peu d'impact sur les résultats.

La variable d'avancement utilisée est, pour les trois calculs :

$$\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \frac{Y_{H_2O}}{M_{H_2O}}. \quad (2.12)$$

Les différents cas de calcul sont résumés dans le tableau 2.2.

Di	<b>Référence,</b> résolution directe de la cinétique à deux étapes [110]
FTC1	modèle FTC, tabulation d'une flamme de diffusion à contre-courant stationnaire, cinétique à deux étapes [110]
FTC2	modèle FTC, tabulation d'une flamme prémélangée libre, cinétique à deux étapes [110]
FTC3	modèle FTC, tabulation d'une flamme de diffusion à contre-courant stationnaire, cinétique détaillée de 75 espèces [108]

TABLE 2.2 – Correspondance entre les labels et les différents calculs associés

Mis à part ce qui concerne la combustion, que l'on vient de détailler, les modèles, les conditions limites et le maillage utilisés sont communs aux quatre cas-test listés dans le tableau 2.2. Ainsi, compte

4. De la même façon, une hypothèse de Lewis constant est généralement utilisée dans la littérature. Les travaux de Pitsch et Peters [84] montrent qu'il est possible de lever cette restriction en remplaçant la fraction de mélange définie à partir d'espèces chimiques sensibles aux effets de diffusion différentiels par un scalaire passif transporté. Cette approche se situe au-delà du travail réalisé au cours de cette thèse et n'a donc pas été testée dans CEDRE.

tenu des symétries du problème, un maillage structuré axisymétrique est utilisé. Celui-ci contient environ 200 000 cellules<sup>5</sup> raffinées autour du front de flamme, de façon à discrétiser correctement la zone de réaction. Les parois du tube d'injection de l'éthylène sont représentées par une condition limite de paroi adhérente à température imposée (500 K), alors qu'une condition limite de glissement est utilisée pour la cheminée. On impose la pression en sortie (101325 Pa), et la vitesse débitante (tableau 2.1) aux entrées de carburant et d'air.

Un schéma HLLC [99] est utilisé pour les flux hyperboliques, avec une interpolation sur les faces seulement d'ordre 1. Le calcul à l'ordre 1 s'est avéré nécessaire pour contourner des problèmes numériques qui n'ont pas été résolus lors de ce travail de thèse. Néanmoins, cela n'altère en rien le travail de validation effectué au cours de ce chapitre puisque d'une part on compare des résultats qui ont tous été obtenus avec le même ordre d'interpolation, et d'autre part le maillage utilisé est très fin ce qui limite l'erreur du schéma numérique. L'intégration en temps est faite suivant un schéma euler implicite d'ordre 1, avec un pas de temps de  $1.10^{-6}$  s.

Des nombres de Prandtl et Schmidt constants et identiques (0.72) ont été utilisés dans CEDRE, ce qui correspond à un nombre de Lewis unitaire. Enfin, une force volumique  $\rho \mathbf{g}$  a été appliquée, où  $\rho$  est la masse volumique, et  $\|\mathbf{g}\|$  l'accélération de la pesanteur égale à  $9,81 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$ . Il a été constaté que les effets de gravité influent fortement sur l'accélération axiale de l'écoulement dans cette flamme.

### 2.2.3 Comparaison des profils obtenus avec les différents modèles

#### Profils de température et de vitesse axiale

Les profils de température (figure 2.5) et de vitesse axiale (figure 2.6) obtenus avec les modèles Di, FTC1 et FTC2 sont très proches, ce qui amène deux remarques importantes. D'une part, l'extension du modèle FTC via l'utilisation d'une table de diffusion indexée en  $(Z, c)$  est validée vis à vis de ces quantités. D'autre part, concernant toujours la vitesse et la température, l'utilisation de l'approche FTC originale (FTC1) donne déjà de bons résultats, montrant que la simulation semble finalement peu sensible à la table utilisée. En ce qui concerne le modèle FTC3, l'utilisation d'une cinétique chimique différente de celle utilisée avec les modèles Di, FT1 et FTC2 se traduit par l'obtention de profils différents pour la vitesse et pour la température. Cependant, l'allure globale de ces profils est respectée, traduisant le bon fonctionnement du modèle lorsqu'une partie seulement des espèces de la cinétique est transportée. Les améliorations apportées dans le chapitre 1, portant sur la conservation de la masse et sur la déviation vis-à-vis des trajectoires tabulées, semblent donc efficaces également pour des flammes de diffusion.

#### Profils d'espèces

Les profils de fraction massique (figure 2.7) de  $\text{H}_2\text{O}$  sont mieux prédits avec le modèle FTC2 qu'avec le modèle FTC1 dont les écarts par rapport à la référence (Di) atteignent 8%. En revanche, l'écart sur CO (figure 2.8) dépasse 100% à partir de  $Y = 70 \text{ mm}$  ( $Y$  : la distance à la section d'injection) avec le modèle FTC2, ce qui n'est pas le cas avec le modèle FTC1 (hormis en deux pics situés à un rayon de 10 mm). Pour les autres espèces (voir annexe E), les résultats obtenus avec FTC1 et FTC2 et Di sont comparables, seuls les profils de  $\text{CO}_2$  présentent des écarts inférieurs à 5% par rapport à Di pour FTC 1 et FTC2.

Les profils d'espèces avec FTC3 sont assez différents pour certaines espèces, notamment le CO. Sans comparaison avec une résolution directe de la cinétique détaillée ou avec une expérience, il n'est pas possible de déterminer si les résultats obtenus avec cette cinétique détaillée sont valides, et le cas échéant meilleurs que ceux obtenus avec une chimie réduite. On constate néanmoins que le choix d'une cinétique réduite ou détaillée est critique, notamment pour la prédiction d'espèces polluantes comme le CO. Les écarts entre chimie complexe et chimie réduite (FTC3 vs. FTC1) sont en effet bien plus grand que les écarts entre chimie tabulée et chimie résolue directement (FTC1 ou FTC2 vs. Di).

---

5. La convergence en maillage a été vérifiée : un maillage de 400 000 cellules donne exactement les mêmes résultats que celui de 200 000 cellules.

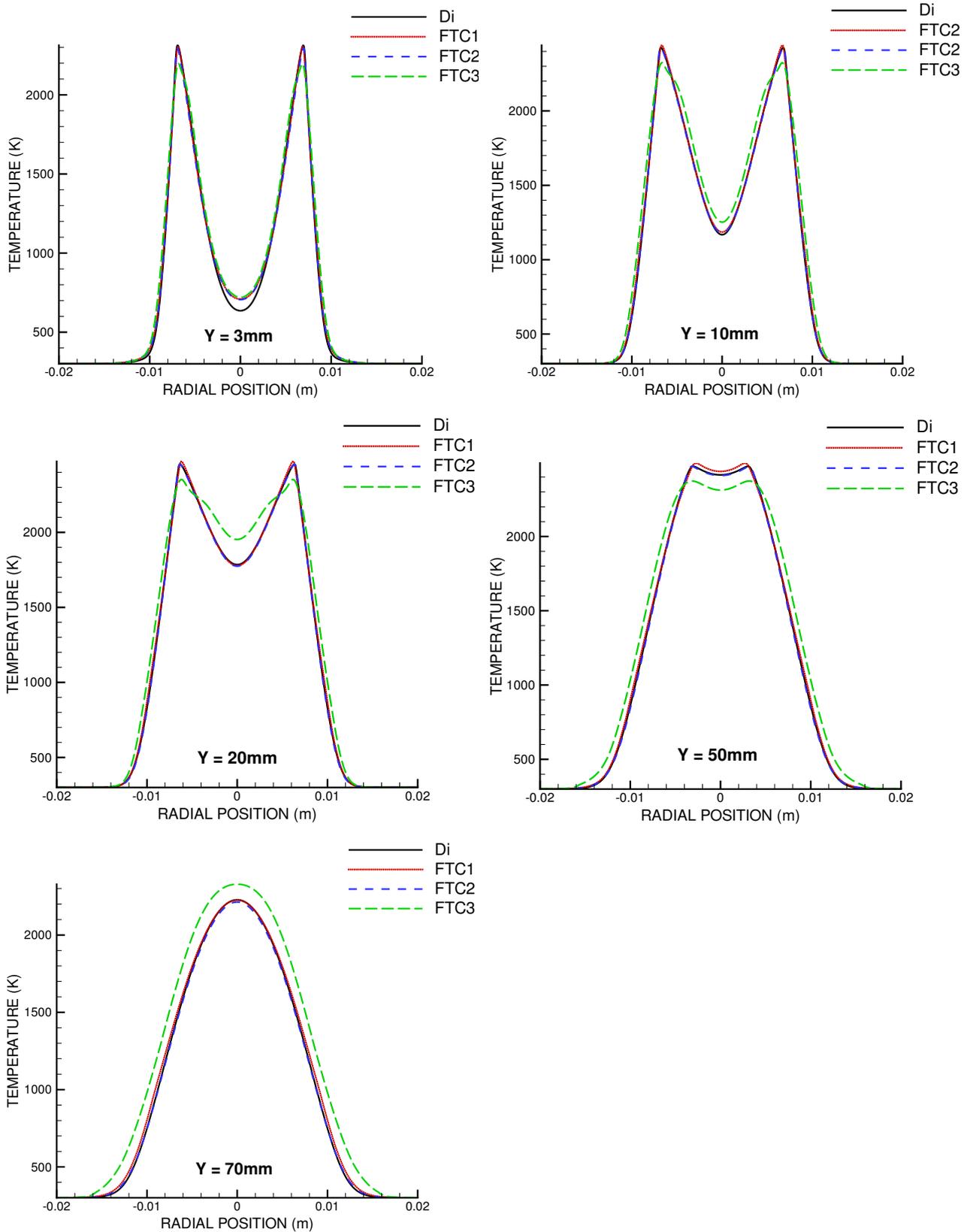


FIGURE 2.5 – Comparaison des profils de température obtenus avec différentes variantes FTC par rapport à la solution de référence ( $Di$ ).

### Bilan des calculs de validation

Les résultats obtenus sur la flamme de Santoro montrent que l'extension du modèle FTC aux flammes de diffusion (cas  $FTC1$  dans les tests) permet d'améliorer les prédictions des espèces. En

effet, si pour certaines espèces l'erreur est légèrement plus élevée (jusqu'à 8% au plus) l'erreur sur le CO obtenue avec la version flamme de diffusion de FTC est beaucoup plus raisonnable que celle obtenue avec la version flamme de prémélange, qui peut atteindre 100%. En revanche, la version flamme de diffusion du modèle FTC n'apporte pas d'amélioration sur des grandeurs comme la vitesse axiale ou la température qui sont en fait déjà bien prédites avec le modèle FTC dans sa version prémélange. Par ailleurs, il faut noter que l'écart entre les résultats obtenus avec le modèle FTC et ceux obtenus avec une résolution directe de la chimie est plus faible que l'écart entre les résultats obtenus avec une chimie complexe et ceux obtenus avec une chimie réduite, toutes choses égales par ailleurs.

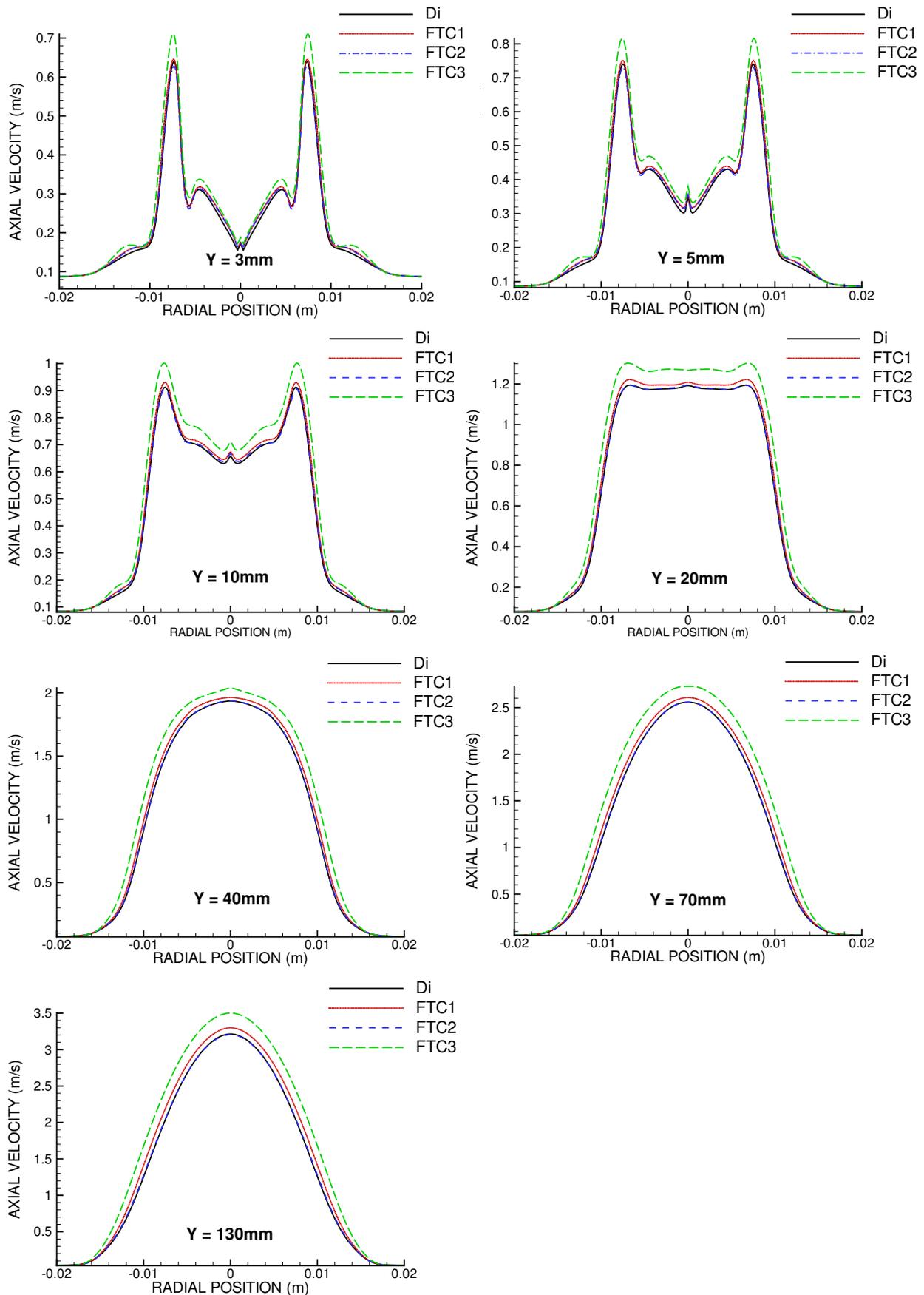


FIGURE 2.6 – Comparaison des profils de vitesse obtenus avec différentes variantes FTC par rapport à la solution de référence (Di). Les sur-vitesses obtenues sur les premiers profils à 0,01 m de l'axe résultent de problèmes numériques non résolus durant ce travail de thèse.

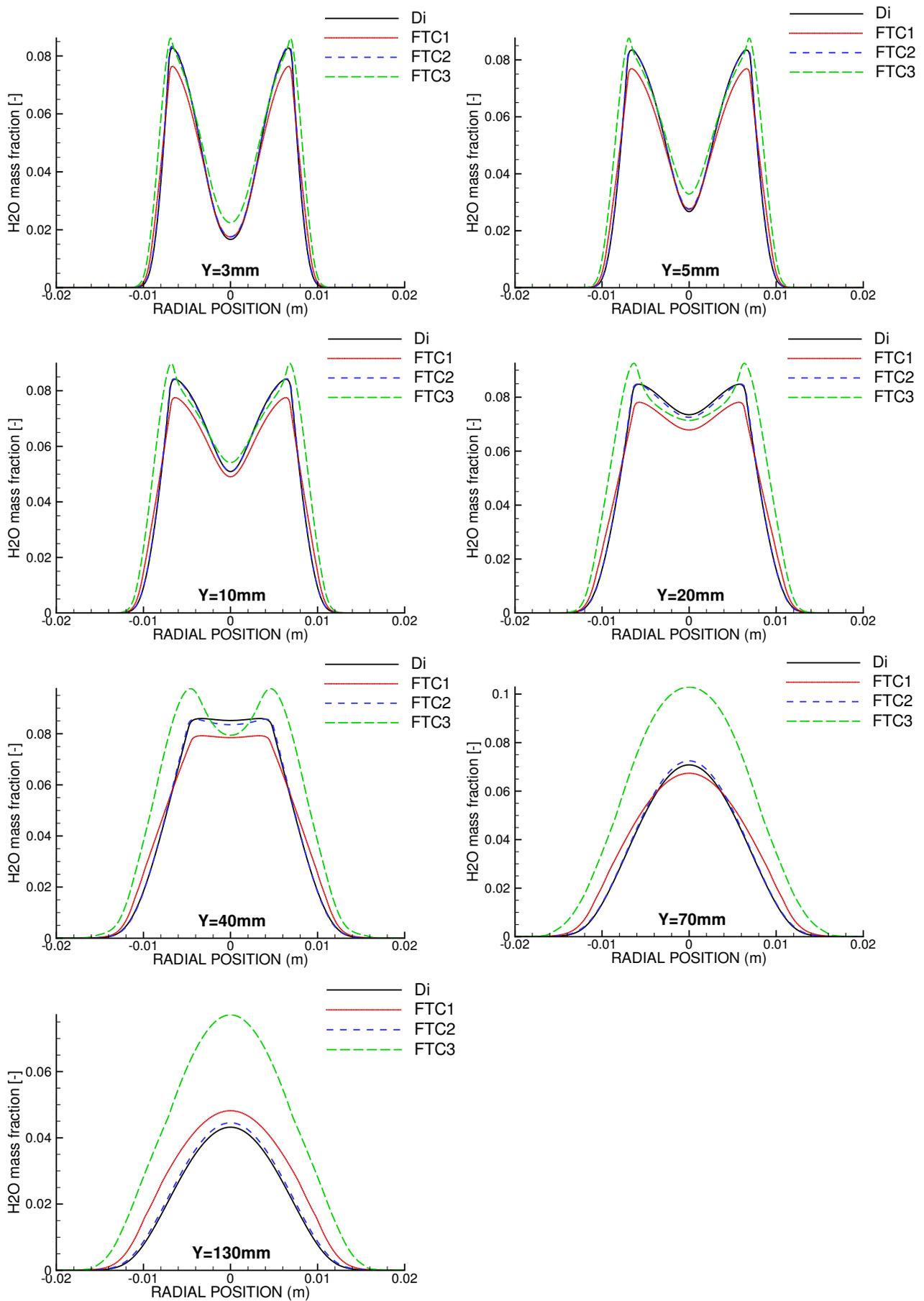


FIGURE 2.7 – Comparaison des profils de H<sub>2</sub>O obtenus avec différentes variantes FTC par rapport à la solution de référence (Di).

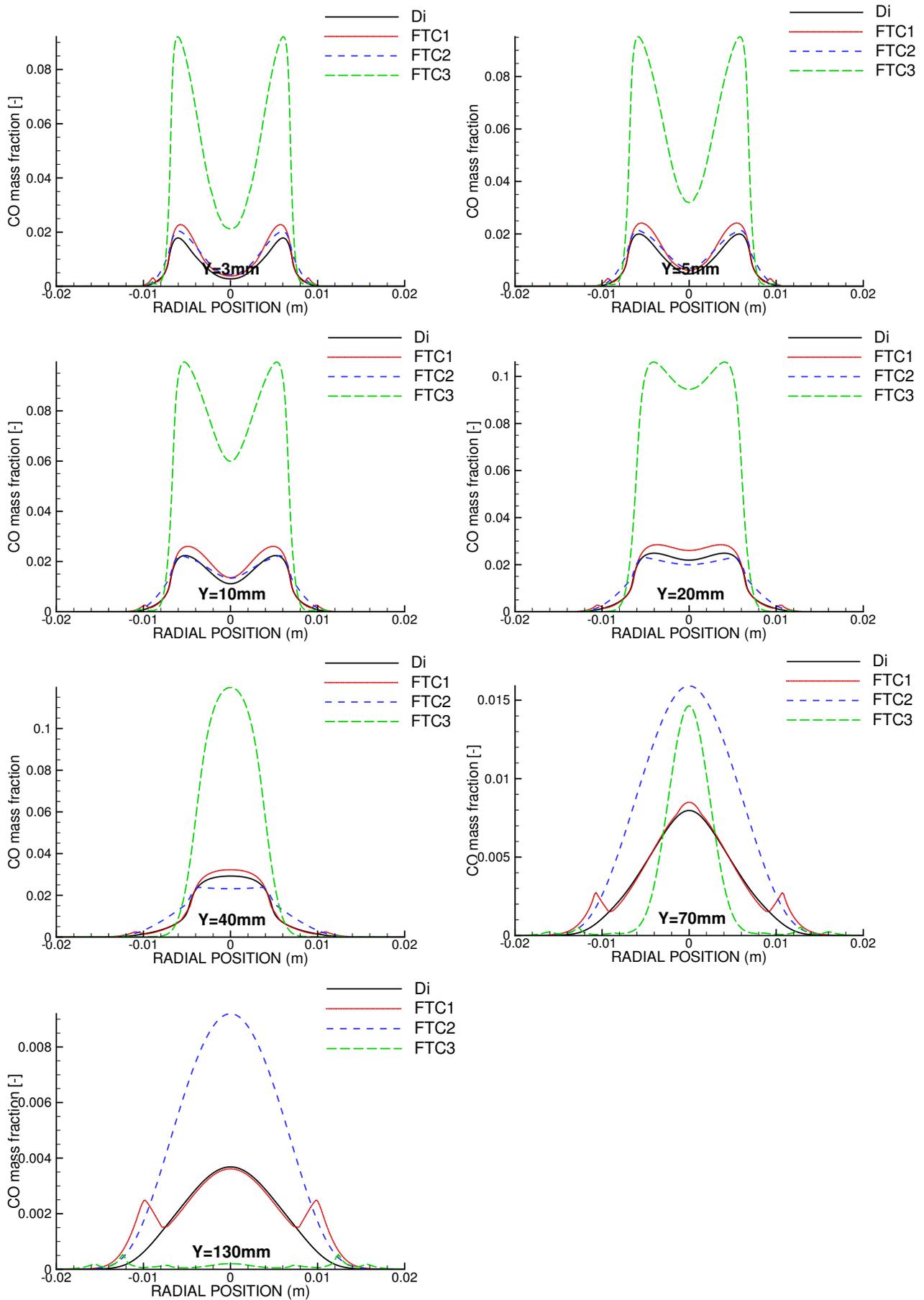


FIGURE 2.8 – Comparaison des profils de CO obtenus avec différentes variantes FTC par rapport à la solution de référence (Di).

## Bilan

Le modèle FTC de CEDRE a été modifié pour améliorer le traitement des flammes de diffusion. L'approche retenue, issue de la littérature, consiste à utiliser une table générée à partir d'une flamme de diffusion à contre-courant plutôt qu'une table générée à partir d'une flamme libre prémélangée, en conservant une indexation de cette table par les variables  $(Z,c)$ . Cette indexation permet d'envisager l'incorporation des solutions de flammes instationnaires dans la table, cela afin d'améliorer la modélisation des zones d'extinction et de ré-allumage qui peuvent apparaître localement dans les flammes turbulentes. Cela permet aussi de préparer le couplage des tables prémélangée et de diffusion via un index de régime de flamme (comme l'indice de Takeno), dans l'optique de mieux prédire les écoulements en régime mixte, c'est à dire ceux qui présentent dans la zone de réaction, à la fois des structures de flamme de diffusion, de flamme partiellement prémélangée et de flamme parfaitement prémélangée. La modification du modèle FTC pour traiter le régime de diffusion n'implique finalement pas de changement au sein même du code CEDRE puisque les variables  $(Z,c)$  sont déjà utilisées en prémélange. En revanche, l'outil de génération des tables basé sur Cantera a dû être modifié pour obtenir les solutions de flammes de diffusion à contre-courant stationnaires. Malheureusement, il n'est pas possible d'obtenir avec Cantera les solutions instationnaires de flamme, qui n'ont donc pas été incorporées dans les tables durant ce travail de thèse. L'utilisation d'une table générée à partir d'une flamme de diffusion a permis d'améliorer la prédiction des espèces sur une flamme étudiée par Santoro [90, 91] par rapport aux résultats obtenus avec une table prémélangée. Néanmoins, on constate des écarts allant jusqu'à 8% sur les profils de certaines espèces, entre les résultats obtenus avec la méthode FTC et ceux obtenus avec une résolution directe de la chimie. Cela peut être dû au fait que la structure de la flamme à contre-courant tabulée est différente de celle d'une flamme co-courant comme la flamme de Santoro. On peut tout de même considérer pour la suite de ce travail que ces résultats sont acceptables, d'autant que l'écart entre FTC et la référence reste modéré devant l'écart entre les solutions FTC obtenues avec chimie détaillée et celles obtenues avec chimie complexe. Autrement dit, même si le traitement de la chimie complexe au moyen du modèle FTC dégrade la qualité des prédictions par rapport à une résolution directe de cette cinétique complexe, les prédictions obtenues avec FTC restent de bien meilleure qualité que celles obtenues avec la résolution directe d'une cinétique chimique réduite. L'apport du modèle FTC en terme de modélisation de la formation des polluants à un coût CPU raisonnable reste donc intéressant.

## CHAPITRE 3

### Couplage de l'approche FTC avec un modèle de suies non tabulé

Dans ce chapitre, on s'intéresse à la modélisation de la production de particules de suie au sein d'un foyer aéronautique. Un travail sur ce sujet initié par Dorey lors de sa thèse [23, 24] a conduit d'une part à l'implémentation du modèle semi-empirique de Leung et al. [58] dans CEDRE, et d'autre part au développement d'une méthodologie de calcul pour la prise en compte du rayonnement dans CEDRE en présence de particules de suie. Dans le présent travail, on souhaite valider l'utilisation du modèle de Leung et al. lorsqu'il est couplé avec l'approche FTC dans le cadre d'un régime de diffusion, ce qui n'était pas possible au moment de la thèse de Dorey. Pour cela, après une brève présentation du modèle et de la modélisation du rayonnement, on applique le couplage FTC - modèle de Leung à une flamme de diffusion co-courant. Cette simulation est rendue possible par les travaux effectués au chapitre 2 pour étendre le modèle FTC de CEDRE au régime de diffusion. Certaines constantes du modèle ont été ajustées et une modification de son implémentation est proposée pour diminuer le nombre d'équations transportées, et donc, le temps de calcul. Le cas de validation retenu a aussi permis de valider le couplage FTC - modèle de Leung - calcul radiatif. L'effet du rayonnement sur l'écoulement ne peut être en effet simulé indépendamment de la modélisation des suies. Enfin, sur la base des résultats obtenus et des travaux de thèse précédents, les limites de la méthode sont identifiées dans l'optique de son application à des calculs 3D de configurations industrielles.

#### Sommaire

<b>3.1</b>	<b>Modèle de Leung et al. pour la formation des suies . . . . .</b>	<b>44</b>
<b>3.2</b>	<b>Modification du couplage FTC - modèle de Leung et al. . . . .</b>	<b>47</b>
<b>3.3</b>	<b>Validation du couplage FTC - modèle de Leung sur une flamme de dif-</b>	
	<b>fusion laminaire . . . . .</b>	<b>48</b>
3.3.1	Rappel du cas de validation . . . . .	48
3.3.2	Modélisation des transferts radiatifs . . . . .	49
3.3.3	Comparaison du calcul avec suies avec les résultats expérimentaux . . . . .	49
<b>Bilan</b>	<b>. . . . .</b>	<b>54</b>

### 3.1 Modèle de Leung et al. pour la formation des suies

De nombreux modèles de suies sont disponibles dans la littérature scientifique et une revue récente de ces modèles figure dans les travaux de thèse de Hernández-Vera [41] et Dorey [23, 24]. Notons simplement ici que l'on peut distinguer trois grande familles de modèles de suies. La première est constituée de modèles empiriques, qui utilisent des corrélations tirées de mesures expérimentales pour évaluer la fraction volumique de suie à partir de grandeurs comme la fraction massique de carburant ou la richesse locale du mélange. Ces modèles présentent l'avantage de pouvoir s'utiliser en complément de modèles chimiques relativement simples tels que ceux basés sur une cinétique chimique à seule une étape.

La seconde famille rassemble des modèles dits « semi-empiriques ». Ceux-ci sont basés sur un découpage phénoménologique de la production/destruction des suies sous forme de différentes étapes d'une cinétique réactionnelle. Ces étapes sont en général les suivantes : une ou plusieurs étapes de nucléation, correspondant à la formation de noyaux radicalaires solides à partir d'espèces gazeuses appelées précurseurs ; une ou plusieurs étapes de croissance des particules de suie par des réactions chimiques ayant lieu en surface de ces particules, que l'on qualifie par la suite de croissance en surface ; enfin, une ou plusieurs étapes d'oxydation des particules de suie qui réduisent la taille de ces dernières. Certains mécanismes incluent également une étape de coagulation représentant la croissance des particules de suie par coalescence et par agglomération de particules.

Ces modèles restent des approches relativement simplifiées car les phénomènes physiques de nucléation, de croissance, etc... sont très complexes et ne peuvent en réalité pas être décrits par un faible nombre d'étapes chimiques. De plus, un certain nombre d'hypothèses très restrictives sont faites quant à la structure des particules de suies, qui sont le plus souvent supposées sphériques, et quant à leur distribution en taille, qui peut être supposée mono-disperse localement. Toutefois, ils offrent une modélisation plus détaillée que les modèles empiriques, tout en induisant une augmentation potentiellement modérée du coût de calcul. En effet, outre la fraction massique et le nombre de particules de suies par unité de masse de mélange, seules quelques espèces gazeuses supplémentaires doivent être transportées pour que les modèles semi-empiriques de ce type soient fermés. Obtenir les concentrations de ces espèces peut être coûteux avec une résolution directe de la cinétique chimique, car ce sont souvent les espèces intermédiaires d'une cinétique chimique détaillée. Mais avec un modèle comme FTC, l'accès à ces concentrations devient possible pour un coût modéré.

Pour finir, on regroupera dans une dernière famille les approches plus détaillées de modélisation de la formation des suies. On trouve parmi celles-ci des approches sectionnelles ou des méthodes des moments permettant de décrire la polydispersion en taille des particules de suies. Ces méthodes sont généralement couplées à l'utilisation d'un schéma cinétique très détaillé contenant des centaines d'espèces décrivant la nucléation, la croissance, et l'oxydation des suies, auquel il faut ajouter une cinétique chimique détaillée pour décrire les réactions de combustion dans la phase gazeuse. Ce type de modèles est pour le moment inenvisageable pour la simulation de configuration industrielles ou semi-industrielles.

C'est finalement le modèle semi-empirique de Leung et al.[58] qui a été retenu lors de la thèse de Dorey [23], car il représentait un bon compromis entre le temps de calcul et la description de la production des suies. Le travail sur ce modèle se poursuit donc dans l'étude présente. Ce modèle implique la résolution de deux équations de transport supplémentaires, l'une pour la fraction massique de suie  $Y_{C_s}$ , l'autre pour la densité de particules de suies  $N$  (nombre de particules de suies par unité de masse de mélange). Il repose également sur une cinétique à quatre étapes qui sont résumées dans le tableau 3.1, où  $f(S)$  est une fonction de la surface  $S$  des particules de suies, supposées sphériques, et  $K_n(T)$ ,  $K_g(T)$ ,  $K_{\text{oxid.O}_2}(T)$  et  $K_{\text{oxid.OH}}(T)$  sont des vitesses de réaction exprimées sous forme d'une loi d'Arrhenius. Nous reviendrons plus tard sur les constantes utilisées pour ces vitesses de réaction. Évidemment, les fractions massiques des espèces impliquées dans ces quatre étapes de formation et de destruction des suies doivent être connues et donc transportées, et le modèle de combustion utilisé pour la phase gazeuse doit permettre la prise en compte des réactions chimiques correspondantes.

L'équation de transport de la fraction massique de suie  $Y_{C_s}$  s'écrit de la même manière que celle des espèces gazeuses. Néanmoins, dans cette étude, le flux de diffusion moléculaire  $\mathbf{J}_{C_s}$  a été modifié. Ce flux est modélisé différemment de celui des espèces gazeuses, comme préconisé par Kennedy et al.

Étape	Formulation	Taux de réaction [kmol.m <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]
nucléation	$C_2H_2 \longrightarrow 2 C_s + H_2$	$\dot{W}^{nucl.} = K_n(T)[C_2H_2]$
croissance en surface	$C_2H_2 + C_s \longrightarrow 3 C_s + H_2$	$\dot{W}^{surf. growth} = K_g(T) f(S) [C_2H_2]$
oxydation par O <sub>2</sub>	$C_s + 0.5 O_2 \longrightarrow CO$	$\dot{W}^{oxid.O_2} = K_{oxid.O_2}(T) S [O_2]$
oxydation par OH	$C_s + OH \longrightarrow CO + H$	$\dot{W}^{oxid.OH} = K_{oxid.OH}(T) S [OH]$

TABLE 3.1 – Cinétique de formation des suies proposée par Leung et al. [58]

[47] : la diffusion de Fick a été supprimée, et celle due à la thermophorèse (ou effet Soret) a été ajoutée à la place. Le flux de diffusion s'écrit ainsi :

$$\mathbf{J}_{C_s} = -c_{th} \frac{\mu}{T} Y_{C_s} \nabla T, \quad (3.1)$$

où  $c_{th}$  est une constante sans dimension valant 0,55, et  $\mu$  est la viscosité du mélange. Cette modification du calcul du flux de diffusion moléculaire des suies a un impact significatif sur la topologie du champ de fraction volumique de suie, comme montré en annexe F.

L'équation de transport de la densité de particules de suie s'écrit :

$$\frac{\partial \rho N}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} N) = -\nabla \cdot (\mathbf{J}_N) + \dot{\omega}_N^{nucl.} \quad (3.2)$$

où  $\mathbf{J}_N$  est le flux de diffusion moléculaire, et  $\dot{\omega}_N^{nucl.}$  est le taux de création de noyaux de suie, qui s'écrit :

$$\dot{\omega}_N^{nucl.} = \frac{2}{C_{min}} N_A \dot{W}^{nucl.} \quad (3.3)$$

où  $C_{min}$ , dont la valeur est fixée à 100 par Leung et al., est le nombre d'atomes de carbone d'une particule nouvellement créée,  $N_A$  le nombre d'Avogadro et  $\dot{W}^{nucl.}$  un taux de réaction dont l'expression est donnée dans le tableau 3.1. Comme pour la fraction massique de suies, le flux de diffusion moléculaire pour le scalaire  $N$  n'est pas celui calculé par défaut dans le solveur CHARME de la chaîne CEDRE. Pour cette étude, on impose un flux nul, soit :

$$\mathbf{J}_N = 0 \quad (3.4)$$

Le modèle de Leung et al. contient normalement une étape d'agglomération. Néanmoins le modèle fait l'hypothèse que les particules de suie sont sphériques et les travaux de Liu et al. [59] montrent que, dans ce cas, la surface totale des particules de suie agglomérées est mieux restituée dans le calcul en prenant la surface totale des suies non agglomérées plutôt que celle de particules sphériques résultant de l'agglomération. Ainsi, comme c'est le cas dans les travaux de Dorey et al.[24], l'étape d'agglomération n'est pas prise en compte dans ce travail.

Le modèle de Leung et al. [58] implique la résolution des équations de transport de la fraction massique des espèces  $C_2H_2$ ,  $O_2$ ,  $OH$ ,  $CO$ ,  $H_2$  et  $H$ . Dans les travaux de Dorey et al. [24], le modèle de Leung a été utilisé en conjonction avec le modèle FTC. On fait l'hypothèse que les particules de suies sont formées en aval de la zone de réaction des précurseurs et espèces oxydantes. D'après cette hypothèse, cette zone de réaction n'est pas influencée par la formation des suies et les termes sources chimiques peuvent donc être exprimés à l'aide d'une table FTC ne contenant pas de suies. En aval de cette zone de réaction, où les suies sont supposées se former, seule l'évolution des particules de suie influe sur la concentration de ces espèces. Ainsi, les taux de réaction des espèces chimiques apparaissant dans le modèle de Leung et al. sont exprimés comme la somme des taux issus de la modélisation FTC et des taux issus du modèle de Leung, où l'un des deux termes s'annule selon la position considérée dans l'écoulement, si les hypothèses sont respectées :

$$\dot{\omega}_i = \dot{\omega}_i^{TAB} + \dot{\omega}_i^{soot} \quad (3.5)$$

Ajoutons que l'interaction avec la turbulence n'est pas prise en compte pour la formation des suies dans cette approche. En revanche, le rayonnement des suies et autres espèces gazeuses peut parfaitement être pris en compte à l'aide d'un des solveurs dédiés ASTRE ou REA, du code CEDRE.

Hernández-Vera [41] propose une autre approche pour coupler le modèle de Leung et al. avec le modèle FTC. Dans cette approche, le modèle de Leung et al. est utilisé pour générer une table contenant directement la fraction massique de suies. Le calcul des fractions massiques et du nombre de particules de suie par unité de masse de mélange est fait lors de la génération des tables, sans rétroaction du modèle de Leung sur la composition du mélange dans la phase gazeuse. Seul l'effet du rayonnement des suies sur la température du mélange est pris en compte. De ce point de vue, cette approche est assez similaire à celle de Dorey et al. mais, contrairement à celle-ci, l'approche d'Hernández-Vera permet de prendre en compte l'interaction des suies avec la turbulence. En effet, lorsque les suies sont tabulées, l'interaction des suies avec la turbulence est modélisée au travers du modèle FTC (via une approche statistique, de flamme filtrée, etc...). Cependant, dans l'approche d'Hernández-Vera, la concentration des suies extraite de la table est figée, ce qui impose de rajouter une dimension enthalpie à la table si on souhaite prendre en compte l'effet des pertes thermiques sur les suies. L'approche de Dorey et al. permet d'éviter cela si les pertes thermiques sont situées hors du front de flamme puisque le modèle de Leung et al. est directement appliqué dans CHARME, où la température locale, éventuellement influencée par les pertes thermiques, est connue. En revanche, s'il y a également des pertes thermiques dans le front de flamme, il faut de toutes façons ajouter la dimension enthalpie à la table FTC.

Pour finir, on résume ci-dessous les résultats obtenus par Dorey [23, 24] et Hernández-Vera [41, 53] – avec leur approches respectives – permettant de se faire une opinion sur la validité du modèle semi-empirique de Leung et al. couplé à une approche FTC.

Dorey et Hernández-Vera ont tous deux validé leur modèle de suie à l'aide des mesures expérimentales de Xu et al. [112] portant sur une flamme prémélangée. Dorey et al. rapportent une surestimation de la fraction volumique d'un facteur 3 au plus, alors que les résultats de Hernandez-Vera montrent des écarts de  $\pm 50\%$ . Tous deux obtiennent des résultats indiquant que la fraction volumique de suie continue à croître en aval de la flamme, alors que les mesures expérimentales montrent plutôt que cette croissance tend à s'arrêter dans cette zone. On peut donc penser que le niveau de suie obtenu par les modèles est fortement surrestimé en aval de la flamme, bien qu'on ne dispose pas de mesures dans cette zone. Notons que Dorey et Hernandez ont tous deux modifié les constantes des vitesses de réaction du modèle de Leung et al. pour obtenir ces résultats. Le jeu de constantes utilisé diffère entre leurs travaux. Les valeurs utilisées sont données dans le tableau 3.2.

Dorey ne disposait pas au moment de ses travaux d'une version du modèle FTC dans CEDRE permettant de traiter une flamme de diffusion. Le modèle n'a donc pas été validé pour ce régime et cela doit être fait dans la suite de ce travail. En revanche, Hernandez-Vera a testé le modèle sur une flamme de diffusion à contre-courant. Un nouvel ajustement de la constante pré-exponentielle du terme de croissance en surface a été nécessaire (voir tableau 3.2). Les profils expérimentaux de la fraction volumique de suie sont globalement bien reproduits, avec une surestimation d'un facteur 2 au maximum pour ce cas test.

D'après les travaux de Dorey et Hernández-Vera, le couplage du modèle de Leung et al. avec FTC permet d'obtenir de façon satisfaisante les niveaux de fraction volumique de suie. Néanmoins, on remarque que les valeurs des constantes doivent être ajustées pour obtenir des niveaux satisfaisants. Comme cela a déjà été souligné dans la littérature, ces constantes dépendent du cas d'application traité, et notamment du régime de combustion [41, 53] ou encore du carburant utilisé [58]. Cela risque de poser problème pour la simulation de configurations industrielles ou semi-industrielles, comme celle visée dans la seconde partie de ce mémoire. Mais, compte tenu de l'état de l'art pour la simulation de la formation des suies, tester le couplage FTC - modèle de Leung sur ce type de configuration reste très instructif.

La méthode de couplage FTC - modèle de Leung proposée par Dorey sera donc utilisée dans la suite de ce travail. Il est intéressant de vérifier la validité de cette méthode sur une flamme de diffusion laminaire comme cela a été fait pour la méthode de Hernández-Vera. Outre le fait qu'un régime de combustion différent est testé, cela permet d'effectuer la validation d'un calcul couplé FTC-suies-

step	A	$\beta$	T <sub>a</sub>
Dorey [23, 24]			
nucleation	7,7.10 <sup>1</sup>	0	21100
surf.growth	3,0.10 <sup>-13</sup> (pour $f(S) = \rho N$ )	0	12100
oxid.O <sub>2</sub>	715	0.5	19800
oxid.OH	0,36	0.5	0
Hernandez-Vera [41, 53]			
nucleation	0,1.10 <sup>5</sup>	0	21100
surf.growth	0,1.10 <sup>4</sup> [prem] (pour $f(S) = S^{1/2}$ )	0	12100
	1,4.10 <sup>4</sup> [non prem.]	0	12100
oxid.O <sub>2</sub>	0,1.10 <sup>5</sup>	0.5	19680
oxid.OH	106	-0.5	0

TABLE 3.2 – Constantes utilisées par différents auteurs pour le modèle de Leung.

rayonnement avec CEDRE, ce qui n'a pas pu être réalisé avec une flamme prémélangée puisque le profil de température expérimental était imposé [24]. Avant de présenter cette validation, il nous faut revenir dans les sections suivantes sur certains points concernant le couplage du modèle de Leung avec FTC dans le code CEDRE.

### 3.2 Modification du couplage FTC - modèle de Leung et al.

La validation [24] du modèle de Leung et al. implémenté dans CEDRE sur flamme prémélangée laminaire 1D a été effectuée avec une version de FTC n'utilisant aucun terme de relaxation vers les trajectoires tabulées. Le fait que le cas test soit une flamme 1D explique que la structure de flamme obtenue dans CEDRE soit très proche de la structure tabulée, même sans corrections. Finalement, dans ces simulations, seules les espèces minoritaires C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, OH, H<sub>2</sub> et H intervenant dans la cinétique réactionnelle proposée par Leung et al. sont déviées des trajectoires tabulées, via les termes source chimiques du modèle de suies. Les espèces majoritaires O<sub>2</sub> et CO ne sont déviées que de façon négligeable du fait que l'écart entre fractions massiques locales et tabulées reste faible en valeur relative. La rétroaction du modèle de Leung sur la phase gazeuse prise en compte dans les calculs de Dorey et al. [24] se traduit notamment par la consommation du précurseur C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>.

Au chapitre 1, l'intérêt d'appliquer des termes de relaxation vers les trajectoires tabulées a été montré. Cependant, ces termes tendent par construction à annuler l'effet de rétroaction du modèle de Leung sur la phase gazeuse. Par conséquent, le choix de l'utilisation de ces termes de relaxation pour les espèces présentes dans le modèle de Leung est discutable. On peut choisir d'annuler le terme de relaxation pour les espèces utilisées dans le modèle de Leung, sachant qu'aucune déviation de ces espèces par rapport à la table ne sera corrigée. Des déviations autres que celles liées à la rétroaction des suies ne seront pas non plus corrigées, ce qui introduit un biais dans la prédiction de ces espèces. On peut, au contraire, faire l'hypothèse que la rétroaction du modèle de suie sur la phase gazeuse ne change pas fondamentalement les niveaux de suie prédits et peut être négligée, ce qui conduit à

maintenir l'utilisation des termes de relaxation pour toutes les espèces. C'est cette dernière option qui a été retenue dans ce travail.

Le modèle de Leung ne contient pas la rétroaction sur les espèces  $C_2H_2$ , OH,  $H_2$  et H lorsqu'il est couplé avec FTC dans CEDRE, du fait de l'utilisation des termes de relaxation de FTC. Par conséquent, les fractions massiques de ces espèces obtenues par la résolution d'équations de transport, sont très proches des fractions massiques tabulées. Transporter les espèces  $C_2H_2$ , OH,  $H_2$  et H plutôt qu'extraire leurs fractions massiques de la table n'a donc d'intérêt que si celles-ci ont une influence forte sur les propriétés du mélange, ce qui n'est pas toujours le cas. C'est pourquoi, la possibilité de fournir directement au modèle de Leung les fractions massiques extraites de la table a été implémentée dans le code CEDRE, se traduisant par une modification du modèle de suie. On peut ainsi choisir de transporter les espèces  $C_2H_2$ , OH,  $H_2$  et H si elles sont sélectionnées au moyen des critères énergétiques proposés au chapitre 1, ou de les extraire de la table si elles ne sont pas sélectionnées. Dans le cas où l'on choisit d'extraire les fractions massiques de ces espèces de la table, il faut s'assurer que la conservation de la masse par le modèle de suie soit préservée. Il est dans ce cas nécessaire de répercuter le terme source des espèces tabulées sur l'espèce corrective introduite au chapitre 1. Par exemple, dans l'étape de nucléation, la consommation massique de  $C_2H_2$  et la production de  $H_2$  sont répercutées sur l'espèce corrective (qui est soit une espèce de la table que l'on transporte, soit une espèce fictive comme proposé au chapitre 1). Il faut noter que la fraction massique de suie n'est pas présente dans la table, ce qui implique qu'elle n'est pas relaxée vers une trajectoire tabulée.

La modification du modèle de Leung a été implémentée dans le code CEDRE. Ainsi, lorsque l'on choisit d'extraire directement les fractions massiques de  $C_2H_2$ , OH,  $H_2$  et H de la table, le couplage FTC - modèle de Leung et al. est réalisé au travers des termes source de la façon suivante :

$$\dot{\omega}_{C_s}^{\text{soot}} = \dot{\omega}_{C_s}^{\text{nucléation}} + \dot{\omega}_{C_s}^{\text{surf. growth}} + \dot{\omega}_{C_s}^{\text{oxid. O2}} + \dot{\omega}_{C_s}^{\text{oxid. OH}} \quad (3.6)$$

$$\dot{\omega}_{O_2}^{\text{soot}} = \dot{\omega}_{O_2}^{\text{oxid. O2}} \quad (3.7)$$

$$\dot{\omega}_{CO}^{\text{soot}} = \dot{\omega}_{CO}^{\text{oxid. O2}} + \dot{\omega}_{CO}^{\text{oxid. OH}} \quad (3.8)$$

$$\dot{\omega}_k^{\text{soot}} = \dot{\omega}_{C_2H_2}^{\text{nucléation}} + \dot{\omega}_{H_2}^{\text{nucléation}} + \dot{\omega}_{C_2H_2}^{\text{surf. growth}} + \dot{\omega}_{H_2}^{\text{surf. growth}} + \dot{\omega}_{OH}^{\text{oxid. OH}} + \dot{\omega}_H^{\text{oxid. OH}} \quad (3.9)$$

où  $\dot{\omega}_i^{\text{soot}}$  est le terme source massique de l'espèce  $i$  induit par le modèle de formation des suies qui s'ajoute aux autres termes source chimiques, et  $k$  est l'espèce corrective sur laquelle est répercutée la masse (espèce de la table transportée, ou espèce fictive).

Que l'on choisisse de transporter les espèces  $C_2H_2$ , OH,  $H_2$  et H avec une relaxation vers les trajectoires tabulées ou que l'on extraie leur fraction massique directement dans la table, la rétroaction des suies sur les concentrations dans la phase gazeuse n'est pas prise en compte. Rappelons que c'est aussi le cas dans l'approche de Hernández-Vera [41, 53]. Il n'en reste pas moins que cela n'est pas satisfaisant, et que de nouvelles méthodes permettant de prendre en compte cette rétroaction sont à envisager. Par exemple, la méthode de tabulation hybride récemment proposée par Ribert et al. [87] constitue une solution possible.

### 3.3 Validation du couplage FTC - modèle de Leung sur une flamme de diffusion laminaire

#### 3.3.1 Rappel du cas de validation

Afin de valider le couplage entre le modèle de Leung et le modèle FTC dans le cas d'un régime de diffusion, la configuration expérimentale de Santoro et al. a été retenue. Cette configuration ayant permis de valider l'extension du modèle FTC au régime de diffusion a déjà été évoquée au chapitre 2. De nouvelles simulations ont été réalisées, en prenant cette fois en compte la formation des suies et l'effet du rayonnement, afin de se comparer aux mesures expérimentales. C'est la table basée sur une cinétique détaillée qui a été utilisée pour ces calculs puisque l'on a besoin d'accéder aux concentrations d'espèces comme OH ou  $C_2H_2$ . On rappelle que c'est le cas numéro 2 (voir tableau 2.1) reporté dans [90] qui a été retenu pour les validations car c'est celui qui comporte le plus grand nombre de mesures expérimentales.

### 3.3.2 Modélisation des transferts radiatifs

Afin de prédire correctement la formation des suies, il est nécessaire de prédire correctement le champ de température qui intervient dans la cinétique de formation des suies proposée par Leung et al. Réciproquement, les particules de suies sont responsables d'émissions radiatives relativement importantes qu'il convient de prendre en compte pour prédire le champ de température. Pour valider les résultats du calcul face à l'expérience il est donc indispensable de réaliser un calcul couplant combustion en phase gazeuse, formation des suies et rayonnement. Afin de calculer les transferts radiatifs sans augmenter le temps CPU, il est apparu préférable de prendre en compte uniquement l'émission radiative des suies. En effet, cela peut se faire directement dans le solveur CHARME (décrit au chapitre A) sans recourir à un solveur indépendant pour le rayonnement. Cette façon de procéder est justifiée par une étude effectuée à l'Onera en parallèle à cette thèse, portant sur la même configuration (bien qu'utilisant un modèle de suies différent). Dans cette étude [25], un calcul de référence a été réalisé en couplant les solveurs CHARME et ASTRE (décrits en annexe A) de façon à établir une solution de référence prenant en compte une modélisation détaillée du rayonnement. Cette solution a ensuite été comparée à celle obtenue en modélisant directement l'émission des suies dans CHARME. Dans la simulation CHARME-ASTRE, les propriétés radiatives des gaz sont modélisées suivant une approche par bandes spectrales, le modèle CK [98]. Les particules de suie sont supposées homogènes et isothermes, et petites devant la longueur d'onde du rayonnement considéré. Le coefficient monochromatique  $\kappa_\nu$  est défini comme :

$$\kappa_\nu = \kappa_\nu^{gaz} + \kappa_\nu^{suié}, \quad (3.10)$$

où le coefficient d'absorption des gaz  $\kappa_\nu^{gaz}$  est donné par le modèle CK et le coefficient d'absorption des suies est modélisé selon :

$$\kappa_\nu^{suié} = A_\nu \nu f_\nu, \quad (3.11)$$

$\nu$  étant le nombre d'onde,  $f_\nu$  la fraction volumique de suies, et  $A_\nu$  une fonction sans dimension de l'indice optique complexe des particules prise ici comme une constante ( $A_\nu = 5.5$ ) [97].

Dans le calcul où l'on modélise directement le rayonnement des suies dans CHARME, on fait l'hypothèse que le milieu est semi-transparent gris, ce qui permet d'utiliser un coefficient d'absorption intégré sur tout le spectre (moyenne de Planck), donnant ainsi [97] :

$$\kappa^{suié} = C_s T f_\nu \quad (3.12)$$

où la constante  $C_s$  vaut  $1463 \text{ m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ . La puissance radiative est alors donnée par :

$$P^R = 4\kappa^{suié} \sigma T^4, \quad (3.13)$$

où  $\sigma$  est la constante universelle de Stefan. Ce calcul s'est avéré être en très bon accord avec le calcul couplé CHARME-ASTRE, validant ainsi la prise en compte de la seule émission des suies dans CHARME sur cette configuration de faible épaisseur optique. C'est cette approche qui a été utilisée dans les présents calculs de la flamme de Santoro pour modéliser l'effet des transferts radiatifs.

### 3.3.3 Comparaison du calcul avec suies avec les résultats expérimentaux

Des ajustements des constantes du modèle de Leung et al. ont été nécessaires pour obtenir dans le calcul une fraction volumique maximale comparable à celle mesurée expérimentalement. Le jeu de paramètres considéré comme le meilleur est donné dans le tableau 3.3. Par rapport au jeu initial de Dorey, la constante pré-exponentielle du terme de nucléation a été multipliée par 1,7. La constante pré-exponentielle de croissance en surface a été multipliée par 5 dans le même temps. On augmente donc globalement la production de suie pour traiter le régime de diffusion, ce qui va dans le même sens que les travaux de Hernández-Vera. Les prédictions obtenues avec ces paramètres sont analysées dans la suite de ce chapitre. Précisons que les calculs présentés ont été effectués avec l'option de couplage FTC - modèle de Leung qui consiste à extraire directement les fractions massiques de  $\text{C}_2\text{H}_2$ , OH,  $\text{H}_2$  et H de la table FTC.

---

1. Pour le calcul de la fraction volumique de suie, on fait l'hypothèse d'une masse volumique des suies valant  $2000 \text{ kg/m}^3$ .

step	A	$\beta$	$T_a$
nucleation	$1,33 \cdot 10^2$	0	21100
surf.growth	$0,15 \cdot 10^{-11}$ (pour $f(S) = \rho N$ )	0	12100
oxid.O <sub>2</sub>	715	0.5	19800
oxid.OH	0,36	0.5	0

TABLE 3.3 – constantes obtenues sur la configuration de flamme de diffusion de Santoro

Le champ de fraction volumique de suie obtenu numériquement est comparé au champ obtenu expérimentalement sur la figure 3.1. On remarque que l'allure générale du champ de suies est correctement reproduite. Cependant, la simulation prédit une absence de suies au niveau de l'axe de symétrie, ce qui n'est pas constaté dans l'expérience. Ce problème a déjà été évoqué par Kennedy et al. [47] qui préconisent d'ajouter une étape de nucléation des suies à partir des PAH pour y remédier. Les résultats de Kennedy et al. ont été obtenus avec le modèle de Leung et al. et une cinétique chimique à 24 espèces fournissant directement les termes source chimiques, donc sans utilisation d'une tabulation. Le problème constaté sur l'axe n'est donc pas dû à la méthode consistant à coupler FTC et modèle de Leung. En dehors de ce problème, on constate que la position du maximum de fraction volumique de suie obtenu dans CEDRE se situe trop en amont par rapport à l'expérience. Différentes combinaisons de paramètres pour les vitesses de réaction du modèle de Leung et al. ont été testées sans parvenir à décaler cette position vers l'aval. Ce déplacement du pic de fraction volumique de suie se retrouve sur

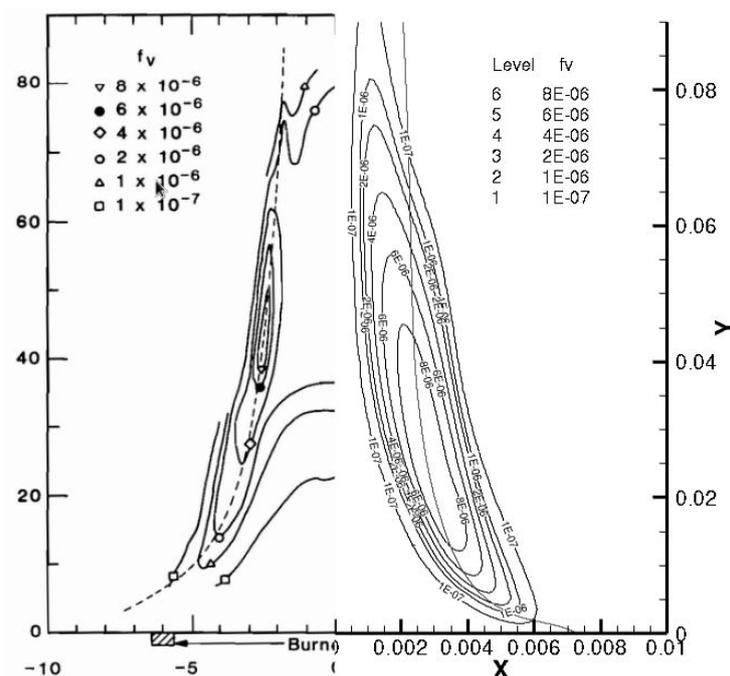


FIGURE 3.1 – Iso-contours du champ de fraction volumique de suie du cas 2 de la configuration de Santoro et al. [90]. A gauche les mesures expérimentales, à droite le résultat CEDRE avec couplage de FTC avec le modèle de suies.

les profils présentés sur la figure 3.2. On remarque que les résultats sont nettement moins bons que ceux obtenus par Kennedy. Le profil situé à 15 mm de l'injection montre un niveau de suies surestimé par le calcul CEDRE, ce qui correspond au fait que le pic de fraction volumique de suie est situé trop en amont. A l'inverse, le profil situé à 50 mm de l'injection montre un niveau de suies sous-estimé pour

les mêmes raisons. L'absence de suies près de l'axe, que l'on a déjà évoqué, est visible sur ce profil. On remarque aussi que le calcul CEDRE donne un pic un peu trop étalé. Malgré les imprécisions dans

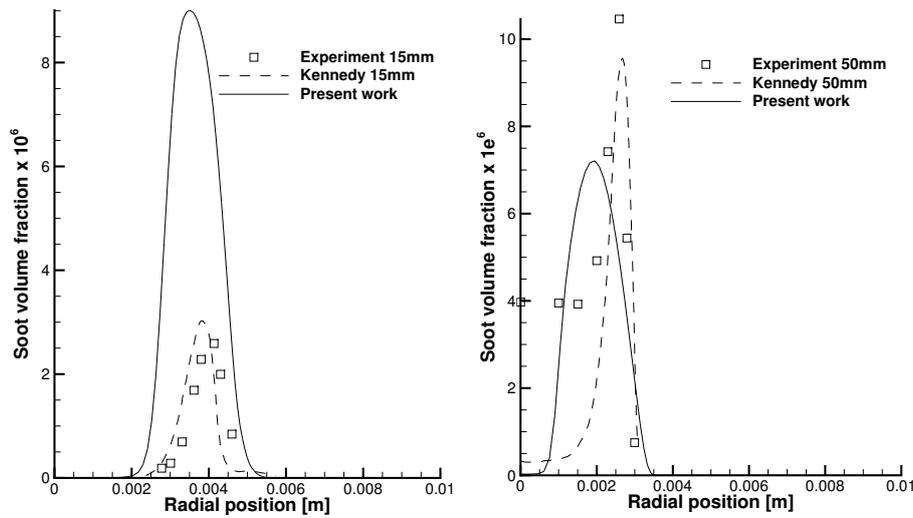


FIGURE 3.2 – Profils de fraction volumique de suie du cas 2 de la configuration de Santoro et al. [90]. Les résultats de la simulation de Kennedy et al. [47] ont été ajoutés sur cette figure.

la prédiction des suies, les niveaux obtenus permettent de prendre en compte de façon relativement satisfaisante l'effet du rayonnement des suies sur le champ de température. En effet, on voit sur la figure 3.3 que, par rapport à la simulation effectuée au chapitre 2 dans laquelle on ne prenait en compte ni les suies ni le rayonnement, les écarts avec l'expérience sont nettement plus faibles pour le couplage FTC - modèle de Leung - rayonnement. Les profils de température obtenus sont de précision comparable à ceux de Kennedy et al. Une surestimation du maximum de température subsiste sur le premier profil situé à 3 mm de l'injection, alors que l'allure du profil n'est pas correctement reproduite près de l'axe sur les deux derniers profils. Notons que la température à 70 mm de l'injection est globalement surestimée mais le niveau de suies à cet endroit est aussi nettement sous-estimé du fait de la mauvaise position du pic de fraction volumique de suies, ce qui implique une sous-estimation des pertes radiatives dans cette zone. Enfin, il est difficile d'expliquer pourquoi le profil de température à 20 mm de l'injection est en aussi bon accord avec l'expérience alors que les niveaux de suies à 15 mm de l'injection sont nettement surestimés comme le montre la figure 3.2. On peut poursuivre l'analyse de ces résultats en comparant les profils de fraction molaire de deux espèces intervenant dans le mécanisme de Leung et al. Concernant la première espèce  $C_2H_2$  (voir figure 3.4) qui est le seul précurseur pris en compte par le modèle, on observe un très bon accord avec l'expérience sur le profil situé à 20 mm de l'injection alors qu'à 7 mm, l'allure générale du profil n'est retrouvée ni avec CEDRE, ni par Kennedy et al. Il semble donc que l'absence de rétroaction du modèle de suies sur la concentration de  $C_2H_2$  ne soit pas la principale cause d'erreur dans ces prédictions puisque les travaux de Kennedy et al. la prennent en compte, n'ayant pas les contraintes de la tabulation. En ce qui concerne les profils de OH (voir figure 3.5), là encore la qualité des prédictions est mitigée puisque l'on retrouve un très bon accord sur le profil situé à 7 mm de l'injection alors que l'on surestime largement la fraction molaire sur le profil situé à 20 mm de l'injection, même si l'allure générale du profil est respectée. L'absence de consommation de OH par oxydation des suies dans CEDRE (rétroaction des suies non prise en compte) peut expliquer que l'on surestime sa concentration. Néanmoins, on constate que les résultats de Kennedy et al. présentent aussi ce problème de surestimation de la fraction molaire de OH. On peut supposer que la cinétique chimique utilisée pour la phase gazeuse conduit à une mauvaise évaluation des taux de réaction de l'espèce OH, même si la cinétique utilisée par Kennedy et al. n'est pas la même que celle utilisée ici.

La comparaison de nos résultats avec ceux de Kennedy obtenus directement avec une cinétique chimique semi-détaillée montre des similitudes dans certaines erreurs de prédiction des suies : absence de suie sur l'axe, mauvais profil de  $C_2H_2$  à 7 mm... Cela semble prouver que ces erreurs ne sont pas liées à la méthode de couplage de FTC - modèle de Leung, mais plutôt à des défauts intrinsèques du

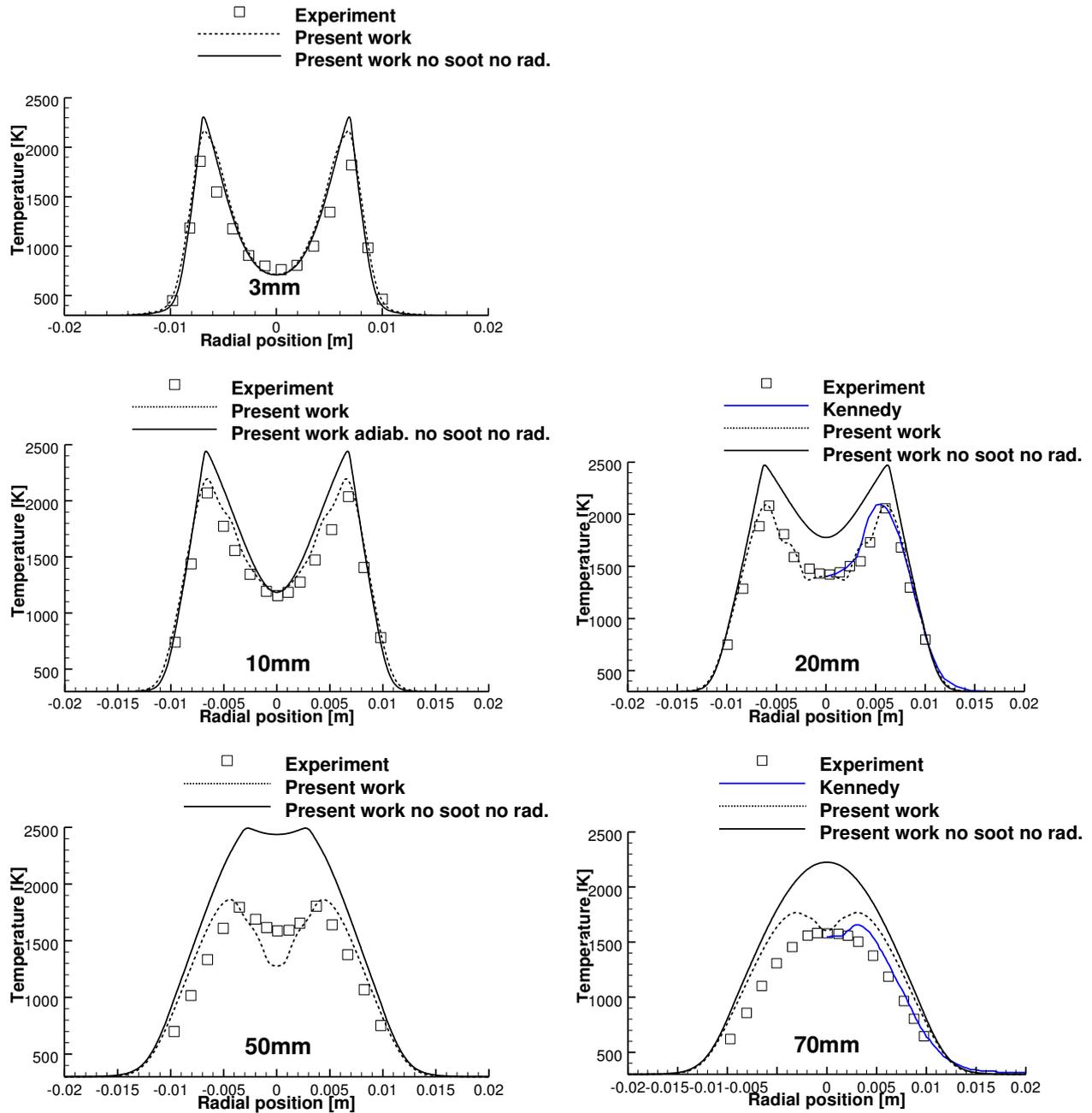


FIGURE 3.3 – Profils de température du cas 2 de la configuration de Santoro et al. [90]. Les résultats de la simulation de Kennedy et al. [47] ont été ajoutés sur cette figure. Les résultats obtenus au chapitre 2 sans modéliser les suies ni le rayonnement sont également présentés.

modèle de Leung. Signalons que les constantes des vitesses de réaction du modèle de Leung, qui ont été ajustées pour obtenir un champ de fraction volumique le plus proche possible du champs mesuré expérimentalement ont été obtenues avec les profils de OH ou  $C_2H_2$  que l'on vient de présenter, et qui sont perfectibles. Il est évident que toute amélioration de la prédiction de ces deux espèces entraînerait une réévaluation de ces constantes.

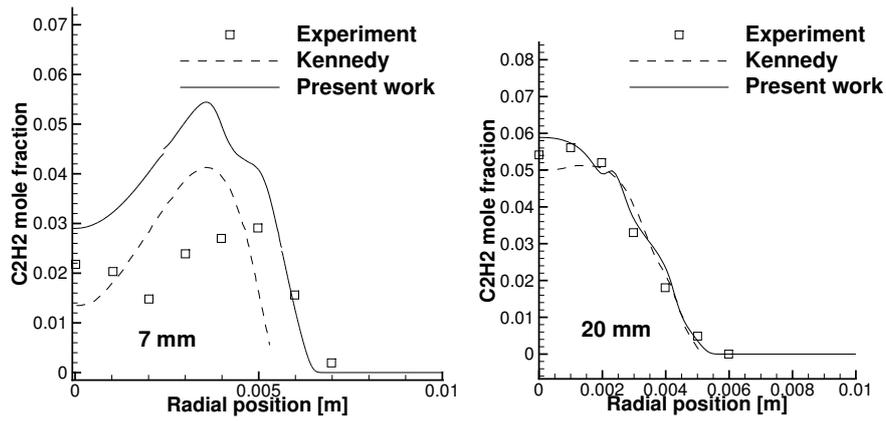


FIGURE 3.4 – Profils de fraction massique de  $C_2H_2$  du cas 2 de la configuration de Santoro et al. [90]. Les résultats de la simulation de Kennedy et al. [47] ont été ajoutés sur cette figure.

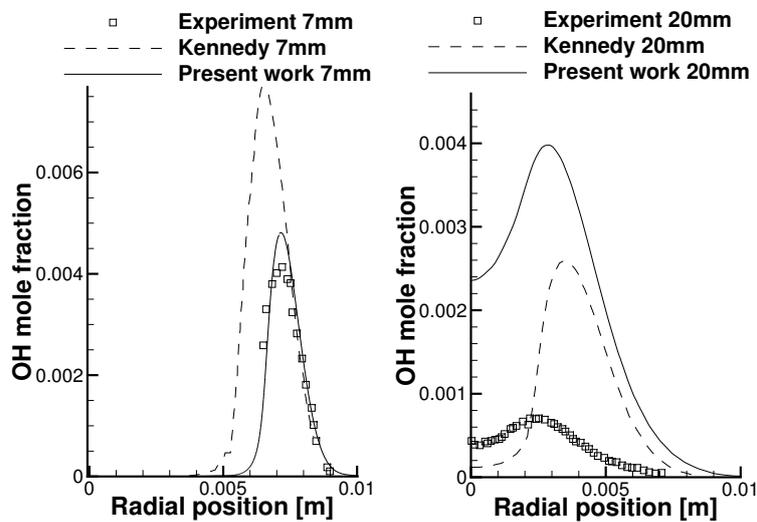


FIGURE 3.5 – Profils de fraction massique de OH du cas 2 de la configuration de Santoro et al. [90]. Les résultats de la simulation de Kennedy et al. [47] ont été ajoutés sur cette figure.

## Bilan

Le couplage FTC - modèle Leung, implémenté dans CEDRE par Dorey pendant sa thèse, a été légèrement amélioré : il est maintenant possible d'extraire directement de la table FTC les concentrations de certaines espèces chimiques présentes dans le modèle de Leung. Cela permet d'économiser la résolution d'équations de transport lorsque ces espèces ne nécessitent pas un suivi direct du point de vue des critères énergétiques proposés au chapitre 1. La rétroaction du modèle de suie sur la composition de la phase gazeuse est donc négligée dans ce cas. Dans le cas où ces espèces sont transportées sur des critères énergétiques, on a vu que l'utilisation des termes de relaxation FTC conduisait là encore à une non prise en compte de la rétroaction du modèle de suie sur la composition de la phase gazeuse. On a vu qu'il en était de même dans [41, 53].

L'application du couplage FTC - modèle de Leung à la simulation de la configuration de Santoro et al. donne des résultats encourageants. En effet, à condition de bien prendre soin d'annuler la diffusion de type Fick pour les suies, la topologie du champ de fraction volumique de suie est globalement respectée. La position du pic de fraction volumique prédit par le modèle se situe néanmoins trop en amont par rapport à l'expérience et la cause de cet écart n'a pas été identifiée. Les niveaux de suie trop faibles près de l'axe sont attribués à une modélisation trop simple de l'étape de nucléation. Prendre en compte la nucléation des suies à partir des PAH devrait permettre, d'après Kennedy et al., de remédier à ce problème. Enfin, il faut signaler que certaines constantes du modèle ont dû être ajustées, par rapport aux valeurs obtenues sur une flamme prémélangée pour obtenir ces résultats. Cela confirme le problème déjà évoqué de l'absence de constantes universelles pour le modèle de Leung et al. qui est imputable essentiellement à une modélisation assez simpliste des étapes de formation des suies.

Malgré tout, on retrouve globalement l'influence des suies sur l'écoulement, notamment l'effet de leur rayonnement sur le champ de température. Les suies sont également correctement oxydées et l'on reproduit dans la simulation l'absence de suies en sortie du domaine. Il reste à déterminer si cette approche permettra de prédire correctement les indices de production de suie en sortie de chambre de combustion d'une configuration industrielle. Compte tenu de l'état de l'art sur la prédiction des suies dans les foyers aéronautiques, il est intéressant de tester ce modèle sur une configuration industrielle ou semi-industrielle.

Enfin, on peut noter qu'une voie d'amélioration possible des prédictions du modèle de suie est l'utilisation d'une approche hybride cinétique-tabulation telle que celle proposée par Ribert et al. [87] qui permettrait de lever le problème du terme de rappel s'opposant à la rétroaction des suies sur la phase gazeuse.

La formation des oxydes d'azote ( $\text{NO}, \text{NO}_2$ ) s'effectue suivant différents mécanismes, dont les temps caractéristiques sont très différents. Les voies de formation des  $\text{NO}_x$  ayant des temps caractéristiques très courts sont décrites nativement par la modélisation FTC, pour peu que ces mécanismes soient inclus dans la cinétique chimique utilisée pour générer la table. D'autres mécanismes de formation des  $\text{NO}_x$ , souvent prépondérants, se produisent dans les gaz brûlés, avec des temps caractéristiques qui sont grands devant ceux que l'on trouve dans la flamme. Ceux-là ne peuvent pas être décrits par le modèle FTC sans ajouter un traitement spécifique pour les espèces concernées. Après un bref rappel des voies de formation des  $\text{NO}_x$ , on propose une modélisation de la production du  $\text{NO}$  dans les gaz brûlés. Cette modélisation spécifique consiste à étendre la table FTC initiale pour inclure la description des réactions chimiques dont les temps caractéristiques sont élevés. La modélisation proposée a été décrite dans un article publié dans *International Journal of Sustainable Aviation*, lequel est directement retranscrit dans ce chapitre. Précisons que la méthode proposée permet d'obtenir les taux de production de l'ensemble des espèces pouvant réagir dans les gaz brûlés, et pas seulement ceux des  $\text{NO}_x$ . Pour finir, on propose une analyse des similitudes entre la modélisation proposée ici et les récents travaux de thèse de Pecquery sur la modélisation des  $\text{NO}_x$  [77].

## Sommaire

<b>4.1 Mécanismes de formation des <math>\text{NO}_x</math></b> . . . . .	<b>56</b>
<b>A method to extend flamelet manifolds for prediction of <math>\text{NO}_x</math> and long time scale species with tabulated chemistry</b> . . . . .	<b>57</b>
Introduction . . . . .	58
Tabulated chemistry approach . . . . .	59
$\text{NO}_x$ modelling . . . . .	61
$\text{NO}_x$ models based on tabulated chemistry . . . . .	61
Extension of a flamelet manifold by reactor calculations . . . . .	62
NO model comparison for 0D time evolving simulation . . . . .	65
NO modelling analysis in the framework of 1D laminar premixed flame . . . . .	67
NO prediction in TAPS type burner simulation . . . . .	69
Conclusions . . . . .	76
<b>4.2 Similitudes entre la méthode d'extension de la table FTC par calcul PFR et les récents travaux de Pecquery</b> . . . . .	<b>79</b>

## 4.1 Mécanismes de formation des $\text{NO}_x$

Parmi les voies de formation du NO, on trouve celles conduisant à la création de ce qu'on appelle le « NO prompt ». Celui-ci présente des temps caractéristiques de formation qui sont du même ordre de grandeur que ceux associés aux espèces majoritaires. La production du NO prompt est initiée par la réaction du diazote  $\text{N}_2$  avec des radicaux issus du craquage du carburant se produisant dès le début de la zone de flamme. Ces réactions conduisent à la formation des espèces radicalaires telles que NH, HCN,  $\text{H}_2\text{CN}$ , et CN. Ces espèces sont ensuite en partie oxydées en NO dans la zone de flamme [64].

Une autre voie de formation précoce du NO, c'est à dire se produisant dans la flamme, est l'oxydation de l'azote contenu dans certains carburants. Le kérosène ne contenant pas d'azote (ou alors en quantités négligeables), ce mécanisme de formation n'est pas présent dans les foyers aéronautiques.

Le principal mécanisme de formation du NO présente des temps caractéristiques relativement longs. Celui-ci met jeu des réactions ayant des températures d'activation élevées, se produisant par conséquent dans les gaz brûlés. Ces réactions conduisent à la création de ce que l'on appelle le « NO thermique ». Les principales réactions de production du NO thermique sont décrites par le mécanisme de Zeldovich étendu [114] :



Les constantes cinétiques de ces réactions peuvent être trouvées dans [64]. Un autre mécanisme présentant des temps caractéristiques relativement élevés est celui de la formation du  $\text{NO}_2$ . Celui-ci est un produit secondaire, qui est produit par l'oxydation du NO. Cette réaction a lieu dans les zones de basse température (inférieure à 1100 K). La réaction la plus importante dans la formation du  $\text{NO}_2$  fait intervenir le radical hydroperoxyde  $\text{HO}_2$  :



La formation du NO prompt est décrite dans la cinétique de Luche [60] utilisée pour la combustion du kérosène dans le cadre de cette thèse. Les tables FTC générées avec cette cinétique permettent par conséquent de modéliser sa formation dans la zone de flamme, lors de la simulation d'un foyer aéronautique. En revanche, le NO thermique et le  $\text{NO}_2$ , qui se forment dans les gaz brûlés, correspondent à des réactions chimiques associées à des états du mélange qui ne sont pas décrits dans les flammes 1D utilisées pour générer la table. Ces états thermochimiques dans les gaz brûlés correspondent en effet à des positions situées nettement en aval de flamme, lesquelles ne sont généralement pas incluses dans le domaine de calcul des flammes 1D, lors de la génération des tables chimiques. C'est pourquoi une méthode d'extension des tables FTC est proposée dans l'article qui suit. Cette méthode permet d'obtenir une modélisation correcte des termes sources chimiques des espèces NO et  $\text{NO}_2$  dans les zones de l'écoulement dans lesquelles le temps de séjour des gaz brûlés est relativement élevé.

---

## **A method to extend flamelet manifolds for prediction of NO<sub>x</sub> and long time scale species with tabulated chemistry**

---

Aymeric Boucher\* and Nicolas Bertier

Onera – The French Aerospace Lab,  
F-92322, Chatillon, France  
E-mail: aymeric.boucher@onera.fr  
E-mail: nicolas.bertier@onera.fr  
\*Corresponding author

Francis Dupoirieux

Onera – The French Aerospace Lab,  
F-91123, Palaiseau, France  
E-mail: francis.dupoirieux@onera.fr

**Abstract:** Numerical simulation is currently used to help design low NO<sub>x</sub> devices for aircraft engines. In order to improve the prediction of pollutant species, combustion models based on tabulated chemistry have been commonly used in recent years. However, the short time scales of usual flamelet manifolds can lead to errors concerning the NO prediction in post flame area, as shown in this paper. Thus, a new method is proposed to extend the manifold in order to describe the evolution of species with a long characteristic time. This method is tested in the framework of 0D-1D computations. The use of the extended manifold is shown to be necessary to correctly predict the evolution of NO concentration in burnt gases. As an example, the extended and classical manifolds were compared in the framework of 2D simulations of an industrial-like combustor, showing an evident difference on the NO levels predicted in the outlet section.

**Keywords:** tabulated chemistry; combustion modelling; NO<sub>x</sub> formation; pollutant prediction; sustainable aviation.

**Reference** to this paper should be made as follows: Boucher, A., Bertier, N. and Dupoirieux, F. (2014) 'A method to extend flamelet manifolds for prediction of NO<sub>x</sub> and long time scale species with tabulated chemistry', *Int. J. Sustainable Aviation*, Vol. 1, No. 2, pp.181–202.

**Biographical notes:** Aymeric Boucher is a PhD student of Ecole Centrale Paris and his work is supported by an ONERA grant.

Nicolas Bertier holds a PhD from Paris VI University and is a Senior Scientist in the Fundamental and Applied Energetics Department of ONERA.

Francis Dupoirieux holds a PhD from Ecole Centrale Paris and is the Deputy Head of the Fundamental and Applied Energetics Department of ONERA.

---

## 1 Introduction

Standards regarding emissions of pollutants by aircraft engines, especially nitrogen oxides ( $\text{NO}_x$ ), are more and more stringent. Therefore, tools are required to help understand and predict  $\text{NO}_x$  formation in combustion chambers designed with new injection concepts. Numerical simulation is one of these tools. Unfortunately, minor species prediction remains a challenging problem due to the large computational cost induced by detailed chemistry. Tabulated chemistry has been widely used in recent years to overcome this difficulty. Assuming that the combustion in gas turbines occurs in a flamelet mode, where the turbulent flame is considered as a thin laminar flame wrinkled by turbulence, the structure of the thin laminar flame is solved separately, using detailed chemistry, and stored in a look-up table indexed by a few number (usually two) of variables. Then, only the equations of these index variables have to be solved in addition to the Navier-Stokes equations, to describe the mixture properties and composition of the turbulent reactive flow. This reduces greatly the computational cost compared to the direct computation including an equation for each species of a detailed chemistry along with the Navier-Stokes equations. Nevertheless, in the way they are usually generated, chemistry tables only describe the evolution of the mixture on short time scales. To take into account the effects of long residence times necessary for  $\text{NO}_x$  modelling, tabulated chemistry needs further modelling. Different methods have been proposed to this aim. Vreman et al. (2008) and Van Oijen and De Goey (2009) added a transport equation for NO, where the reaction rate was taken from the chemistry table. Ihme and Pitsch (2008) and Ketelheun et al. (2011) completed this method by splitting the source term into production and consumption parts, in order to include the local NO concentration in the consumption rate. As will be shown in this paper, those methods still present limitations due to the short time scales involved in the chemistry table used. The computation of an equation for NO helps account for history in NO evolution and thus long time scales effects. But, the reaction rates extracted from the table, whatever the strategy of splitting, is still limited by the short time scales of the table, and can not take into account all the long residence time effects. Therefore, we propose a new methodology to generate chemistry tables containing the description of the mixture state for larger time scales. The usual flamelet chemistry table is extended by solving a plug flow reactor (PFR) problem. This makes possible to describe, in the chemistry table, the slow evolution of some species such as  $\text{NO}_x$  in burnt gases, with the advantage of having a negligible additional cost to generate the table. The extended table generated with this method is firstly tested in the framework of 0D and 1D premixed flames, before being used in the 2D simulation of a twin annular premixing swirler (TAPS) combustor (or ‘multipoint’ combustor), which is representative of nowadays aircraft combustion devices, and makes it an interesting target for CFD modelling dedicated to pollutants predictions.

## 2 Tabulated chemistry approach

Tabulated chemistry is useful to describe the effects of a detailed chemistry with a reduced number of variables. These variables are used to pick up the chemical properties in a manifold generated prior to the simulation. In tabulated chemistry of flamelet type, the main idea is that under certain conditions the flame front is only wrinkled by the turbulence and therefore can be locally described by a laminar flamelet associated to a model accounting for turbulence effects. FPI (Gicquel et al., 2000) and FGM (Van Oijen et al., 2001) are two similar models based on the indexing of a flamelet manifold using two variables, the mixture fraction  $Z$ , and a normalised progress variable  $c$ . Commonly used definitions of the progress variable  $Y_c$  (before normalisation) are either

$$Y_c^{def1} = Y_{CO_2} + Y_{CO} \quad (1)$$

or

$$Y_c^{def2} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{H_2O}}{M_{H_2O}} + \frac{Y_{H_2}}{M_{H_2}}, \quad (2)$$

where  $Y_X$  and  $M_X$  refer respectively to the mass fraction and the molar mass of  $X$ .

Considering a manifold generated from 1D premixed flames, the mixture fraction enables the FPI/FGM model to select the appropriate flamelet, and the progress variable gives the appropriate position in this flamelet. Indeed the progress variable monotonically evolves from 0 in the fresh gases to a maximum value  $Y_c^{max}(Z)$  in the burnt gases.  $Y_c^{max}(Z)$  is commonly referred to as  $Y_c|_{eq}$  considering that species included in the definition of  $Y_c$  have reached the equilibrium. This 'equilibrium' prefix must be considered with care because it does not imply that all species of the mixture have reached the equilibrium as it will be shown in this work. The normalised progress variable is finally obtained following this definition:

$$c = \frac{Y_c}{Y_c|_{eq}} \quad (3)$$

Two approaches can be used with a tabulated chemistry model. In a direct approach, all the data (mass fractions, transport properties, temperature,...) are extracted from the table. In an indirect approach, only the chemical reaction rates of the main species are extracted. Obviously, additional data can still be extracted directly from the table if necessary. In the direct approach, only the indexing variables of the flamelet manifold are transported in addition to the Navier-Stokes equation system, while with the indirect approach the main species are transported. In this study, we are using the second approach because it offers more flexibility regarding its implementation in the Cedre code. Thus, laminar flamelet reaction rates are stored in a chemistry table. In order to prevent deviation of local composition from the table due to three-dimensional diffusive and convective effects, a correction term is introduced following the previous work

of Savre et al. (2008) and the reaction rates of the chemical species are generally introduced in the transport equations in the following form:

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_i(x, y, z, t) = & \dot{\omega}_i^{TAB}[Z(x, y, z, t), c(x, y, z, t)] \\ & + \frac{Y_i^{TAB}[Z(x, y, z, t), c(x, y, z, t)] - Y_i(x, y, z, t)}{\tau} \end{aligned} \quad (4)$$

The difference with the work of Savre et al. (2008) is that a single characteristic time  $\tau$  is used since deviations from table composition are driven by three-dimensional diffusive and convective effects common to all species. It can be verified in the calculations that in each cell of the mesh, the local composition is close to the tabulated one. Therefore, apart from small numerical errors, the results obtained with the indirect approach of tabulated chemistry including the relaxation term, are equivalent to the results one would have with the direct approach. Finally, mass conservation is achieved by calculating the nitrogen  $N_2$  (the concentration of which is high compared to other species) source term as:

$$\dot{\omega}_{N_2}(x, y, z, t) = - \sum_i \dot{\omega}_i(x, y, z, t), \quad (5)$$

where the summation is made over all the other transported species.

The total energy conservation is solved in the Cedre CFD code and does not require particular treatment since the total enthalpy equation is not affected by chemical source terms. Nevertheless, mass compensation of some tabulated species by  $N_2$  leads to a change of the mixture properties. In rich mixtures ( $FAR > 1$ ), it can induce important changes in heat capacity and formation enthalpy. This affects the temperature calculated from the total energy and from these mixture properties. Flows with moderate FAR do not require additional modelling. But for rich mixtures, a method similar to the one proposed by Galpin (2007) can be used to select species for which replacing their mass by same  $N_2$  mass has an important impact on mixture properties. Those species have then to be transported. For exemple, Galpin (2007) showed that modelling combustion of the methane requires to transport  $H_2$  in addition to the main species  $C_{10}H_{22}$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CO$  and  $N_2$ . The value of the normalised progress variable  $c$  is calculated from the transported species using equations (1) and (3). An additional equation is solved for the mixture fraction  $Z$ . The chemistry-turbulence interaction can be modelled using different approaches (presumed Probability Density Function, thickened flame model...). For the sake of brevity, this subject is not addressed in this paper. The reader interested in this topic is referred to the papers describing the existing models (PCM-FPI (Fiorina et al., 2005), F-TACLES (Fiorina et al., 2010), TFLES/ATF (Kuenne et al., 2011)). Nevertheless, it is worth noting that the approach developed in this work offers compatibility with all of these turbulence interaction closures.

To deal with two-phase flows when liquid fuel is injected, we add a source term  $\dot{\omega}_Z^{evap}$  in the mixture fraction equation as done by Baba and Kurose (2008). This source term takes into account the creation of atomic carbon and hydrogen when fuel evaporates:

$$\dot{\omega}_Z^{evap} = \frac{dZ}{dt} = \frac{d(Y_C + Y_H)}{dt} \quad (6)$$

This source term is generally obtained from the evaporation rates of the different components of the fuel (usually reduced to C<sub>10</sub>H<sub>22</sub> in computations):

$$\dot{\omega}_Z^{evap} = \mathcal{M}_C \sum_j \frac{n_{C,j}}{\mathcal{M}_j} \dot{\omega}_j^{evap} + \mathcal{M}_H \sum_j \frac{n_{H,j}}{\mathcal{M}_j} \dot{\omega}_j^{evap} \quad (7)$$

where  $\mathcal{M}_C$  and  $\mathcal{M}_H$  are respectively the atomic weights of carbon and hydrogen,  $n_{C,j}$  and  $n_{H,j}$  are the number of carbon atoms and hydrogen atoms in the  $j^{\text{th}}$  component of the fuel, and  $\dot{\omega}_j^{evap}$  and  $\mathcal{M}_j$  are the mass evaporation rate and molecular weight of the  $j^{\text{th}}$  component of the fuel.

The additional modelling used in this work concerns the specific treatment of nitric oxide (NO) and is presented in the next section.

### 3 NO<sub>x</sub> modelling

#### 3.1 NO<sub>x</sub> models based on tabulated chemistry

Tabulated chemistry gives access to minor species concentrations. Pollutant species such as NO<sub>x</sub> are thus a good target for this model. Unfortunately flamelet tabulation gives rise to difficulties for NO<sub>x</sub> (NO, NO<sub>2</sub>) prediction as indicated thereafter. In the following, we focus on the NO formation since the amount of NO<sub>2</sub> produced is less important than the amount of NO inside the combustion chamber.

The usual progress variable based on main species [such as in equation (1)] is not adapted to discretise correctly the NO mass fraction gradients in the manifold. Indeed, due to different chemical time scales, large variations of NO mass fraction can occur in a very short part of the  $Y_c$  domain, leading to large interpolation errors. This problem can be addressed by including the NO mass fraction in the definition of the progress variable (Godel et al., 2009), or by transporting NO instead of directly obtaining it from the table (Vreman et al., 2008). Van Oijen and De Goey (2009) have shown that combining these two approaches gives more accurate results.

Another issue with flamelet tabulation is that species evolving with long time scales cannot be accounted for in usual flamelet manifolds without additional treatment. Indeed, when the progress variable  $Y_c$  reaches its maximum value in the flamelet, the concentration of the main species does not evolve anymore because they are almost at equilibrium, i.e., their chemical rate is close to zero. Consequently, the concentration of minor species such as NO does not evolve anymore as well, although these species did not actually reach the equilibrium. This can lead to a non-physical saturation effect on NO concentration as pointed out in this work. Solving an additional equation for NO can be considered as a first step to take into account the NO evolution outside the manifold. Nevertheless, the NO concentration obtained in the CFD calculation can be strongly different from the value given by the flamelet calculation. This deviation of the NO concentration from the tabulated trajectories is not taken into account with the tabulated source term, leading to wrong results. Some authors (Ihme and Pitsch, 2008; Ketelheun et al., 2011) recommend to split the source term into production and consumption parts. The production term (here referred to as *prod*) is obtained directly from the table, whereas the consumption term (here referred to as *cons*) combines

the tabulated consumption rate ( $\frac{\dot{\omega}_{NO}^{cons}}{Y_{NO}}$ ) and the NO mass fraction given by the CFD calculation. The reaction rate is evaluated as

$$\dot{\omega}_{NO}^{prod}(x, y, z, t) = \dot{\omega}_{NO}^{prod}[Z(x, y, z, t), c(x, y, z, t)]|_{\text{TAB}} \quad (8)$$

$$\dot{\omega}_{NO}^{cons}(x, y, z, t) = \frac{\dot{\omega}_{NO}^{cons}[Z(x, y, z, t), c(x, y, z, t)]|_{\text{TAB}}}{Y_{NO}^{TAB}[Z(x, y, z, t), c(x, y, z, t)]} Y_{NO}(x, y, z, t). \quad (9)$$

In this approach, the dependence of the consumption rate on  $Y_{NO}$  makes that it is not useful to introduce the relaxation term of equation (4) in the expression of the NO source term. However, it must be kept in mind that if the local composition is accounted for in the NO consumption rate through the NO mass fraction, this is not the case for the NO production rate. Indeed, the latter is still obtained assuming a composition in the CFD calculation close to the composition given by the table. The slow evolution of the other reactants of the NO mechanism (such as  $\text{NO}_2$ ) is not taken into account. In the next sections, it will be shown that this approach, with usual flamelet manifolds, leads to the saturation of the NO concentration, leading to an important underestimation of the NO concentration when the residence time is large.

### 3.2 *Extension of a flamelet manifold by reactor calculations*

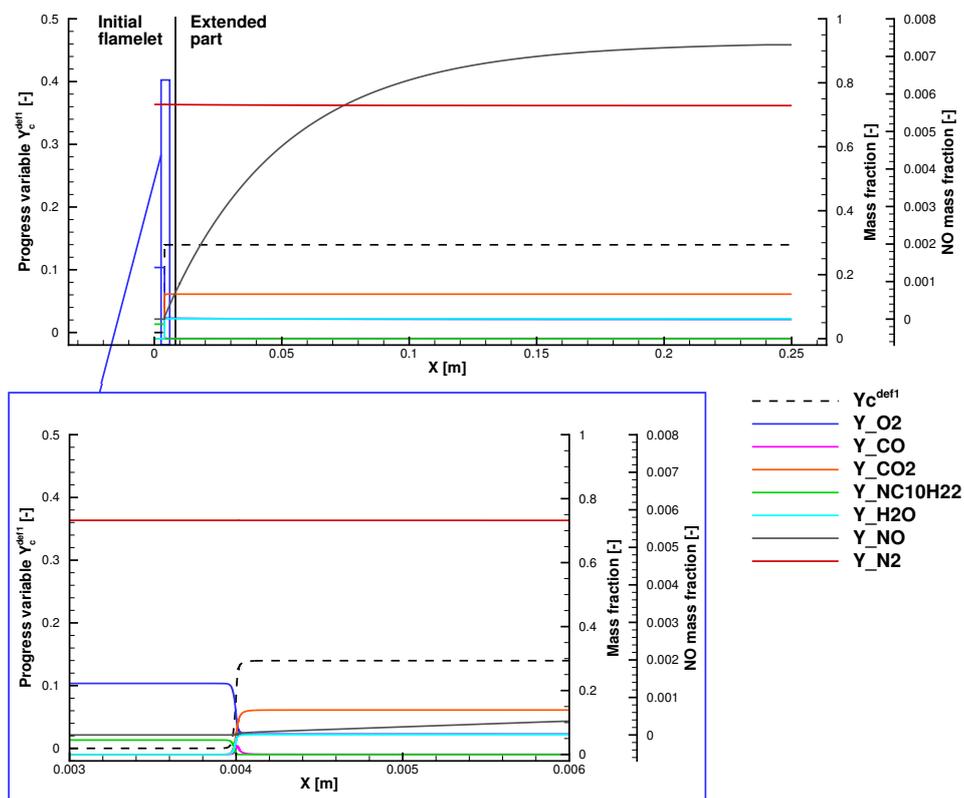
In order to overcome the difficulties encountered by the existing methods, i.e., in order that source terms correctly reproduce the slow evolution of NO, a method consisting in the extension of the flamelet manifold is proposed. This method is presented here for a premixed flamelet manifold, but could be adapted to non-premixed ones with moderate effort. Figure 1 shows the evolution of main species and NO mass fractions in a laminar premixed flame calculated by the Cantera software (Goodwin et al., 2013), for a fuel-air equivalence ratio equal to 0.7. The  $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ /air chemistry is modelled using the mechanism of Luche (2003) that contains 91 species. The NO chemistry (prompt and thermal) is included in the mechanism.  $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$  that is usually used to model aeronautical fuels in such calculations is assumed to be pre-vapourised since the manifold only contains gaseous flames as already explained.

On the lower part of the figure a zoom displays the domain used to generate the usual flamelet manifold (the 'Initial flamelet' part). The main species have reached a state really close to equilibrium at the end of this domain. Therefore, after an early increase, the progress variable based on these main species is nearly constant. On the upper part of the figure, we have the evolution obtained using Cantera when the length of the computational grid is increased in order to capture the full evolution of NO. The progress variable based on main species ( $Y_c^{def1} = Y_{CO} + Y_{CO_2}$ ) is constant while the NO concentration still evolves. It is obvious that an important part of the NO evolution cannot be described without the extended part of the domain. Thus, we recommend to include the full length of the extended domain in the flamelet manifold in order to describe correctly the slow processes occurring in the NO formation (and the definition of the progress variable  $Y_c$  also has to be adapted as discussed hereafter).

Nevertheless, computing a flamelet on a large domain can be difficult in practice, since the size of the domain needed to capture the full evolution of long time species is not known in advance, and can require repetitive domain enlargements and calculations, making the process CPU time consuming. Thus, we propose an alternative method to

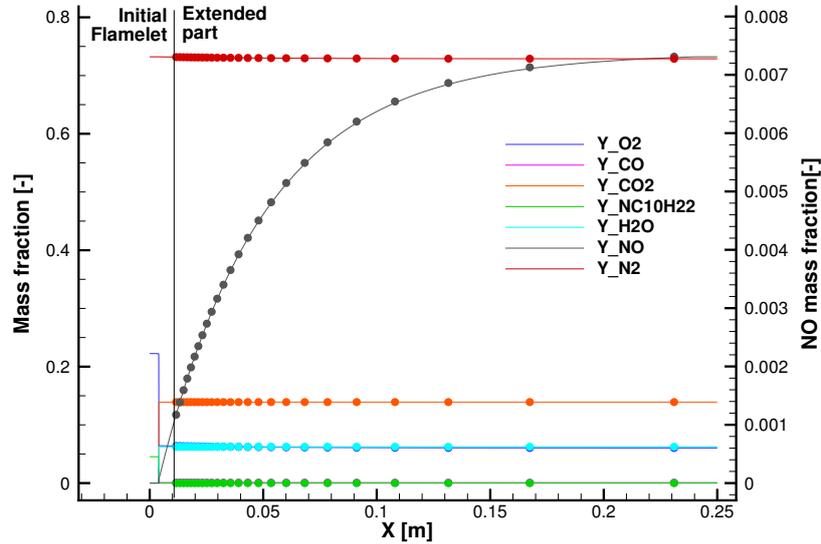
generate the extension of the flamelet. Considering that in the extended part (right) of the domain, composed of burned gases, the gradients of the species concentrations are close to zero, the diffusive fluxes can be neglected, and the 1D premixed problem is similar to a PFR problem. Therefore, we propose to extend the flamelet manifold with PFR calculations. A PFR is solved for each mixture fraction of the manifold. The input state of the mixture introduced in the PFR is the state of the corresponding flamelet taken at  $x_{flmt}$ , the abscissa where the progress variable  $Y_c^{def1}$  reaches its maximum value, i.e., where the main species are close to equilibrium. In Figure 1 it corresponds to the composition obtained at the abscissa where the line separating 'Initial flamelet' from 'Extended part' is drawn. Then, the PFR calculation is carried out until the variation of all species concentrations, in particular those undergoing a slow evolution such as NO, become negligible.

**Figure 1** Visualisation of the extended flamelet for a FAR of 0.7, with a zoom on the initial flamelet (see online version for colours)



The extension by PFR calculation of a flamelet obtained on a short domain is equivalent to the direct computation of the flamelet on a domain large enough to capture the full evolution of species having long formation time, as shown in Figure 2.

**Figure 2** Comparison of the solution of 1D equations on the enlarged domain (lines) and the solution of a PFR calculation (symbols) (see online version for colours)



The proposed method based on PFR calculations is easy to implement, and the additional CPU cost induced by the calculation of a PFR is negligible compared to the CPU cost needed to calculate the not extended flamelet.

Once the new extended manifold is obtained, it is used exactly as the not extended flamelet manifold. Only the definition of the progress variable is different in order to remain monotonic as function of  $x$  and to take NO into account. Thus the definition proposed by Van Oijen and De Goeij (2009) has been considered:

$$Y_c = Y_c^{init} + \kappa Y_{NO} \quad (10)$$

where  $Y_c^{init}$  corresponds to the initial definition of the progress variable (such as  $Y_c^{def1}$  or  $Y_c^{def2}$ ) and  $\kappa$  is equal to 10. Although a value of  $10^3$  is recommended by Van Oijen and De Goeij (2009) for  $\kappa$ , this value of  $\kappa$  is large enough to minimise interpolation errors. The reason is that the maximum value reached by NO is higher with the PFR extension than in the not extended flamelet manifold. Thus the profile of NO is correctly discretised in the manifold. Moreover, the distribution of the grid points of the manifold in the progress variable direction is adapted to take into account the strong variations of the reaction rate. This helps correctly discretise the flamelet, even with small  $\kappa$  values. The definition of the progress variable can be modified to include  $NO_2$  if necessary, but including NO alone was sufficient to obtain a monotonic evolution of the variable along the flamelet. The  $NO_x$  mass fraction can be directly extracted from the table, to access all  $NO_x$  species concentrations. The progress variable used with the extended flamelet manifold is finally:

$$Y_c^{def3} = Y_{CO} + Y_{CO_2} + 10 \times Y_{NO} \quad (11)$$

It should be noted that the extended flamelet manifold is presented for  $NO_x$  applications, but can be generalised to other species. In particular the method is also attractive for

CO modelling in rich mixtures, where this species still reacts late downstream the flame front and thus, must be captured by PFR extension of the manifold.

### 3.3 NO model comparison for 0D time evolving simulation

In order to compare the behaviour of the different approaches presented for NO formation modelling, some reactor simulations by a CFD code using tabulated chemistry are presented. It is assumed that the reactor contains only burnt gases at the initial time. The composition and temperature of the burnt gases are taken from the flamelet manifold for a given equivalence ratio, at the maximum value of the progress variable ( $Y_c^{def1} = Y_c^{def1}|_{eq}$ ), i.e., the inlet gases are burnt gases in which the main species have reached equilibrium. Then, the reactor is simulated considering constant enthalpy and pressure evolution. In this way, the mixture evolution is representative of the spatial evolution of the burnt gases in a steady state burner such as an aircraft combustor<sup>1</sup>. The chemical mechanism used is the skeletal mechanism for kerosene of Luche (2003). It includes thermal and prompt NO reactions.

Three approaches are compared:

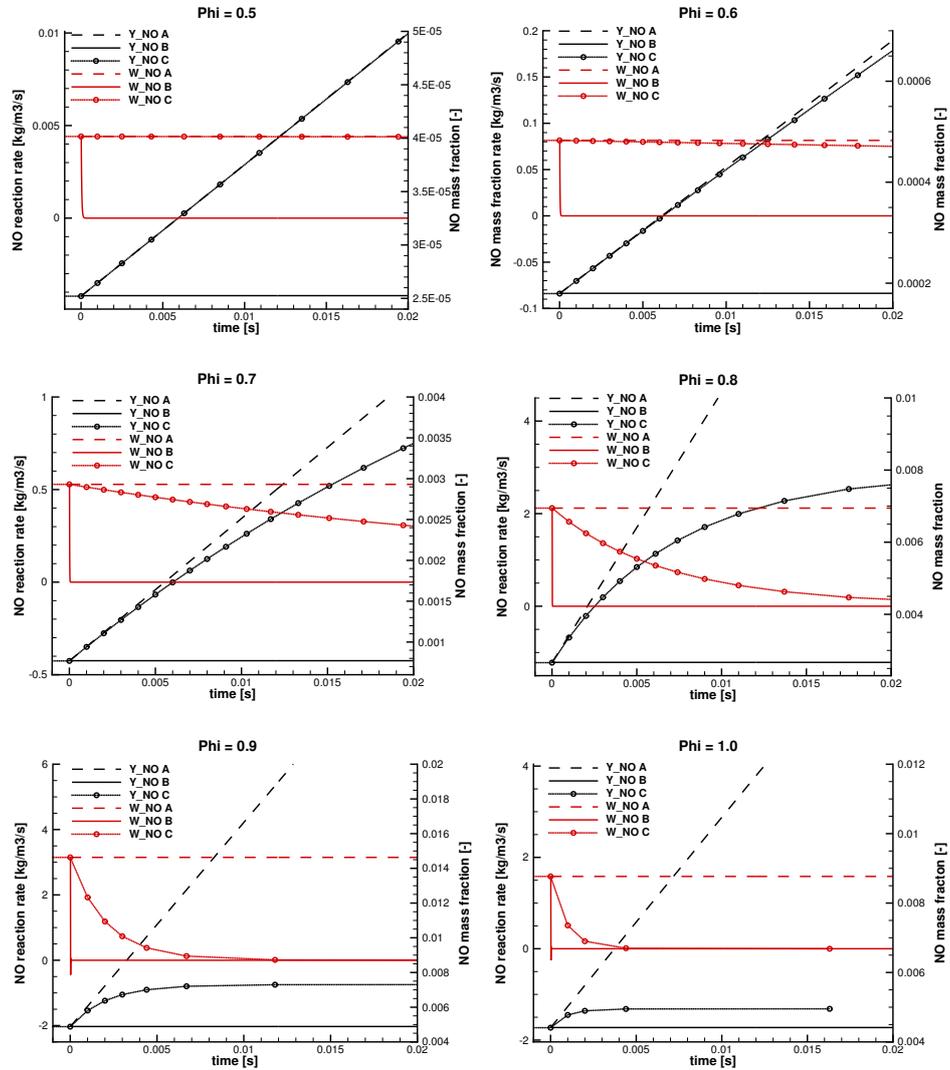
- *Model A*: An additional transport equation for NO is solved with the source term obtained from the initial flamelet manifold (i.e., not extended) as done by Vreman et al. (2008) and Van Oijen and De Goey (2009). The initial state of the reactor implies that the progress variable has already reached its maximum value. The NO reaction rate is thus extracted from the manifold at the given equivalence ratio, and at the maximum value of the progress variable. This implies that the NO reaction rate is independent of the calculated NO concentration. As in models B and D presented hereafter, the relaxation term of equation (4) is not introduced in the NO source term in order that the slow evolution of NO in the post-flame can be reproduced. The use of the relaxation term would have stopped the evolution of NO at the maximum level given by the not extended manifold.
- *Model B*: The NO reaction rates are given by equations (8) and (9). Thus, similarly to model A, the NO production rate and the term  $\frac{\dot{\omega}_{NO}^{cons}|_{TAB}}{Y_{NO}^{TAB}}$  are extracted from the manifold at the given equivalence ratio, and at the maximum value of the progress variable.
- *Model C*: The NO reaction rate is extracted from the extended manifold. Unlike model B, the NO mass fraction given by the CFD calculation is not involved in the NO consumption term. Instead, it is accounted for in the progress variable definition ( $Y_c^{def3}$ ). In model C, the slow evolution of NO is taken into account by the extended part of the manifold. Note that the results obtained with model C are in this particular case (PFR) identical by construction to the results obtained when solving directly the full set of transport equations in the CFD calculation. For that reason the results obtained with model C are considered as the reference for this simulation.

To sum it up, the three models correspond to the following evaluation of the NO source term in Table 1.

**Table 1** NO source term formulation and type of manifold used in OD calculations

Model	NO source term	Type of manifold
A	$\dot{\omega}_{NO} = \dot{\omega}_{NO}(Z, c=1)$	Not extended
B	$\dot{\omega}_{NO} = \dot{\omega}_{NO}^{prod}(Z, Y_c=Y_c^{max})$ $+ \frac{Y_{NO}}{Y_{NO}(Z, Y_c=Y_c^{max})} \dot{\omega}_{NO}^{cons}(Z, Y_c=Y_c^{max})$ $= f(Z, c=1, Y_{NO})$	Not extended
C	$\dot{\omega}_{NO} = \dot{\omega}_{NO}(Y_i, T) = \dot{\omega}_{NO}(Z, c = c(t))$	Extended by PFR calculations

**Figure 3** Comparison of NO models in simulations of a PFR at constant enthalpy and pressure (see online version for colours)



The results obtained with the three approaches are compared in Figure 3. The evolution of the NO mass fraction and NO source term are plotted versus time for each model, for different equivalence ratios. Only the first 20 ms of the simulation are presented since the residence time in aeronautical engines we are interested in usually lies between 3 ms and 20 ms.

The relevant information deduced from these results is:

- As mentioned previously, the model A gives a source term independent of the calculated NO mass fraction. It implies a linear evolution of  $Y_{NO}$ . This behaviour is close to the evolution predicted by model C for lean mixtures. But for mixture closer to the stoichiometry, the NO concentration is over-predicted. Thus, the accuracy of this model will strongly depend on the equivalence ratio of the burnt gases and can not be considered as predictive.
- Model B predicts a nearly constant value of NO mass fraction. This is explained by the constant value of the production term in the model. A small increase of  $Y_{NO}$  makes possible the balance between the consumption rate and the constant production rate. Finally, the value predicted by the model B is very close to the value obtained at  $c = 1$  in the not extended manifold since the net NO source term is in practice negligible in the PFR. This is what we call the saturation effect, which occurs with usual flamelet manifolds, and it is not possible to solve this problem without further modelling.
- As mentioned earlier, the model C is by construction equivalent to solving directly the full set of transport equations in the CFD calculation, leading to a correct reproduction of the NO evolution. The extension of the flamelet manifold through PFR calculations appears as an interesting approach in these preliminary simulations. It is further investigated in a one-dimensionnal case in the next section.

#### 4 NO modelling analysis in the framework of 1D laminar premixed flame

The results corresponding to the unstretched premixed flame presented in Figures 1 and 2 were obtained by Cantera (Goodwin et al., 2013) using the full chemical mechanism of Luche (2003). To complete the comparison between the different NO modelling approaches, this flame was simulated in Cedre with the three approaches summarised in Table 1. In the previous section, we showed that model B can not overcome what we call the saturation effect of the not extended flamelet manifold. Nevertheless, this approach allows deviations from the tabulated trajectory controlled by the ratio  $\frac{Y_{NO}(x,y,z,t)}{Y_{NO}^{TAB}[Z(x,y,z,t),c(x,y,z,t)]}$ . These deviations account for the NO history and comply with the fact that NO does not relax instantaneously to the tabulated trajectories (Ihme and Pitsch, 2008). This formulation of the reaction rates is consistent with the slow reaction rates of NO. Therefore, we propose to test a fourth approach (model D) which is the formulation of the NO reaction rate according to equations (8) and (9), but with the extended flamelet manifold used in model C. All four models are tested with the same  $Y_c^{def3}$  definition that includes NO. It must be kept in mind that the 'equilibrium' values  $Y_c^{def3}|_{eq}$  of the progress variable is higher in the extended manifold of models C and D, than in the not extended manifold of models A and B.

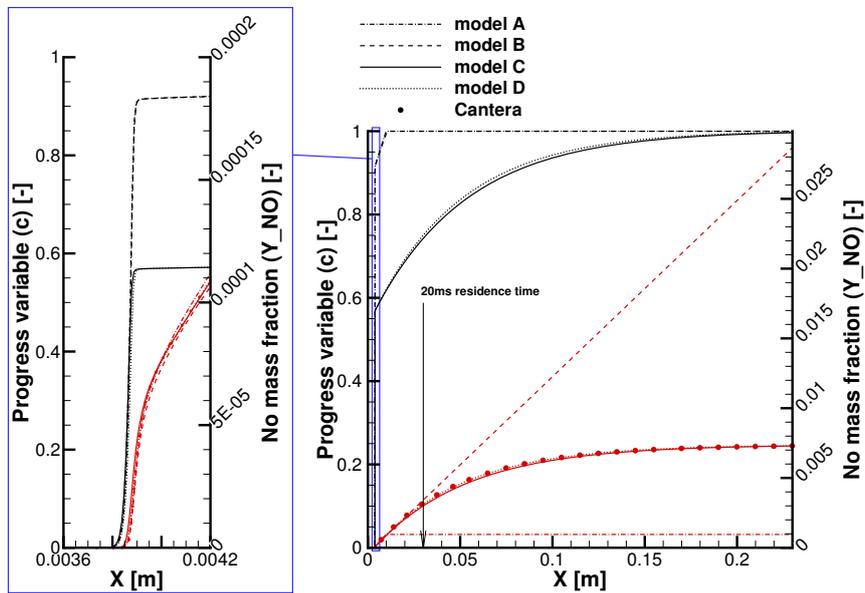
In effect,  $Y_c^{def3}|_{eq}$  defined as  $\max(Y_c^{def3}(Z))$ , is higher in the extended manifold due to higher NO concentration. Table 2 summarises the four approaches compared in this section.

As mentioned previously, models A, B and D do not contain the relaxation term of equation (4) in the NO source term. Therefore, they are consistent with the formulation used in the literature.

**Table 2** NO source term formulation and type of manifold used in 1D calculations

<i>Model</i>	<i>NO source term</i>	<i>Type of manifold</i>
A	$\dot{\omega}_{NO} = \dot{\omega}_{NO}(Z, c)$	Not extended
B	$\dot{\omega}_{NO} = \dot{\omega}_{NO}^{prod}(Z, c) + \frac{Y_{NO}}{Y_{NO}(Z, Y_c=Y_c^{max})} \dot{\omega}_{NO}^{cons}(Z, c)$	not extended
C	$\dot{\omega}_{NO} = \dot{\omega}_{NO}(Z, c)$	extended by PFR calc.
D	$\dot{\omega}_{NO} = \dot{\omega}_{NO}^{prod}(Z, c) + \frac{Y_{NO}}{Y_{NO}(Z, Y_c=Y_c^{max})} \dot{\omega}_{NO}^{cons}(Z, c)$	extended by PFR calc.

**Figure 4** NO mass fraction in laminar unstretched premixed flame with FAR = 0.7, calculated with four different approaches to model NO formation, compared to full chemistry result obtained in Cantera (see online version for colours)



Note: Red lines stand for NO mass fraction while the black lines stand for the progress variable.

Figure 4 presents the NO profiles obtained with the four approaches (models A to D) using the Cedre code, and the profile obtained directly with Cantera. As expected, with model A, once the normalised progress variable reaches its maximum value of 1, the constant net production term gives a linear evolution of the NO mass fraction leading to an important overestimation of this quantity. The abscissa where the residence time in the 1D flame reaches 20 ms is indicated in the figure. At this abscissa the overestimation of  $Y_{NO}$  by the model A is limited. But, if we refer to the previous 0D computations, we can see that it was also the case in the PFR for the same FAR of 0.7. Nevertheless, for higher FAR, the 0D PFR calculations show a clear overestimation of  $Y_{NO}$  in the same residence time. Since the evolution of NO with model A in the current 1D flame with FAR of 0.7 is similar to its evolution in the 0D computation at same FAR, it is clear that the model A would largely overestimate NO for higher FAR in the 1D flame too. Model B, shows the same saturation effect as in our previous 0D simulations once the progress variable reaches its maximum value of 1. Models C and D, with the extended manifold give the correct evolution of NO mass fraction. It is worth noting that model B and D are based on the same formulation of the NO source term and that the only difference is the use of the extended-manifold in model D. This points out that it is important to generate the manifold with its extended part.

## 5 NO prediction in TAPS type burner simulation

In order to illustrate the potential improvement in NO prediction resulting from the extension of the flamelet manifold, different NO models are tested on a semi-industrial configuration including a TAPS burner. The TAPS combustor is an injection concept tested on the Onera M1 facility, in the framework of the European project Towards Lean Combustion (2005). In this injection system, a premixed zone with a moderate fuel air ratio (FAR) is created by two annular swirlers. Air coming from these swirlers is mixed with the fuel that is injected through multiple small holes distributed on the injector circumference. In this lean zone, the mixture burns at relatively low temperatures, and this helps reduce NO<sub>x</sub> production. In order to stabilise the combustion for low power operation, a rich pilot zone is created on the axis of the burner by an atomiser injecting fuel droplets in a swirled air flow. Modelling such a configuration requires to tackle multiphysics problems since we are dealing with reactive turbulent two-phase flows. It is thus a very challenging target for application of a NO<sub>x</sub> model.

The conditions and the geometry have been simplified in order to reduce the calculations to simple 2D axisymmetric simulations. The computations are of RANS type in order to obtain short computational time, since we are only interested in the main tendencies given by the different models. We are focusing on long residence time effects, occurring downstream of the turbulent flame, where the mass fraction fluctuations have significantly decreased compared to their level in the main reaction zone. Therefore, we can assume that, in the post-flame zone, the turbulence-chemistry interaction is not modifying the tendencies concerning the NO formation, in such a way that we neglect the turbulence-chemistry interaction in the present calculations. Our methodology is however compatible with different methods used to take into account this interaction such as PCM-FPI (Fiorina et al., 2005), F-TACLES (Fiorina et al., 2010), TFLES/ATF (Kuenne et al., 2011). In the case of TFLES/ATF, the flame is artificially thickened independently of the type of table. In the filtered flame approach, the spatial

filter used to filter the flamelet manifold can be used with the extended manifold as well. The PCM-FPI approach would require a bit more attention if the presumed PDF used for the progress variable is a  $\beta$  function: it is more consistent to limit the convolution with a  $\beta$ -PDF to the ‘initial flamelet’ part of the manifold. Indeed, the  $\beta$ -PDF formalism is convenient for the flamelets structure, but not for PFR-like combustion as we have in the extended part of the manifold.

It is well known that radiative heat losses may have a strong impact on temperature in a combustion chamber, and thus, a strong impact on the NO production rates. Measurements achieved at Onera’s M1 facility for different operating points of the TAPS burner during the TLC campaign (Towards Lean Combustion, 2005) show that soot concentration is very low in the combustion chamber. Since soot are usually the main source of radiative heat losses, the latter are expected to be low in this configuration. Moreover, 3D LES simulations of the TAPS burner configuration including radiative heat transfers have been done by Dorey (2012) for two operating points of the TAPS configuration. Both soot and gas radiation were included in the modelling, with an optically thick media assumption. Results of those simulations show that due to the low levels of soot concentration, the effect of radiative heat losses on the temperature is negligible. Hence, radiative heat fluxes are not considered in the current 2D-axi simulations.

The global FAR in the present simulations is 0.5. Liquid fuel droplets are injected in the swirler channels. A lagrangian solver is used to track these droplets. The gas-phase solver and the lagrangian solver are coupled through the evaporation term, the heat fluxes between droplets and gas-phase, and the drag force applied by the gas on the droplets. An unstructured mesh with 10 000 triangular cells was generated. This relatively coarse grid has been designed to obtain tendencies of the models at low computational cost.

In the following, five NO models are compared (the labels of the models are kept same as in Table 2):

- NO interpolated directly in the not extended flamelet manifold (named hereafter model 0)
- NO transported with the source term deduced from the not extended flamelet manifold as in Vreman et al. (2008) (i.e., model A)
- NO transported with the source term given by equations (8) and (9) and with the not extended flamelet manifold (i.e., model B)
- NO transported with the source term deduced from the extended manifold (i.e., model C)
- NO transported with the source term given by equations (8) and (9) and with the extended manifold (i.e., model D).

To compare quantitatively the different models, the average NO mass fraction in the outlet section of the TAPS burner configuration is computed for the five models as:

$$\langle \overline{Y_{NO}} \rangle = \frac{\int_0^R r \bar{\rho} \overline{v_x Y_{NO}}.dr}{\int_0^R r \bar{\rho} \overline{v_x}.dr} \quad (12)$$

where  $R$  is the radius of the combustor,  $\bar{\rho}$  is the mean density and  $\bar{v}_x$  is the mean axial velocity. Here, we assume that the scalar fluctuations are negligible in the outlet section. The same formulation applied to the local FAR gives an average FAR of 0.5 which is consistent with the global FAR. The average NO mass fractions obtained for the five models are summarised in Table 3. As an indication, calculated NO indices are also given in Table 3. They are defined as

$$I_{NO}[\text{g/kg of fuel}] = 1000 \times 2\pi \frac{\int_0^R r \bar{\rho} \overline{Y_{NO}} \bar{v}_x dr}{\dot{m}_{fuel}}, \quad (13)$$

where  $\dot{m}_{fuel}$  is the total mass flow rate of liquid fuel.

**Table 3** NO indices, and NO average mass fraction in the outlet section of the TAPS burner configuration

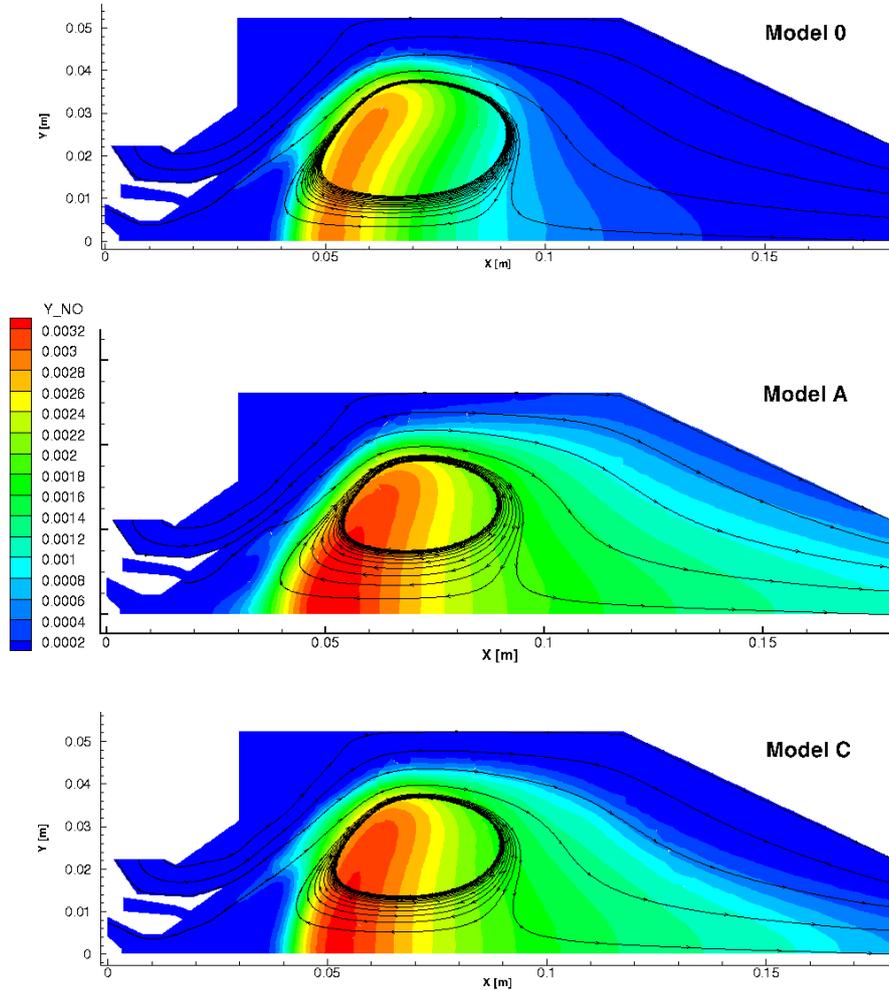
<i>Approach for NO modelling</i>	<i>NO indice</i>	<i>Average NO mass fraction in outlet section</i>
Model 0	0.66	$1.8 \times 10^{-05}$
Model A	25.67	$6.9 \times 10^{-04}$
Model B	0.60	$1.8 \times 10^{-05}$
Model C	5.65	$1.5 \times 10^{-04}$
Model D	6.90	$2.1 \times 10^{-04}$

The NO mass fraction fields obtained with the five approaches for NO modelling are compared in Figures 5 and 6. The results of these simulations give a tendency coherent with the 0D and 1D simulations presented in the previous part of this paper. In Figure 5, the top field results from direct interpolation in the manifold (model 0) and corresponds to the field that would be obtained with a FGM/FPI model without any particular treatment for NO. In that case, NO is essentially present in the recirculation zone evidenced by the streamlines, and the average mass fraction reduces to  $1.8 \times 10^{-05}$  in the outlet section. This value is not far from the maximum value of NO mass fraction obtained in the not extended manifold at the mixture fraction  $Z$  corresponding to the FAR of 0.5, which is equal to  $2.5 \times 10^{-5}$ .

The middle field of Figure 5 is the solution obtained by transporting NO with the source term deduced from the not extended flamelet manifold (i.e., model A). As expected, the global level of NO is higher, with an average mass fraction of  $6.9 \times 10^{-04}$  in the outlet section (38 times the level obtained with direct interpolation). This is induced by the possibility for the concentration of NO to linearly increase once the progress variable has reached its maximum value. Indeed, with the not extended manifold, the source term which is frozen and independent of the local conditions keeps non physical large values in the post-flame zone, leading to overestimated NO concentrations.

The lowest field of Figure 5 has been obtained with the extended table (i.e., model C). Compared to the top field results, NO is present in the convergent part of the domain, and in the outlet section. Nevertheless, the average mass fraction in the outlet section is lower ( $1.5 \times 10^{-4}$ ) than with the source term picked in the not extended manifold. The reason is that the source term taken in the extended manifold is linked on the local NO concentration through the progress variable, and thus decreases when the NO mass fraction increases.

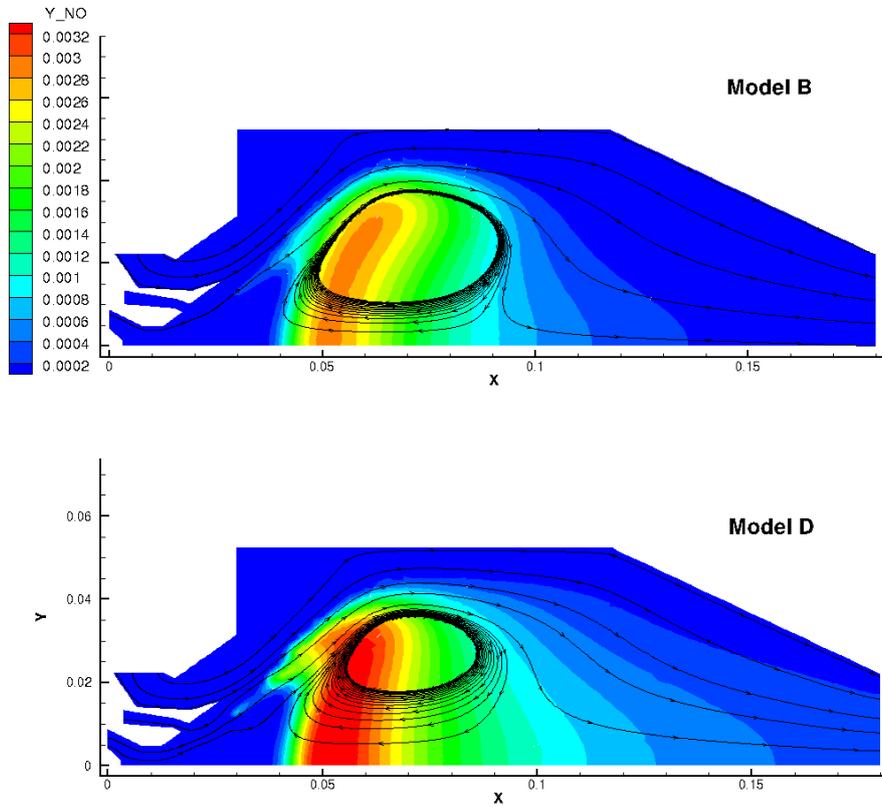
**Figure 5** NO mass fraction field for three simulations of the TAPS configuration (see online version for colours)



Notes: The colour scale is common to the three NO mass fraction fields. Top, tabulated chemistry without any method dedicated to NO, middle, model A, bottom, model C.

In Figure 6, both fields were obtained with the source term given by equations (8) and (9). For the upper field, the not extended manifold was used (i.e., model B) and for the lower field, the extended manifold was used (i.e., model D). The predictions obtained with model B are very close to those obtained with model 0, while model D gives results similar, though not identical, to those of model C. This points out that in this configuration, the results are mainly influenced by the choice of the manifold. Hence, whatever the method used to calculate the source term, the PFR extension is essential to reproduce residence time effects in the industrial TAPS burner configuration.

**Figure 6** NO mass fraction field for two simulations of the TAPS configuration (see online version for colours)



Notes: The colour scale is the same as Figure 5. On top, model B, below model D.

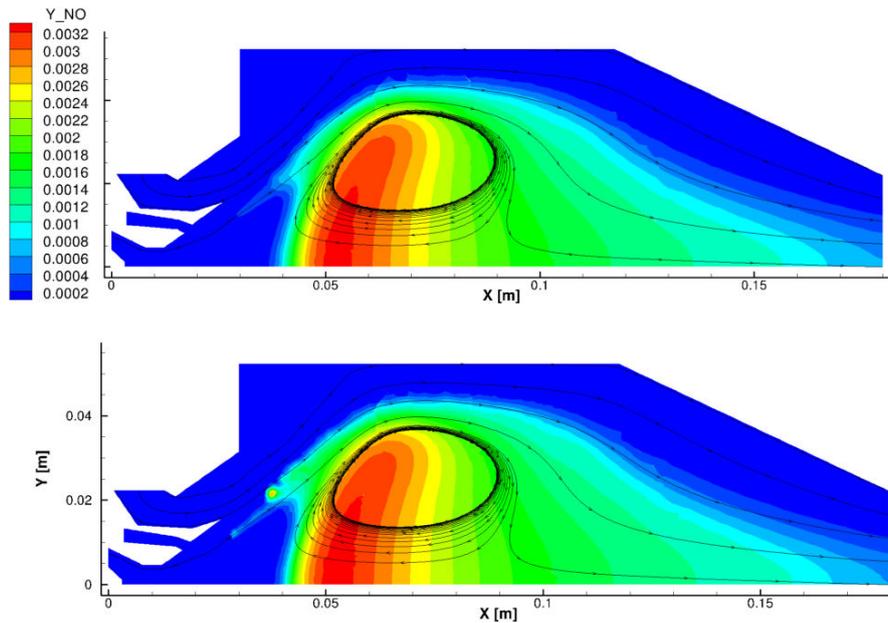
It is worth noting that the NO concentration obtained with the model C is very close to the NO concentration obtained by direct picking<sup>2</sup> in the extended manifold, as shown in Figure 7. This indicates that the relaxation term used in model C [see equation (4)] to avoid deviations from tabulated trajectories has a correct effect on the solution.

A further analysis of the fields obtained with the model C has been carried out. The mean residence time  $\tau$  and its standard deviation  $\sigma_\tau$  were calculated from the residence time distribution (RTD) (Nauman, 2003). To evaluate the RTD, an unsteady simulation is done to record the flux for a passive scalar ( $S$ ) through the outlet section. Starting from the steady state solution, the scalar  $S$  was injected at the three inlets, during a very short time (relatively to the expected residence time). Then, the unsteady RANS calculation was run during 0.1 s, to completely evacuate the passive scalar from the domain. The evolution of the mass flux of this scalar  $\Phi_S(t)$  versus time, in the outlet section, was recorded during the complete simulation. Hence, the mean residence time and its standard deviation were obtained from:

$$\bar{\tau} = \frac{\int_0^\infty t \Phi_S(t) dt}{\int_0^\infty \Phi_S(t) dt} \quad (14)$$

$$\sigma_\tau = \left( \frac{\int_0^\infty (t - \bar{\tau})^2 \Phi_S(t) dt}{\int_0^\infty \Phi_S(t) dt} \right)^{0.5} \quad (15)$$

**Figure 7** NO mass fraction field obtained with the extended manifold by solving an equation for NO (top) and by direct interpolation in the table (bottom) (see online version for colours)

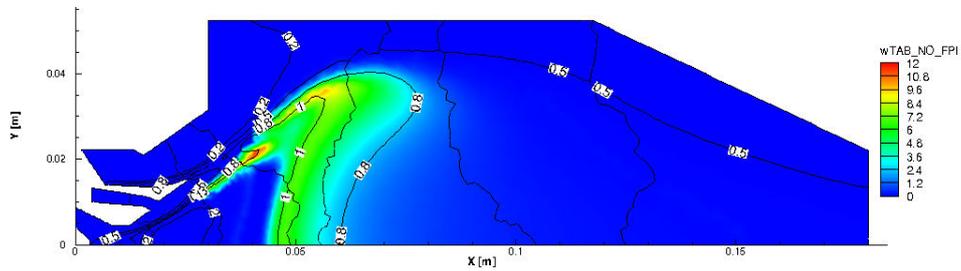


Note: The colour scale is common to the two NO mass fraction fields.

The mean residence time was found to be 4.0 ms with a standard deviation of 2.5 ms. As mentioned earlier, the average NO mass fraction in the outlet section predicted by model C is  $1.5 \times 10^{-4}$ , with an average FAR of 0.5. In the laminar unstretched premixed 1D flame used to generate the manifold, the NO mass fraction after 20 ms of residence time is only  $3 \times 10^{-5}$  for the same FAR of 0.5. To obtain a NO mass fraction of  $1.5 \times 10^{-4}$  in the laminar 1D flame, we have to consider the abscissa where the residence time reaches 136 ms, which is much larger than the average residence time in the outlet section of the TAPS burner. This comes from the fact that the predicted NO concentration in the outlet section is driven by the capacity of the model to take into account the FAR history in the fluid particles. Actually, NO is mainly produced in areas where the FAR is close to stoichiometry (see Figures 8 and 9). The NO mass fraction increases in these regions, in conjunction with the progress variable  $Y_c^{def3}$ . Then, before reaching the outlet, the mixing reduces the FAR and the NO mass fraction, but this mass fraction remains much higher than the value that would be obtained at the outlet FAR with the same residence time. This explains why we obtain levels equivalent to those corresponding to residence time larger than 100 ms at a constant FAR of 0.5, while the mean residence time is only 4.0 ms. This mechanism of dilution near the outlet also

explains why there is a saturation effect with model 0 and model B, which both use the not extended manifold. Indeed, in those calculations, when the mixing reduces the FAR before reaching the outlet, it also decreases dramatically the value of NO mass fraction picked in the not extended manifold (as mentioned previously, the maximum NO mass fraction is equal to  $2.5 \times 10^{-5}$  for the FAR of 0.5 in this manifold). Thus, the NO mass fraction is bounded by the tabulated value obtained at the maximum value of the progress variable even with the model B based on the picking of the reaction rate but leading to a very slow NO evolution in the post-flame.

**Figure 8** NO reaction rate field and FAR contour lines, obtained with model C (see online version for colours)



**Figure 9** Cumulated NO source term [kg/s/rad] as function of FAR, weighted by the FAR section size (see online version for colours)

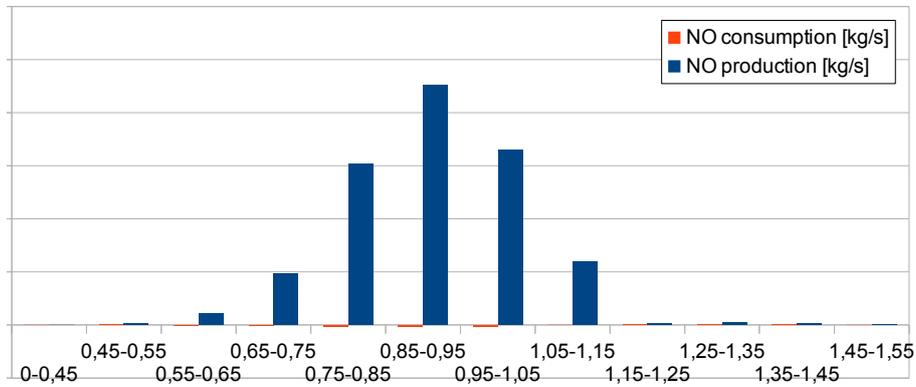


Figure 9 shows cumulated NO net production terms in FAR sections. Blue bars correspond to cells where the net production is positive (*NO production*) while orange bars correspond to cells where the net production is negative (*NO consumption*). Those cumulated terms are expressed as:

$$\frac{\sum_1^N ((\overline{\dot{\omega}_{NO}}V)|_{\phi \in [\phi_n; \phi_{n+1}]})}{\phi_{n+1} - \phi_n} \quad (16)$$

with  $N$  the number of cells of the mesh,  $\phi_n$  and  $\phi_{n+1}$  the lower and upper bounds of the FAR section,  $V$  the volume per radian of the cell, and  $\overline{\dot{\omega}_{NO}}$  the NO consumption or

production rate in the cell. NO is mainly produced in areas where the FAR is close to 0.95, and the weight of the area where the net NO source term is negative is negligible.

The validation of the method by comparison with the experiment is required. For that, it is necessary to realise 3D LES computations to correctly capture the mixing by the large scales of turbulence. The turbulence-chemistry interaction must be taken into account, to accurately predict the reaction rates where the flame is submitted to high turbulence levels. This will have an influence on NO predictions since prompt NO is produced in those areas. Although the complexity of these rigorous validations have been left aside in the present paper, the 2D axi-symmetric simulations of the TAPS burner configuration yield important conclusions. They clearly show that, to calculate such type of combustion chambers, it is necessary to turn to chemistry tables taking into account large residence times and the PFR extension is particularly adapted to such configurations.

## 6 Conclusions

The FPI/FGM tabulated chemistry model gives rise to difficulties when some species have an evolution time greater than the main species. Some methods are proposed in the literature to improve the modelling of the NO formation. Nevertheless they have been shown unable to solve this problem in the case of flows having quite large residence time, or when the FAR stratification of the flow leads to NO concentrations equivalent to those obtained with a large residence time at constant FAR. A new method has been proposed to extend the validity of the manifold used in a tabulated chemistry model, in order to take into account species having a long evolution time such as NO. This method can be implemented very easily with a negligible additional CPU cost and gives encouraging results on the simulation of a TAPS burner. The simplicity and the low CPU cost of the proposed method give us the possibility to introduce an additional entry in the chemical table to take into account thermal losses if necessary, as it has already been done with the not extended manifold. In addition, it is compatible with existing turbulence/chemistry interaction closures. A further work of validation by comparison with experimental results has still to be done, and requires more expensive 3D calculations.

## References

- Baba, Y. and Kurose, R. (2008) 'Analysis and flamelet modelling for spray combustion', *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 612, October, pp.45–79."
- Dorey, L-H. (2012) *Modelling of Combustion, Soot Formation and Radiative Transfer Coupled Phenomena in Gas Turbine Combustion Chambers*, PhD thesis, Ecole Centrale Paris, Châtenay-Malabry, France [online] <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00731144>.
- Fiorina, B., Gicquel, O., Vervisch, L., Carpentier, S. and Darabiha, N. (2005) 'Premixed turbulent combustion modeling using tabulated detailed chemistry and PDF', *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 30, No. 1, pp.867–874.
- Fiorina, B., Vicquelin, R., Auzillon, P., Darabiha, N., Gicquel, O. and Veynante, D. (2010) 'A filtered tabulated chemistry model for LES of premixed combustion', *Combustion and Flame*, Vol. 157, No. 3, pp.465–475.

- Galpin, J. (2007) *LES Modelling of Combustion Taking into Account Detailed Kinetic Effects and with the Perspective of Piston Engine Applications*, PhD thesis, INSA de Rouen, Saint-Etienne du Rouvray, France [online] <http://www.theses.fr/2007ISAM0018>.
- Gicquel, O., Darabiha, N. and D. Thévenin (2000) 'Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion', *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 28, No. 2, pp.1901–1908.
- Godel, G., Domingo, P. and Vervisch, L. (2009) 'Tabulation of NO<sub>x</sub> chemistry for large-eddy simulation of non-premixed turbulent flames', *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 32, No. 1, pp.1555–1561.
- Goodwin, D., Malaya, N., Moffat, H. and Speth, R. (2013) 'Cantera: an object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes', v2.1a [online] <https://code.google.com/p/cantera/> (accessed 2014-04-01).
- Ihme, M. and Pitsch, H. (2008) 'Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent nonpremixed flames using a flamelet/progress variable formulation', *Physics of Fluids*, Vol. 20, No. 5, pp.055110–055110–20.
- Ketelheun, A., Olbricht, C., Hahn, F. and Janicka, J. (2011) 'NO prediction in turbulent flames using LES/FGM with additional transport equations', *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 33, No. 2, pp.2975–2982.
- Kuenne, G., Ketelheun, A. and Janicka, J. (2011) 'LES modeling of premixed combustion using a thickened flame approach coupled with FGM tabulated chemistry', *Combustion and Flame*, Vol. 158, No. 9, pp.1750–1767.
- Luche, J. (2003) *Elaboration of Reduced Kinetic Models of Combustion – Application to a Kerosene Mechanism*, PhD thesis, University of Orléans, France [online] <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00636023>.
- Nauman, E.B. (2003) 'Residence time distributions', in E.L. Paul, V.A. Atiemo-Obeng and S.M. Kresta (Eds.): *Handbook of Industrial Mixing*, pp.1–17, John Wiley & Sons, Inc.
- Savre, J., Bertier, N., D'Angelo, Y. and Gaffié, D. (2008) 'A chemical time scale approach for FPI modeling', *Comptes Rendus Mécanique*, Vol. 336, Nos. 11–12, pp.807–812.
- Towards Lean Combustion (2005) [online] [http://ec.europa.eu/research/transport/projects/items/tlc\\_en.htm](http://ec.europa.eu/research/transport/projects/items/tlc_en.htm) (accessed 2014-04-01).
- Van Oijen, J., Lammers, F. and de Goey, L. (2001) 'Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds', *Combustion and Flame*, Vol. 127, No. 3, pp.2124–2134.
- Van Oijen, J.A. and De Goey, L.P.H. (2009) 'Predicting no formation with flamelet generated manifolds', in *Proceedings of the European Combustion Meeting*.
- Vreman, A., Albrecht, B., van Oijen, J., de Goey, L. and Bastiaans, R. (2008) 'Premixed and nonpremixed generated manifolds in large-eddy simulation of sandia flame d and f', *Combustion and Flame*, Vol. 153, No. 3, pp.394–416.

## Notes

- 1 Actually, enthalpy losses can appear locally. This can then be taken into account by adding the enthalpy coordinate to the extended flamelet manifold, but this is beyond the scope of this paper.
- 2 The calculations presented here were done with the indirect approach as presented in the first section. Nevertheless, the tabulated mass fractions are stored in the manifold, and thus the field given by direct interpolation in the manifold can be calculated.

**Nomenclature**


---

$\dot{\omega}_i$	Reaction rate
$\mathcal{M}_i$	Molecular weight of species $i$
$\phi$	Fuel-air ratio
$\rho$	Density
$\tau$	Characteristic time
$c$	Dimensionless progress variable
$T$	Temperature
$t$	Time coordinate
$V$	Volume
$x, y, z$	Spatial coordinates
$Y_c$	Progress variable
$Y_i$	Mass fraction of the species $i$
$Z$	Mixture fraction
F-TACLES	Filtered tabulated chemistry for large eddy simulation (turbulent combustion model)
FAR	Fuel air ratio
FGM	Flamelet generated manifold (combustion model)
FPI	Flame prolongation of ILDM (combustion model)
LES	Large eddy simulation
NO	Nitric oxide
NO <sub>x</sub>	Nitrogen oxides
PDF	Probability density function
PFR	Plug flow reactor
RANS	Reynolds average Navier-Stokes
RTD	Residence time distribution
TAPS	Twin annular premixing swirler
TFLES	Thickened flame for large eddy simulation (chemistry-turbulence interaction model)
TLC	Towards lean combustion (european project)

---

## 4.2 Similitudes entre la méthode d'extension de la table FTC par calcul PFR et les récents travaux de Pecquery

Pecquery [77] a récemment proposé un modèle de formation des  $\text{NO}_x$  baptisé NOMANI (Nitrogen Oxide emission model with one-dimensional MANifold). Ce modèle est assez similaire à la modélisation proposée ici, puisqu'il repose :

- sur une description de la formation du NO dans la flamme via le modèle FPI [34], dans lequel des flammes 1D prémélangées sont tabulées ;
- sur une description de la formation des  $\text{NO}_x$  en aval de la flamme au moyen d'une table générée à partir de simulations de réacteurs chimiques à enthalpie et pression constante.

La principale différence entre la méthode d'extension de la table FTC et le modèle NOMANI réside dans l'indexation des tables. Dans la méthode d'extension de la table FTC proposée ici, une variable d'avancement normalisée unique est utilisée afin d'indexer la solution de la flamme 1D obtenue à richesse fixée et la solution du réacteur piston, encore désigné PFR (Plug Flow Reactor) obtenue à la même richesse. En effet, on a montré qu'il y avait une continuité entre la solution de flamme 1D et la solution du PFR, cette dernière correspondant à l'évolution des gaz brûlés en aval de la flamme 1D. Ces deux solutions sont ainsi concaténées en une seule qui est stockée dans la table FTC. La variable d'avancement unique est formulée comme  $c^{FTC} = \frac{\hat{c}}{\hat{c}|_{eq}}$  avec  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{\mathcal{M}_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{\mathcal{M}_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{\mathcal{M}_{\text{NO}}}$ , où  $\kappa$  est une constante contrôlant le poids de NO dans la variable d'avancement et l'indice  $eq$  fait référence à la composition du mélange à l'équilibre. Le taux de réaction d'une espèce s'écrit :

$$\dot{\omega}_i^{FTC} = \dot{\omega}_i^{TAB}(Z, c^{FTC}). \quad (4.3)$$

Dans le modèle NOMANI, deux variables d'avancement sont définies. La première est utilisée pour indexer la table FPI :  $c^{NOMANI} = \frac{Y_{\text{CO}_2} + Y_{\text{CO}}}{(Y_{\text{CO}_2} + Y_{\text{CO}})|_{eqC}}$ , où l'indice  $eqC$  fait référence à la composition du mélange obtenue lorsque l'équilibre  $\text{CO}/\text{CO}_2$  est atteint. La seconde,  $Y_{\text{NO}}$ , est utilisée pour indexer la table obtenue à partir des solutions de réacteur chimique (solution référencée ci-dessous par l'exposant  $GB$ ). Le terme source des espèces est extrait de la table  $FPI$  lorsque la valeur de  $c^{NOMANI}$  est inférieure à  $(1 - \epsilon)$ ,  $\epsilon$  étant petit devant 1. Ce terme source est pris dans la table type réacteur chimique lorsque la valeur de  $c^{NOMANI}$  est supérieure ou égale à  $(1 - \epsilon)$ . Le taux de réaction d'une espèce est ainsi exprimé comme :

$$\dot{\omega}_i^{NOMANI} = \dot{\omega}_i^{FPI}(Z, c^{NOMANI})\mathcal{H}(1 - \epsilon - c) + \dot{\omega}_i^{GB}(Z, Y_{\text{NO}})\mathcal{H}(c - (1 - \epsilon)), \quad (4.4)$$

où  $\mathcal{H}$  est la fonction d'Heaviside, et  $\epsilon$  un paramètre du modèle, petit devant 1.

On peut s'attendre à ce que ces deux modélisations de la formation des  $\text{NO}_x$  (FTC avec extension par PFR, ou NOMANI) donnent des résultats similaires pour la prédiction de la formation des  $\text{NO}_x$ , puisqu'elles sont basées sur le même partitionnement de la description des réactions de production du NO : flamme 1D pour le NO prompt, réacteur pour le NO thermique et le  $\text{NO}_2$ .

Les travaux de Pecquery montrent également que le modèle NOMANI (et donc à priori la méthode d'extension par PFR) permet de prendre en compte les effets de dilution par injection d'air secondaire. On trouve ce type de dilution en aval de flamme dans les chambres de combustion aéronautiques. De plus, le modèle a été validé sur la simulation de la flamme Sandia D, configuration qui comporte des mesures expérimentales de concentration de NO. Cela permet de conforter l'approche retenue pour la modélisation du NO thermique au moyen de solutions tabulées de réacteur, telle que celle proposée dans le cadre de cette thèse.



Dans ce chapitre, on propose une modélisation de la combustion dans les écoulements diphasiques avec le modèle FTC. Cette modélisation s'applique aux écoulements présents dans les foyers aéronautiques qui sont de nature diphasique puisque le carburant y est injecté sous forme liquide, tandis que l'air, la vapeur de carburant et les produits de combustion constituent un mélange de gaz. Pour modéliser ces écoulements, la phase liquide est généralement traitée dans un solveur dédié opérant des transferts de masse, d'énergie et de quantité de mouvement avec le solveur traitant la phase gazeuse. Dans ce dernier, la vapeur du carburant n'est pas introduite aux limites comme pour une injection sous forme gazeuse, mais directement en certains points du domaine par un terme source d'évaporation, ce qui doit être pris en compte par le modèle FTC. De plus, dans ce type d'écoulement, la structure de flamme est modifiée du fait de l'interaction avec les gouttes (évaporation, transferts thermiques...). Il peut être alors nécessaire d'adapter le modèle FTC pour décrire correctement cette structure. Dans cette optique, on effectue une revue des différentes méthodes proposées dans la littérature pour décrire la structure de flammes diphasiques au moyen d'une chimie tabulée. Suite à cela, on fait l'hypothèse que la structure d'une flamme diphasique peut être décrite par une table générée à partir de flammes monophasiques. La complexité de la flamme diphasique peut nécessiter l'augmentation du nombre de dimensions de la table FTC. Cependant, afin de limiter l'occupation mémoire et le nombre d'équations, on choisit en première approche de garder une indexation à l'aide des variables ( $Z, c$ ). La méthode retenue pour modéliser les flammes diphasiques avec le modèle FTC est alors validée dans le cas de flammes 1D laminaires. On s'intéresse en particulier aux limites posées par l'utilisation d'une table à deux dimensions pour décrire la structure de la flamme diphasique.

### Sommaire

<b>5.1</b>	<b>Modification du modèle FTC de CEDRE pour traiter la combustion diphasique</b>	<b>82</b>
5.1.1	Limites du modèle FTC dans CEDRE en cas d'injection du carburant sous forme liquide	82
5.1.2	Choix d'une approche de la littérature pour contourner ces limites	82
<b>5.2</b>	<b>Validation du modèle FTC sur flamme diphasique 1D</b>	<b>83</b>
5.2.1	Gouttes de 5 $\mu\text{m}$ de diamètre	84
5.2.2	Gouttes de 25 $\mu\text{m}$	87
5.2.3	Gouttes de 50 $\mu\text{m}$ et 100 $\mu\text{m}$ de diamètre	88
<b>5.3</b>	<b>Remarques sur l'influence du temps de relaxation du modèle FTC</b>	<b>90</b>
<b>Bilan</b>		<b>92</b>

## 5.1 Modification du modèle FTC de CEDRE pour traiter la combustion diphasique

### 5.1.1 Limites du modèle FTC dans CEDRE en cas d'injection du carburant sous forme liquide

Le caractère diphasique de la combustion a plusieurs conséquences au niveau du modèle FTC :

- La fraction de mélange  $Z$  n'est plus un scalaire passif. Elle est certes toujours passive du point de vue de la chimie, mais sa valeur est modifiée lors de l'évaporation du carburant. Il faut donc prendre en compte l'évaporation des gouttes dans l'équation de transport de  $Z$ , ou bien redéfinir une fraction de mélange prenant en compte les gouttes de carburant dans sa définition, comme proposé par Vié et al. [105].
- La structure locale de la flamme est modifiée. Les travaux de Baba et Kurose [4] montrent au moyen d'une DNS 2D qu'il y a localement coexistence de régimes dans les flammes spray, allant de la diffusion au prémélange. Dans le même esprit, Watanabe et al. [109] montrent sur des flammes diphasiques à contre-courant que l'indexation de la table par la fraction de mélange et sa dissipation scalaire n'est pas univoque, c'est à dire qu'il existe de multiples états du mélange pour  $(Z, \chi_Z)$  fixés. Cela indique que la structure de la flamme diphasique n'est pas similaire à celle d'une flamme de diffusion monophasique comme postulé parfois dans la littérature. L'utilisation d'une table monophasique purement prémélangée ou de diffusion est donc source d'erreur dans le traitement des écoulements diphasiques en combustion.
- La phase gazeuse subit des pertes thermiques liées à l'échauffement et à l'évaporation des gouttes. Ces pertes doivent donc théoriquement être prises en compte dans le modèle FTC.
- Une flamme de diffusion peut s'établir autours de certaines gouttes de carburant. Ces gouttes en combustion nécessitent une modélisation particulière, car les maillages utilisés dans nos applications ne permettent pas de discrétiser la flamme s'établissant autour d'une goutte.

### 5.1.2 Choix d'une approche de la littérature pour contourner ces limites

Concernant le premier point, on décide d'introduire un terme source lié à l'évaporation du carburant dans l'équation de transport de la fraction de mélange, cette méthode ayant déjà conduit à de bons résultats [4, 16]. Dans le cadre général d'une formulation multi-composants du carburant, et avec la définition de  $Z$  utilisée dans ce mémoire (eq.2) on peut formuler ce terme source comme :

$$\dot{\omega}_Z^{evap} = \frac{\partial Z}{\partial t} \Big|^{evap} = \frac{\partial(Y_C + Y_H)}{\partial t} \Big|^{evap} \frac{1}{(Y_C + Y_H)|_F - (Y_C + Y_H)|_O}, \quad (5.1)$$

soit :

$$\dot{\omega}_Z^{evap} = \frac{\dot{\omega}_C^{evap} + \dot{\omega}_H^{evap}}{(Y_C + Y_H)|_F - (Y_C + Y_H)|_O}, \quad (5.2)$$

soit encore :

$$\dot{\omega}_Z^{evap} = \frac{\mathcal{M}_C \sum_{j=1}^J \frac{n_{C,j}}{\mathcal{M}_j} \dot{\omega}_j^{evap} + \mathcal{M}_H \sum_{j=1}^J \frac{n_{H,j}}{\mathcal{M}_j} \dot{\omega}_j^{evap}}{(Y_C + Y_H)|_F - (Y_C + Y_H)|_O}, \quad (5.3)$$

où  $J$  est le nombre d'espèces transportées,  $\mathcal{M}_C$  et  $\mathcal{M}_H$  sont respectivement les masses molaires atomiques des atomes de carbone et d'hydrogène,  $\mathcal{M}_j$  est la masse molaire de l'espèce  $j$ ,  $n_{C,j}$  et  $n_{H,j}$  sont respectivement les nombres d'atomes de carbone et d'hydrogène dans l'espèce  $j$ , et  $\dot{\omega}_j^{evap}$  est le terme source lié à l'évaporation pour l'espèce  $j$ ,  $F$  indique les valeurs dans le carburant pur et  $O$  dans l'oxydant pur.

Dans le cadre de la combustion aérobie d'un hydrocarbure mono-composant, cette expression devient :

$$\dot{\omega}_Z^{evap} = \frac{x \mathcal{M}_C}{\mathcal{M}_{C_x H_y}} \dot{\omega}_{C_x H_y}^{evap} + \frac{y \mathcal{M}_H}{\mathcal{M}_{C_x H_y}} \dot{\omega}_{C_x H_y}^{evap}. \quad (5.4)$$

Il faut noter que, pour certains modèles d'interaction chimie-turbulence pour FTC basés sur le transport de la variance de la fraction de mélange  $Z_v$ , l'introduction d'un terme source  $\dot{\omega}_Z^{evap}$  dans

l'équation de  $Z$  se répercute dans celle de  $Z_v$  sous forme d'un terme de corrélation croisée qui doit être fermé. Ce point sera abordé dans le chapitre 6.

Concernant la structure locale de la flamme diphasique, si l'on fait l'hypothèse qu'il existe toujours une structure similaire dans une flamme purement gazeuse de diffusion, partiellement prémélangée, ou prémélangée, alors la combustion en présence de spray est, pour le modèle FTC, un problème similaire à celui de la combustion gazeuse en régime mixte. Ce point a été abordé dans le chapitre 2. On a vu que plusieurs solutions étaient proposées dans la littérature (ajout de dimensions dans la table, couplage de tables via un critère type Takeno [113], etc...). Notamment, les travaux de Franzelli et al. [30] montrent qu'il est possible de reproduire la structure d'une flamme diphasique à l'aide d'une table de type prémélange partiel indexée par  $Z$ ,  $c$ , et le taux de dissipation scalaire  $\chi_Z$ . Toutefois, dans le cadre de cette étude, aucune de ces solutions n'a été implémentée dans le code CEDRE, la priorité ayant été donnée au développement de la modélisation des polluants présentée dans les autres chapitres. On utilise donc par la suite une table générée à partir de flammes prémélangées<sup>1</sup>, avec l'erreur que cela implique sur l'évaluation des taux de réaction par le modèle FTC. Il serait évidemment plus satisfaisant d'éliminer cette source d'erreur, en proposant une meilleure modélisation de la structure de flamme diphasique, mais cela n'entre pas dans le cadre de ce travail.

Les transferts thermiques liés à l'évaporation des gouttes sont pris en compte par le solveur CHARME dans l'équation de transport de l'énergie, indépendamment du modèle de combustion utilisé. Ces transferts thermiques entraînent localement une diminution de la température par rapport à la température adiabatique. Avec le modèle FTC, cette variation de la température peut être prise en compte dans le calcul des termes source chimiques au moyen de l'ajout d'une dimension enthalpie à la table. Néanmoins, on fait ici l'hypothèse que cet écart de température peut être négligé en première approche. En effet, le kérosène, carburant utilisé dans les foyers aéronautiques, a une chaleur latente de vaporisation de  $349,5 \cdot 10^3 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$  à 300 K, ce qui est très faible comparé à son pouvoir calorifique inférieur qui est de l'ordre de  $43 \cdot 10^6 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ . Ainsi, avec le modèle FTC, les termes sources chimiques sont évalués avec une température adiabatique, quelque soit la température obtenue localement dans le solveur CHARME.

La présence de flamme de diffusion autour de certaines gouttes n'est pas traitée. On fait l'hypothèse que ce phénomène peut également être négligé en première approche dans la prédiction des émissions polluantes au sein des foyers aérobie, d'autant plus que le développement d'un modèle spécifique est nécessaire compte tenu du fait que les gouttes ne sont pas discrétisées par le maillage, et modélisées par un autre solveur que celui de la phase gazeuse.

Finalement, dans le cadre de cette thèse, la seule modification du modèle FTC pour la combustion diphasique concerne la prise en compte du terme source d'évaporation intervenant dans l'équation de transport de la fraction de mélange. La prise en compte du régime mixte de combustion sera donc une perspective d'amélioration importante pour la suite de ces travaux.

## 5.2 Validation du modèle FTC sur flamme diphasique 1D

Afin de valider l'implémentation du terme source d'évaporation dans l'équation de  $Z$ , des simulations d'une flamme diphasique 1D ont été réalisées. Cette flamme est définie d'après les travaux de Bruyat et al. [12], à savoir la propagation libre d'une flamme dans un mélange air/gouttes de carburant à l'équilibre thermodynamique, ces dernières ayant une distribution spatiale homogène en taille et en fraction volumique (voir figure 5.1). Ce cas n'a évidemment pas de réalité physique puisqu'il suppose que les gouttes sont en suspension dans l'air. Néanmoins, c'est un cas de validation pour de la combustion diphasique relativement aisé à mettre en œuvre et riche d'enseignements.

Pour valider les résultats obtenus avec le modèle FTC, les mêmes calculs ont été réalisés avec une résolution directe de la cinétique chimique dans CEDRE. Afin de limiter le nombre d'espèces à transporter dans ces simulations, tout en utilisant un carburant représentatif des carburants aéronautiques, la cinétique de Franzelli et al. [31] a été utilisée à la fois en chimie directe et pour générer la table

---

1. Seule une table de flammes prémélangées a été testée dans le cadre de cette thèse, mais en principe, il est tout à fait possible d'utiliser une table de flammes de diffusion de la même façon. L'utilisation faite ici d'une table de flammes prémélangées sera justifiée par la suite.

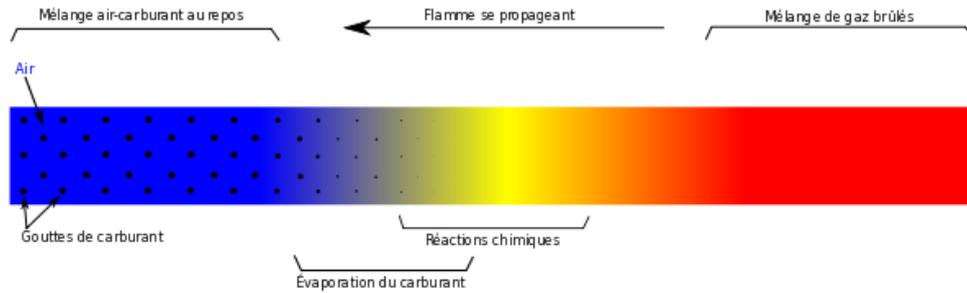


FIGURE 5.1 – Schéma du cas test de flamme diphasique : flamme 1D se propageant dans un mélange homogène d’air et de gouttes de carburant au repos.

FTC.

La fraction volumique de carburant liquide en suspension est fixée de manière à obtenir une richesse globale de 0,8 pour tous les cas étudiés. Par conséquent, si on augmente la taille des gouttes au repos, cette augmentation est compensée par une diminution de leur nombre. Selon la taille de ces gouttes, le temps mis pour qu’elles s’évaporent totalement est différent. Ainsi, les gouttes peuvent s’évaporer entièrement dans la zone de diffusion thermique de la flamme, ou bien continuer de s’évaporer dans la zone de réaction, voire dans les gaz brûlés si le temps d’évaporation est suffisamment grand, donnant des structures de flamme assez différentes. Notamment, l’évolution de la richesse locale le long de la flamme varie en fonction de la taille des gouttes. Pour des gouttes suffisamment petites, les gouttes sont totalement évaporées, et le mélange de gaz atteint la richesse locale de 0,8 avant le début de la zone de réaction. Pour des gouttes de diamètre plus important, la richesse locale du mélange gazeux augmente tout au long de la zone de réaction. Les flammes modélisées présentent donc des gradients de richesse locale. Néanmoins, on peut supposer que la valeur de ces gradients n’est pas trop élevée, et que la structure de flamme reste localement plus proche de celle d’une flamme prémélangée, que de celle d’une flamme de diffusion. C’est pourquoi la table utilisée pour les calculs FTC a été générée à partir de simulations de flammes prémélangées.

Quatre cas de calcul ont été étudiés. Dans le premier, des gouttes au repos de  $5\ \mu\text{m}$  de diamètre permettent d’obtenir une évaporation complète de ces dernières en amont de la zone de réaction de la flamme. La structure de la flamme diphasique est donc a priori similaire à celle d’une flamme monophasique prémélangée, ce qui en fait un cas favorable pour le modèle FTC avec la table de type prémélange utilisée, puisque le calcul de ne diffère de celui d’une flamme monophasique prémélangée que par la présence d’une terme source dans l’équation de transport de  $Z$ . Les trois autres cas étudiés correspondent à des diamètres de goutte respectifs de  $25\ \mu\text{m}$ ,  $50\ \mu\text{m}$  et  $100\ \mu\text{m}$ , et présentent des temps d’évaporation plus longs entraînant une variation de richesse dans la zone de réaction. Il font donc appel à une collection d’états issus de flammes prémélangées et de richesses différentes. La capacité à reproduire correctement la structure de flamme diphasique avec le modèle FTC au moyen d’une table monophasique est donc davantage susceptible d’être mise en défaut par ces trois cas tests que par le premier.

Tous les calculs ont été faits avec un pas de temps de  $1.10^{-6}\ \text{s}$ , et le temps de relaxation du modèle FTC (concernant les termes de relaxation présentés au chapitre 1) a été fixé à  $5.10^{-6}\ \text{s}$ . La variable d’avancement normalisée  $c$  utilisée est fonction uniquement de la fraction massique de  $\text{CO}_2$ , soit  $c = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{Y_{\text{CO}_2}|_{eq}}$ , ce qui assure sa monotonie pour des richesses inférieures à la stœchiométrie, la richesse globale étant de 0,8 dans tous les cas.

### 5.2.1 Gouttes de $5\ \mu\text{m}$ de diamètre

Le premier cas étudié est celui ayant les gouttes de diamètre le plus faible, qui sont presque totalement évaporées avant le front de flamme. La vitesse de propagation de la flamme obtenue avec le modèle FTC est légèrement surestimée par rapport à la valeur obtenue avec la résolution directe de la chimie (2,9%) comme le montre la figure 5.2. Les profils de température et de fraction massique sont

correctement reproduits par FTC pour la majorité des espèces comme le montre la figure 5.3. Seules les fractions massiques de  $C_{10}H_{20}$  et de CO montrent de légers écarts entre FTC et chimie directe. La fraction massique de  $C_{10}H_{20}$  atteint un maximum de 0,045 ce qui est proche de la fraction massique (0,051) obtenue dans un mélange de gaz frais  $C_{10}H_{20}$ -air de richesse 0,8, confirmant que les gouttes sont presque totalement évaporées avant le front de flamme. Sur la figure 5.4, partie de gauche, on observe que les taux de réaction donnés par le modèle FTC sont très similaires à ceux données par la chimie directe. On note toutefois une légère surestimation du maximum des taux de réaction de  $CO_2$  et  $O_2$  par le modèle FTC, ce que l'on peut relier à l'écart observé sur la fraction massique de CO. Le  $CO_2$  est la seule espèce qui intervient dans la définition de variable d'avancement normalisée  $c$ , dont l'évolution contrôle la propagation de la vitesse de flamme dans le cas du modèle FTC. La surestimation du taux de réaction de  $CO_2$  est assez faible, mais cela explique qu'on ait une erreur de 2,9% pour la vitesse de flamme donnée par FTC. On peut se demander si la surestimation des termes sources est due aux termes de relaxation présentés au chapitre 1. Sur la partie de droite de la figure 5.4, on observe un parfait accord entre les termes source extraits directement de la table FTC, et les termes source incluant les termes de relaxation introduits au chapitre 1. Cela signifie que les termes de relaxation sont négligeables dans l'ensemble de la flamme, et que la surestimation du terme source de  $CO_2$  est directement liée à la valeur du terme source extrait de la table FTC et non à ces termes de relaxation.

Quoi qu'il en soit, les écarts observés sur les taux de réaction, les fractions massiques, et la vitesse de flamme sont acceptables. On peut signaler que l'on observe un léger écart entre la température tabulée et la température locale sur la partie de droite de la figure 5.4. Cet écart atteint une valeur maximale de 14 K, et peut être attribué au fait que l'évaporation des gouttes est un phénomène endothermique qui n'est pas pris en compte dans la table<sup>2</sup>. L'erreur d'évaluation des termes source induite par cet écart de température peut être négligé, compte tenu de la faible valeur de ce dernier.

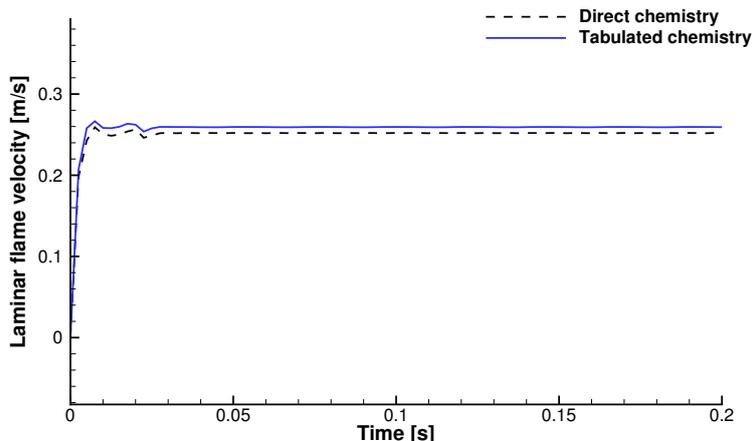


FIGURE 5.2 – Évolution au cours du temps de la vitesse de flamme pour une flamme diphasique dans le cas de gouttes de  $5\ \mu\text{m}$  de diamètre. Le calcul est initialisé avec un profil de type discontinuité de contact.

La surestimation de la vitesse de flamme par le modèle FTC peut provenir d'une erreur de modélisation de la structure de flamme diphasique, dont on rappelle qu'elle est approchée avec la table FTC par un ensemble de flamme monophasiques. L'erreur sur la vitesse de flamme peut également provenir d'un problème plus général de calcul du terme source par FTC, qui n'aurait pas été mis en évidence au chapitre 1, et pouvant affecter la modélisation de tout type de flamme. Afin de lever cette indétermination, deux calculs d'une flamme laminaire 1D monophasique ont donc été effectués avec CEDRE, pour les mêmes conditions de richesse globale, et de température d'injection des gaz frais que celles utilisées pour la flamme diphasique. Comme pour cette dernière, l'un des calculs a été effectué avec une résolution directe de la cinétique chimique dans CEDRE, et l'autre en utilisant la table FTC

2. Avec une chaleur latente de vaporisation du  $C_{10}H_{20}$  de  $349,5 \cdot 10^3\ \text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$  à 300 K, un ratio débit carburant sur débit total de  $4,41 \cdot 10^{-2}$  dans la flamme 1D, et en considérant une capacité calorifique constante de  $1403\ \text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$  (valeur dans les gaz brûlés à richesse  $\phi = 0,8$ ), on estime à 11 K l'écart de température dû à l'évaporation du carburant.

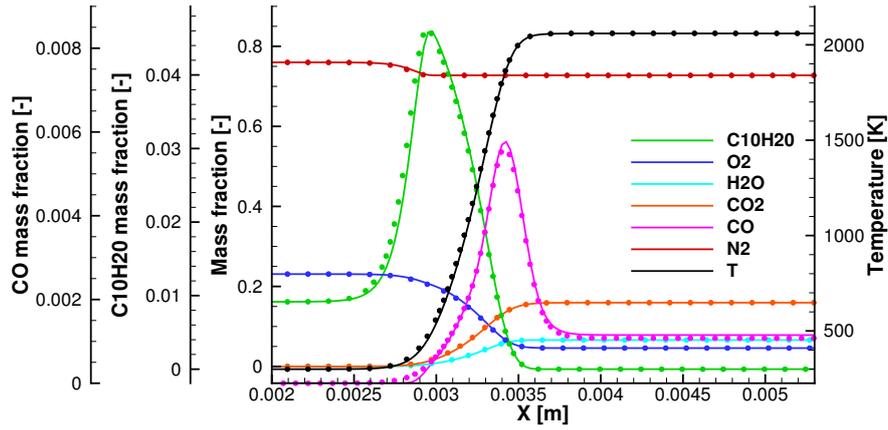


FIGURE 5.3 – Profils de température et de fractions massiques dans une flamme diphasique pour des gouttes de 5  $\mu\text{m}$  de diamètre. Cercles pleins (référence) : résolution directe de la chimie ; traits pleins : modèle FTC.

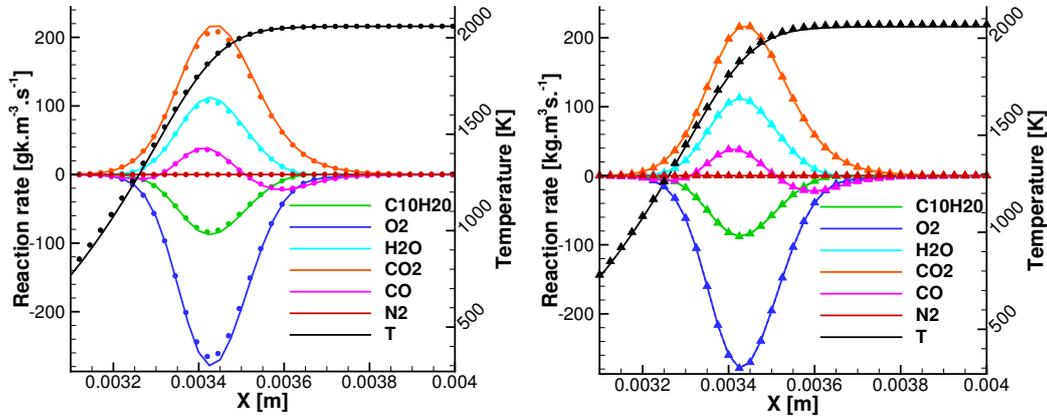


FIGURE 5.4 – Profils de température et de taux de réaction dans le cas de gouttes de 5  $\mu\text{m}$  de diamètre. Cercles pleins (référence) : résolution directe de la chimie ; traits pleins (à gauche et à droite) : modèle FTC (taux de réaction incluant les termes de relaxation) ; triangles : taux extraits de la table FTC avant application des termes de relaxation.

générée avec cette même cinétique. La table FTC utilisée pour le calcul de la flamme monophasique est la même que celle utilisée pour la calcul de la flamme diphasique. Les évolutions de la vitesse de flamme, obtenues pour la flamme monophasique avec FTC et avec une chimie directe sont comparées sur la figure 5.5. Un très bon accord entre les résultats obtenus avec ces deux modélisations est observé. Il n'y a donc pas d'erreur d'estimation de calcul du terme source dans le cas monophasique, ce qui implique que la surestimation de la vitesse de flamme observée dans le cas diphasique provient de la modélisation de la structure de flamme diphasique par FTC. Cette erreur de modélisation de la structure de flamme donnée par la table entraîne une légère surestimation du terme source dans la flamme diphasique, ce qui se traduit par la surrestimation de 2,9% de la vitesse de flamme. Comme on l'a indiqué précédemment, on considère que cette erreur de prédiction de la vitesse de flamme par FTC est acceptable. La présentation des résultats obtenus pour la flamme diphasique avec des gouttes de carburant d'un diamètre de 25  $\mu\text{m}$ , 50  $\mu\text{m}$  et 100  $\mu\text{m}$  se poursuit dans les prochaines sections.

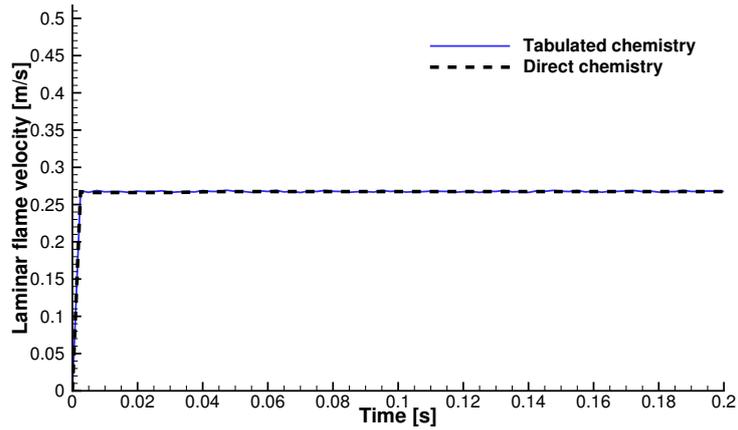


FIGURE 5.5 – Évolution temporelle de la vitesse de flamme pour une flamme monophasique évoluant dans des conditions proches de celles de la flamme diphasique étudiée. Le calcul est initialisé avec un profil de type discontinuité de contact.

### 5.2.2 Gouttes de 25 $\mu\text{m}$

Pour les gouttes de 25  $\mu\text{m}$ , l'évaporation se poursuit dans la zone de réaction, ce qui en fait un cas plus complexe que le précédent. La vitesse de flamme donnée par le modèle FTC reproduit correctement celle obtenue avec une chimie directe (figure 5.6). Les profils de fractions massique sont bien reproduits par le modèle FTC pour la majorité des espèces, sauf pour le CO, comme le montre la figure 5.7. Par ailleurs, les taux de réaction donnés par le modèle FTC sont également similaires à ceux donnés par la chimie directe comme le montre la partie gauche de la figure 5.8. Les taux de réaction directement extraits de la table FTC sont eux aussi en accord avec ceux donnés par la chimie directe, comme le montre la partie droite de la figure 5.8, ce qui signifie que les termes de relaxation du modèle FTC sont négligeables dans l'ensemble du domaine de calcul.

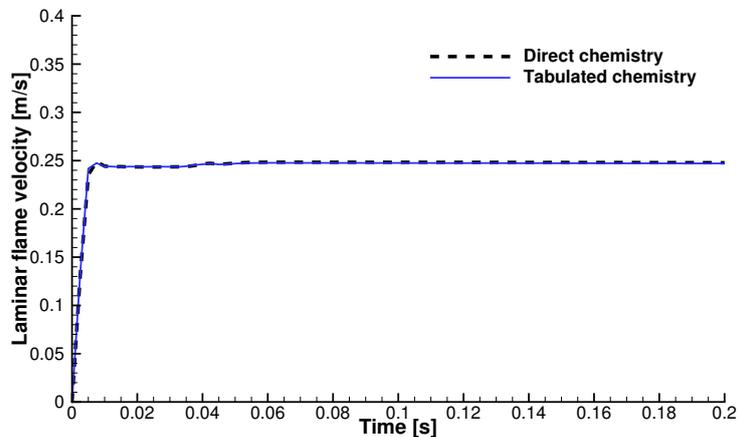


FIGURE 5.6 – Évolution de la vitesse de flamme au cours du temps pour une flamme diphasique dans le cas de gouttes de 25  $\mu\text{m}$  de diamètre. Le calcul est initialisé avec un profil de type discontinuité de contact.

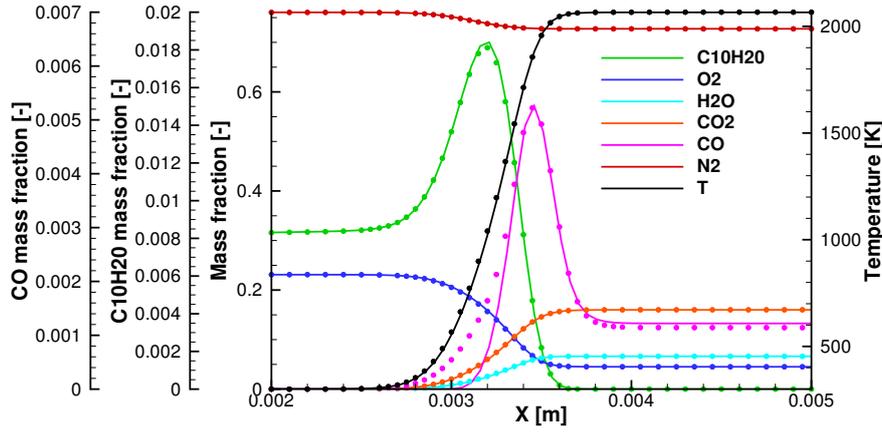


FIGURE 5.7 – Profils de température et de fractions massiques dans une flamme diphasique pour des gouttes de 25  $\mu\text{m}$  de diamètre. Cercles pleins (référence) : résolution directe de la chimie ; traits pleins : modèle FTC.

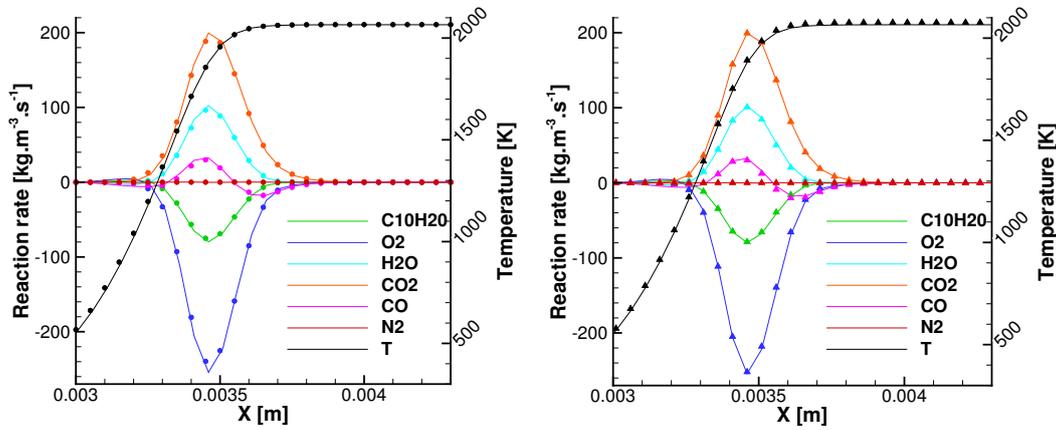


FIGURE 5.8 – Profils de température et de taux réaction pour des gouttes de 25  $\mu\text{m}$  de diamètre. Cercles pleins (référence) : résolution directe de la chimie ; traits pleins (à gauche comme à droite) : modèle FTC (taux de réaction incluant les termes de relaxation) ; triangles : taux extraits de la table FTC avant application des termes de relaxation.

### 5.2.3 Gouttes de 50 $\mu\text{m}$ et 100 $\mu\text{m}$ de diamètre

Pour des gouttes de 50  $\mu\text{m}$  et 100  $\mu\text{m}$ , l'évolution de la vitesse de flamme (figures 5.9 et 5.12) donnée par le modèle FTC est semblable à celle donnée par la chimie directe. Les profils de fractions massiques données par les modélisations FTC et directe (figures 5.10 et 5.13) sont également en très bon accord, excepté pour CO et  $\text{C}_{10}\text{H}_{20}$ , espèces pour lesquelles l'accord est un peu moins bon. Les taux de réaction donnés par le modèle FTC et par la chimie directe sont proches, ce qui est cohérent avec l'obtention d'une vitesse de flamme similaire pour les deux modèles (figures 5.11 et 5.14). Néanmoins, si l'on compare sur ces deux figures les taux de réaction extraits de la table FTC avant application du terme de relaxation avec les taux de réaction FTC incluant les termes de relaxation, on constate un écart important dans la seconde moitié de la zone de réaction. C'est donc grâce aux termes de relaxation que les taux de réaction donnés par le modèle FTC reproduisent les taux obtenus en chimie directe. C'est donc également grâce à ces termes de relaxation que l'évolution correcte de la vitesse de flamme peut être obtenue avec le modèle FTC. A l'avenir, il serait souhaitable de comprendre l'origine de l'erreur dans l'estimation des taux de réaction lorsqu'ils sont extraits de la table sans prise en compte de la relaxation car il n'est pas certain que les termes de relaxation compenseront cette erreur dans toutes les situations mettant en jeu une flamme diphasique.

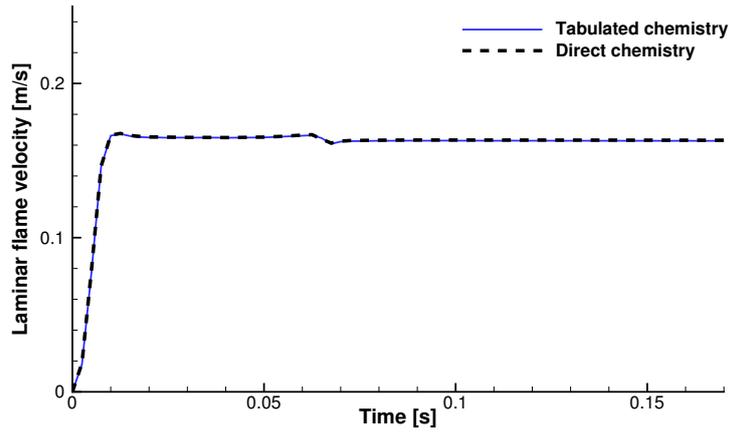


FIGURE 5.9 – Évolution de la vitesse de flamme au cours du temps pour une flamme diphasique dans le cas de gouttes de  $50\ \mu\text{m}$  de diamètre. Le calcul est initialisé avec un profil de type discontinuité de contact.

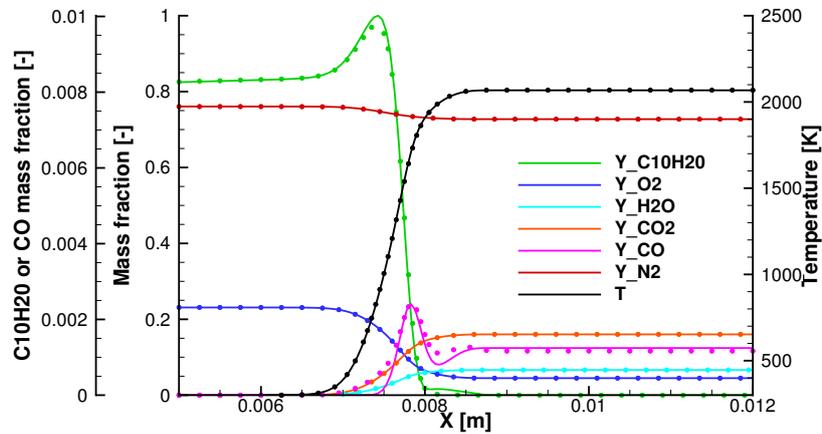


FIGURE 5.10 – Profils de température et de fractions massiques dans une flamme diphasique pour des gouttes de  $50\ \mu\text{m}$  de diamètre. Cercles pleins (référence) : résolution directe de la chimie ; traits pleins : modèle FTC.

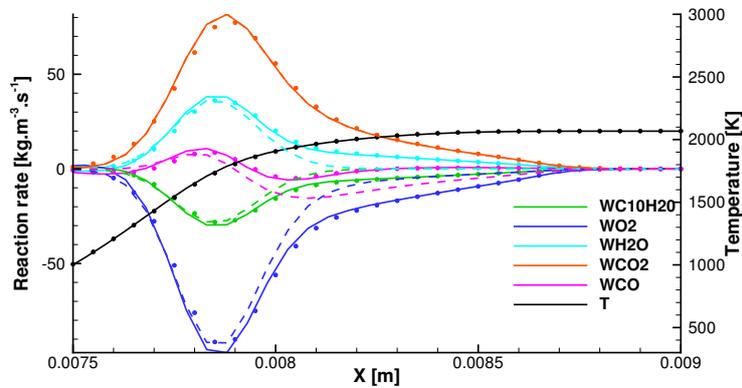


FIGURE 5.11 – Profils de température et de taux réaction dans une flamme diphasique pour des gouttes de  $50\ \mu\text{m}$  de diamètre. Cercles pleins (référence) : résolution directe de la chimie ; traits pleins : modèle FTC ; tirets : taux extraits de la table FTC avant application des termes de relaxation.

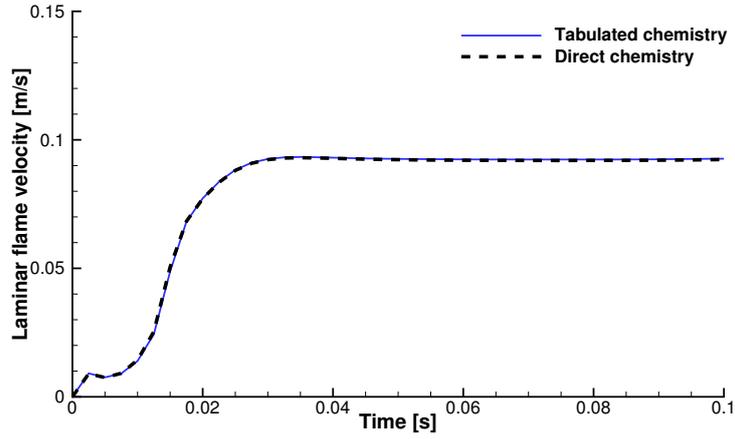


FIGURE 5.12 – Évolution de la vitesse de flamme au cours du temps pour une flamme diphasique dans le cas de gouttes de 100  $\mu\text{m}$  de diamètre. Le calcul est initialisé avec un profil de type discontinuité de contact.

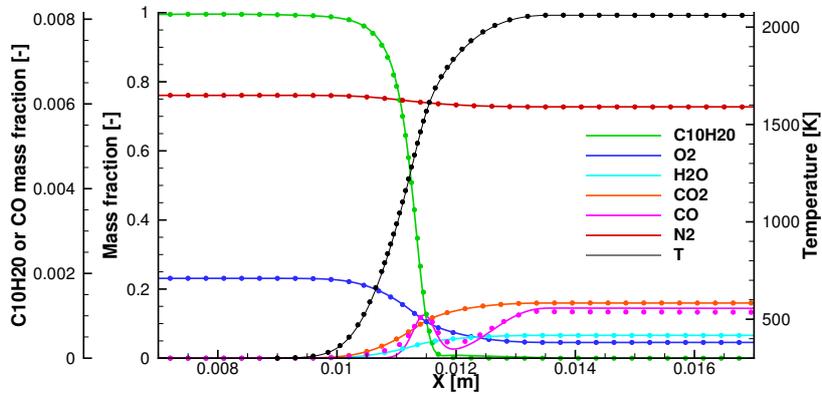


FIGURE 5.13 – Profils de température et de fractions massiques dans une flamme diphasique pour des gouttes de 100  $\mu\text{m}$  de diamètre. Symboles (référence) : résolution directe de la chimie; traits pleins : modèle FTC.

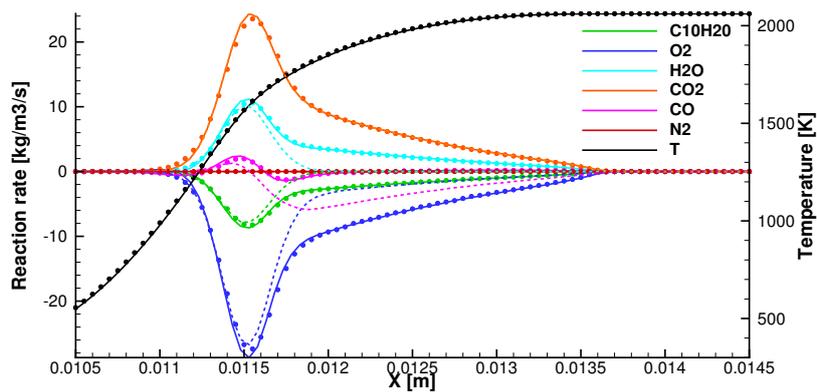


FIGURE 5.14 – Profils de température et de taux réaction dans une flamme diphasique pour des gouttes de 100  $\mu\text{m}$  de diamètre. Symboles (référence) : résolution directe de la chimie; traits pleins : modèle FTC; tirets : taux extraits de la table FTC avant application des termes de relaxation.

### 5.3 Remarques sur l'influence du temps de relaxation du modèle FTC

On a vu que la vitesse de flamme, dans le cas des gouttes de 50  $\mu\text{m}$  et 100  $\mu\text{m}$  de diamètre, était évaluée correctement du fait d'une compensation d'erreur par les termes de relaxation introduits au

chapitre 1. Compte tenu de la difficulté à évaluer ce temps de relaxation lors de la mise en donnée, il est important d'estimer la sensibilité du modèle FTC à la valeur de ce paramètre. Le calcul de la flamme 1D diphasique a donc été répété pour les gouttes de  $100\ \mu\text{m}$  de diamètre, avec le modèle FTC, pour différentes valeurs du temps de relaxation. Des valeurs supérieures à  $5.10^{-6}\ \text{s}$  ont été testées, diminuant ainsi l'effet de la relaxation à mesure que  $\tau_{relax}$  augmente. En revanche, les valeurs inférieures à  $5.10^{-6}\ \text{s}$  n'ont pas été testées car on se rapproche alors trop fortement de la valeur du pas de temps du calcul ( $1.10^{-6}\ \text{s}$ ) ce qui rend le calcul instable numériquement. Les résultats obtenus confirment qu'il y a une dépendance de la vitesse de flamme à la valeur de ce paramètre (figure 5.15). Néanmoins, on remarque que l'utilisateur bénéficie tout de même d'une marge relativement importante pour le choix du temps de relaxation. En effet, l'évolution de la vitesse de flamme est très similaire (0,1 % d'écart), pour les valeurs  $\tau_{relax} = 5.10^{-6}\ \text{s}$  et  $\tau_{relax} = 5.10^{-5}\ \text{s}$ , bien qu'il y ait un ordre de grandeur entre les deux. De plus, pour  $\tau_{relax} = 5.10^{-4}\ \text{s}$ , soit un ordre de grandeur supplémentaire, on observe une diminution de la vitesse de flamme qui se limite à 3%. Les valeurs plus élevées de  $\tau_{relax}$  conduisent à une forte sous-estimation de la vitesse de flamme. Cependant, on ne choisirait probablement pas ces valeurs au moment de la mise en donnée. En effet, celles-ci semblent grandes devant les temps caractéristiques mis en jeu dans des écoulements réactifs.

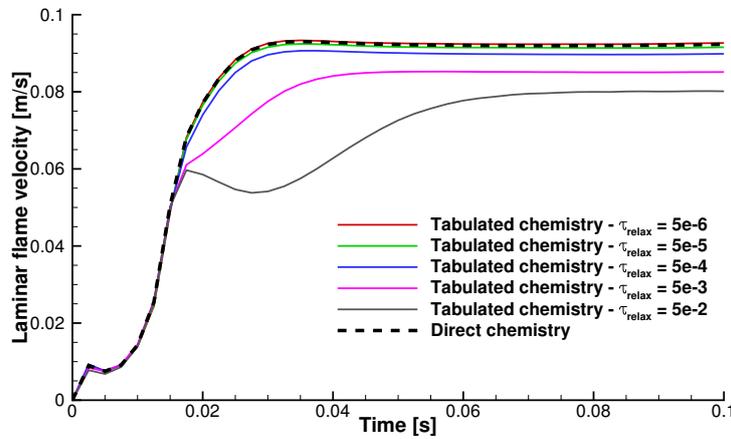


FIGURE 5.15 – Évolution de la vitesse de flamme au cours du temps pour une flamme diphasique dans le cas de gouttes de  $100\ \mu\text{m}$  de diamètre. Le calcul est initialisé avec un profil de type discontinuité de contact.

## Bilan

L'extension du modèle FTC aux flammes diphasiques a été réalisée via l'introduction d'un terme source dans l'équation de transport de  $Z$ , en faisant l'hypothèse que la table générée à partir de solutions de flammes monophasiques permet de reproduire la structure d'une flamme diphasique. Pour limiter l'occupation mémoire et éviter l'ajout de nouvelles équations, on s'est restreint aux tables à deux dimensions  $(Z, c)$  qui peuvent être générées à partir de simulations soit de flammes prémélangées, comme dans ce travail de thèse, soit de flammes de diffusion. Le modèle a été validé sur des flammes 1D diphasiques, avec une table de type prémélange. Les profils d'espèces sont globalement bien reproduits, excepté pour  $C_{10}H_{20}$  et  $CO$  pour lesquels des écarts, relativement faibles, ont été observés. La vitesse de flamme est également bien reproduite avec une surestimation maximale de 3%. Toutefois, on note que pour des diamètres de gouttes de 50 et 100  $\mu m$ , la vitesse de flamme n'est correctement reproduite que grâce aux termes de relaxation du modèle FTC, qui compensent une erreur portant sur les termes sources directement extraits de la table. Cette erreur est liée aux écarts observés sur les profils de fraction massique et rien ne permet d'affirmer qu'elle soit compensée par les termes de relaxation du modèle dans toutes les situations, notamment celles où la structure de flamme présente un caractère multi-régime (prémélange, diffusion et prémélange partiel). Pour celles-ci, des travaux de la littérature montrent que des tables à trois entrées  $(Z, c, \chi_Z)$  permettent de décrire correctement la structure de flamme. Il serait donc intéressant d'améliorer le modèle FTC pour mieux prédire la structure des flammes diphasiques. On considère cependant que ce problème est de même nature que celui de la combustion multi-régimes évoqué au chapitre 2 et qu'il doit être résolu soit par le couplage de tables, type flamme prémélangée et flamme de diffusion, via un critère de Takeno, soit par l'utilisation d'une table telle que celle à trois entrées  $(Z, \chi_Z, c)$  basée à la fois sur des flammes prémélangées, partiellement prémélangées et de diffusion. Ce travail se situe au-delà de l'objectif de cette thèse mais constitue une perspective tout à fait intéressante pour la suite. Quoi qu'il en soit, le modèle FTC dans sa version actuelle reproduit les principales caractéristiques de la flamme diphasique avec une précision suffisante pour permettre son utilisation dans un premier calcul de configuration semi-industrielle présentant une injection de carburant liquide.

## CHAPITRE 6

### Modélisation de l'interaction chimie/turbulence par une approche de type flamme épaissie adaptée au modèle FTC

Dans ce chapitre, on décrit une modélisation de l'interaction chimie-turbulence (ICT) compatible avec le modèle FTC dans le cadre d'une approche LES. Pour définir les contours de cette modélisation, on effectue une revue des modèles d'ICT utilisés avec une approche FTC, ce qui nous permet de nous orienter, pour la combustion prémélangée, vers une approche de type « flamme épaissie ». Des simulations de flammes laminaires 1D sous-résolues (c'est à dire des flammes calculées sur un maillage trop peu discrétisé spatialement pour obtenir, sans traitement particulier, un dégagement de chaleur correct dans la flamme) sont effectuées afin de tester le couplage entre FTC et le modèle de flamme épaissie. Pour ne pas altérer le calcul des flux dans l'ensemble du domaine de calcul, des adaptations de l'approche « flamme épaissie » sont effectuées, sur la base de travaux existants, afin de limiter son influence à la zone de l'écoulement où se trouve la flamme. Dans un second temps, afin de prendre en compte les fluctuations de la richesse en sous-maille dans le cas de la combustion non prémélangée, on étudie le couplage de l'approche « flamme épaissie » avec une modélisation statistique de type PDF présumée. L'approche PDF présumée était déjà disponible dans le code CEDRE utilisé dans le cadre de cette thèse, suite aux travaux de Savre [93] et Petrova [81]. Néanmoins, en marge du couplage avec l'approche « flamme épaissie », certains points de cette approche « PDF présumée » ont été rediscutés, notamment l'évaluation d'un terme lié à l'évaporation, terme qui n'apparaissait pas dans les travaux de Savre.

#### Sommaire

<b>6.1</b>	<b>Modélisation de l'interaction chimie/turbulence . . . . .</b>	<b>94</b>
6.1.1	Approches statistiques . . . . .	94
6.1.2	Approches de type flamme épaissie . . . . .	95
6.1.3	Approche flamme filtrée . . . . .	97
<b>6.2</b>	<b>Approche retenue dans CEDRE pour des calculs LES . . . . .</b>	<b>98</b>
<b>6.3</b>	<b>Régime prémélangé : adaptation de l'approche flamme épaissie pour le modèle FTC . . . . .</b>	<b>99</b>
6.3.1	Validation du couplage entre chimie tabulée et flamme épaissie, dans le cas d'un épaississement constant . . . . .	99
	Calcul de référence sans épaississement de la flamme . . . . .	99
	Calcul avec épaississement constant . . . . .	100
6.3.2	Choix d'un senseur de flamme adapté au couplage flamme épaissie/FTC . . . .	100
	Adaptation d'un senseur de flamme basé sur le taux de réaction du carburant .	101
	Test d'un senseur de flamme basé sur la variable d'avancement normalisée du modèle de chimie tabulée . . . . .	102
	Reformulation du senseur de flamme . . . . .	105
<b>6.4</b>	<b>Régimes partiellement prémélangés et de diffusion : couplage des approches statistique et de flamme épaissie . . . . .</b>	<b>107</b>
<b>Bilan</b>	<b>. . . . .</b>	<b>110</b>

## 6.1 Modélisation de l'interaction chimie/turbulence

L'approche LES a apporté des avancées significatives dans le domaine de la combustion turbulente. En effet, la résolution des grandes échelles de turbulence a permis d'améliorer la prise en compte du mélange des réactifs au sein d'un écoulement turbulent par rapport aux approches RANS. Cependant, malgré l'augmentation constante des capacités des calculateurs, le nombre de cellules des maillages utilisés dans des applications industrielles, telles que la modélisation de foyers aéronautiques, reste fortement contraint. Cela conduit à des tailles caractéristiques de maille qui sont le plus souvent grandes devant la taille caractéristique des plus petites échelles de la turbulence, mais aussi devant celle des échelles de la combustion (épaisseur thermique et réactive de front de flamme). Or, la prise en compte de l'interaction entre la turbulence en sous-maille et le front de flamme est essentielle pour la modélisation des réactions chimiques et de la dynamique de flamme (propagation, extinction,...).

Les équations résolues en LES portent sur des grandeurs filtrées. Par exemple, pour les fractions massiques, on résout l'équation suivante :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}} \right) - \frac{\partial (\overline{\rho u_i Y_k} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)}{\partial x_i} + \bar{\omega}_k, \quad (6.1)$$

où l'opérateur  $\bar{\cdot}$  désigne les grandeurs filtrées et l'opérateur  $\tilde{\cdot}$  correspond à un filtrage au sens de Favre :  $\tilde{\varphi} = \frac{\overline{\rho \varphi}}{\bar{\rho}}$ . L'opération de filtrage fait ainsi apparaître des termes nécessitant une fermeture. Le terme  $\bar{\omega}_k$  est le taux de réaction chimique filtré. C'est ce terme qui contient l'interaction chimie/turbulence. Les autres termes ne sont pas spécifiquement liés aux écoulements réactifs, mais comme ce type d'écoulement nécessite de transporter plusieurs espèces, leur fermeture va souvent de paire avec celle du terme source. Le terme  $\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}} \right)$  est souvent approximé par  $\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} D_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right)$ . Pour fermer le terme de diffusion turbulente, on utilise fréquemment une hypothèse de diffusion suivant le gradient  $(\overline{\rho u_i Y_k} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) \simeq -\bar{\rho} D_k^t \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i}$ , où  $D_k^t = \frac{\nu_t}{Sc_t}$  est le coefficient de diffusion par les échelles turbulentes de sous-maille. Néanmoins, nous allons avoir que d'autres fermetures peuvent être proposées dans la littérature.

Concernant les modèles FTC, on trouve essentiellement trois approches permettant la fermeture de l'équation (6.1), en particulier du terme  $\bar{\omega}_k$  : l'approche statistique, la modélisation de type flamme épaissie, et la modélisation de type flamme filtrée.

### 6.1.1 Approches statistiques

Les approches statistiques ont été initialement développées dans un contexte RANS puis étendues à la LES. Elles permettent d'exprimer les grandeurs moyennes/filtrées à l'aide de fonctions de densité de probabilité (PDF) [8, 40, 86] :

$$\bar{f}(x, t) = \int_0^1 \dots \int_0^1 f(\Psi_1(x, t), \dots, \Psi_2(x, t)) P(\Psi_1, \dots, \Psi_2; x, t) d\Psi_1 \dots d\Psi_2, \quad (6.2)$$

où  $f$  est un scalaire quelconque tel que la température, une fraction massique ou encore un taux de réaction.

Une première possibilité pour l'évaluation de la PDF multidimensionnelle  $P(\Psi_1, \dots, \Psi_2; x, t)$  est de résoudre son équation de transport. Néanmoins la résolution de cette équation nécessite le plus souvent de recourir à des méthodes stochastiques coûteuses en temps CPU, et on lui préfère dans le cadre de la chimie tabulée, l'utilisation de PDF présumées [28, 103]. La PDF est dans ce cas définie en fonction des premiers moments statistiques d'un nombre limité de grandeurs. Une équation est résolue pour obtenir la valeur de chacun de ces moments. La forme des PDF présumées est basée sur des hypothèses concernant la topologie de la flamme. Il est courant de présumer l'indépendance statistique des variable  $Z$  et  $c$  et d'utiliser une  $\beta$ -PDF pour définir leur densité de probabilité :

$$\bar{f}(Z, c) = \int_0^1 \int_0^1 f(Z, c) P(Z)P(c) dZ dc, \quad (6.3)$$

avec  $P(Z) = P_{\beta}^{\tilde{Z}, Z_v}(Z)$ ,  $P(c) = P_{\beta}^{\tilde{c}, c_v}(Z)$ ,  $P_{\beta}^{A,B}$  étant la fonction  $\beta$  à deux paramètres A et B [92], et  $Z_v$  et  $c_v$  étant les variances respectives de  $Z$  et  $c$ .<sup>1</sup> Les grandeurs issues de la table FTC laminaire sont intégrées suivant (6.3) pour toutes les valeurs possibles du quadruplet  $(Z, Z_v, c, c_v)$ , puis stockées dans une table FTC turbulente à quatre dimensions :  $Z, Z_v, c$  et  $c_v$ . Ainsi, par rapport à la table laminaire, seul le transport de deux variables supplémentaire  $Z_v$  et  $c_v$  est nécessaire, induisant une faible augmentation du coût de calcul. Lors de la simulation CFD, les grandeurs filtrées seront lues directement dans cette table, ce qui pour la fermeture de l'équation de transport des fractions massiques (6.1), se traduit par l'expression suivante :

$$\bar{\omega}_k = \bar{\omega}_k(\tilde{Z}, Z_v, \tilde{c}, c_v). \quad (6.4)$$

Par ailleurs, les termes de diffusion de l'équation (6.1) sont généralement fermés suivant les méthodes classiques évoquées précédemment.

Une faiblesse des modélisations à base de PDF présumées est qu'elles ne permettent pas d'évaluer correctement les taux de réaction dans des zones de l'écoulement où le maillage devient suffisamment fin pour capter le plissement de la flamme [2]. Le front de flamme quasi-laminaire est alors propagé avec une vitesse incorrecte. De plus, l'hypothèse d'indépendance statistique entre la fraction de mélange  $Z$  et la variable d'avancement normalisée  $c$  est remise en cause [43], [63]. Kuehne et al.[51] ont également montré que l'utilisation d'une  $\beta$ -PDF se justifiait pour  $Z$  mais pas pour  $c$ . D'ailleurs, certains auteurs [16, 44, 82] préfèrent utiliser une distribution de Dirac pour la PDF de  $c$ , soit  $PDF(c) = \delta(c)$ . Chrigui et al. [16, 88] considèrent que ce choix se justifie notamment dans le cas de la combustion avec injection de carburant sous forme de spray où la flamme tend vers un régime de diffusion, dans lequel la variance de  $c$  (voir chapitre 2 pour l'indexation par la variable  $c$  des tables de type flamme de diffusion) est plus faible que dans le cas d'un écoulement prémélangé, ce qui permet de la négliger. Les auteurs précisent toutefois que cette hypothèse nécessite d'être vérifiée.

### 6.1.2 Approches de type flamme épaissie

Une alternative aux méthodes statistiques est de procéder à un épaississement artificiel de la flamme, afin que celle-ci puisse être résolue sur le maillage LES, c'est à dire pour que le nombre de points dans le front de flamme soit suffisant pour reproduire correctement les caractéristiques de la flamme, telles que le dégagement de chaleur et la vitesse de propagation. On parle de modèle de flamme épaissie que l'on désigne dans la littérature sous les noms de TFLES (Thickened Flame LES) [17], ATF (Artificially Thickened Flame) [52], ou encore DTF (Dynamically Thickened Flamme) [57]. Dans ce modèle, on résout une équation de transport (ici celle de la fraction massique) dont on a modifié certains termes :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \bar{\rho} [\mathcal{F} \mathcal{E} D_k + (1 - \alpha) D_k^t] \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right\} + \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{F}} \dot{\omega}_k, \quad \mathcal{F} = 1 + \alpha (\mathcal{F}^{max} - 1). \quad (6.5)$$

Dans le cas d'un modèle de chimie tabulée, le terme source  $\dot{\omega}_k$  est extrait de la table, soit  $\dot{\omega}_k = \dot{\omega}_k^{TAB}(Z, c) + \dot{\omega}_k^{relax}$  avec la formulation du modèle FTC retenue dans cette thèse.

On a introduit dans l'équation (6.5) le facteur d'épaississement de la flamme  $\mathcal{F}$ , et une fonction d'efficacité  $\mathcal{E}$ . Le facteur d'épaississement  $\mathcal{F}$  contient la quantité  $\alpha$  dite « senseur de flamme », ainsi que le facteur d'épaississement maximum  $\mathcal{F}^{max}$ . On donne ici la définition de chacune de ces grandeurs. Les coefficients de diffusion moléculaire sont multipliés par le facteur  $\mathcal{F}$ , afin d'épaissir la flamme. Pour conserver l'intégrale du taux de réaction de chaque espèce dans cette dernière, il est alors nécessaire de diviser les taux de réaction par le même facteur  $\mathcal{F}$ . On peut montrer que cette condition (conservation de l'intégrale du terme source) est nécessaire pour conserver la vitesse de flamme lorsque la flamme est

---

1. On rappelle que la variance  $U_v$  de la variable  $U$  est définie comme  $U_v = \widetilde{U^2} = \widetilde{U}^2 - 2\widetilde{U}^2 - \widetilde{U}^2$ . Dans le cadre d'une moyenne statistique classique, comme utilisée en RANS, cette égalité peut s'écrire  $U_v = \widetilde{U}^2 - \widetilde{U}^2$ . L'opérateur de filtrage utilisé en LES ne possède pas toutes les propriétés de la moyenne statistique, mais en pratique, on définit tout de même la variance  $U_v$  comme étant égale à  $\widetilde{U}^2 - \widetilde{U}^2$  par analogie avec l'approche RANS, ce qui constitue un abus de langage.

épaissie. Le facteur d'épaississement maximum  $\mathcal{F}^{max}$  est en général défini comme  $\mathcal{F}^{max} = \frac{\Delta}{\delta_l^0}$ , où  $\Delta$  est la taille du filtre LES et  $\delta_l^0$  l'épaisseur thermique de la flamme laminaire. L'introduction du facteur  $\mathcal{F}$  dans le flux de diffusion a l'inconvénient de modifier le mélange des espèces dans tout l'écoulement, mais aussi la diffusion thermique, notamment les flux pariétaux. Pour remédier à cela, il est proposé [57] d'utiliser un senseur de flamme<sup>2</sup>  $\alpha$ , quantité variant entre 0 hors de la flamme et 1 dans la flamme, de façon à annuler l'effet de l'épaississement hors de la flamme.

L'épaississement artificiel de la flamme permet de résoudre cette dernière sur maillage grossier, lorsqu'elle n'est pas plissée. Toutefois, il faut noter que les flammes turbulentes sont plissées et qu'après épaississement, le plissement d'une telle flamme est en général inférieur au plissement réel de celle-ci. Autrement dit, la surface de la flamme épaissie capturée par le maillage peut être sous-estimée, ce qui conduit à sous-estimer également l'intégrale des taux de réaction et des flux de diffusion moléculaire. On introduit donc une fonction d'efficacité  $\mathcal{E}$ , qui peut être vue comme le rapport entre la surface réelle de la flamme et la surface de flamme capturée par le maillage. De nombreux travaux portent sur cette fonction d'efficacité. Deux fonctions souvent utilisées sont celles de Colin et al. [17] et Charlette et al. [14]. Celles-ci sont basées sur l'établissement de corrélations obtenues à partir de simulations DNS d'interaction flamme-tourbillons. Ces corrélations ont pour but de relier le plissement de la flamme à des variables dérivées de grandeurs résolues en LES (telles que la vitesse fluctuante  $u'$ ), ou calculées à priori (telles que la vitesse de flamme laminaire  $S_l^0$ ). Ainsi, Colin et al. proposent de modéliser la fonction d'efficacité comme :

$$\mathcal{E} = \frac{\Xi(\delta_L^0)}{\Xi(F\delta_L^0)}, \quad (6.6)$$

où  $\Xi(\delta_L^0)$  est une mesure du plissement de la flamme à l'échelle de sous-maille (surface de la flamme en sous-maille divisée par la surface de la flamme projetée dans la direction de propagation), tandis que  $\Xi(F\delta_L^0)$  est une mesure du plissement de la flamme épaissie. Comme indiqué par Charlette et al. [14],  $\Xi(F\delta_L^0)$  vaut 1 en pratique lorsqu'on impose  $\mathcal{F} = \frac{\Delta}{\delta_l^0}$ . La mesure  $\Xi(\delta_L^0)$  du plissement est donnée par :

$$\Xi(\delta_L^0) = 1 + a\Gamma \left( \frac{\Delta}{\delta_L^0}, \frac{u'}{S_L^0} \right) \frac{u'}{S_L^0} \quad (6.7)$$

où  $\Delta$  est la taille du filtre LES,  $\delta_L^0$  et  $S_L^0$  sont les épaisseur et vitesse de flamme laminaire. Les fonctions  $\Gamma$  et  $a$ , déterminées de façon empirique, sont les suivantes :

$$\Gamma \left( \frac{\Delta}{\delta_L^0}, \frac{u'}{S_L^0} \right) = 0,75 \exp \left[ -\frac{1,2}{(u'/S_L^0)^{0,3}} \right] \left( \frac{\Delta}{\delta_L^0} \right)^{2/3}, \quad (6.8)$$

$$a = b \frac{2\ln(2)}{3c_{ms}(Re_t^{1/2} - 1)}, \quad c_{ms} = 0,28, \quad Re_t = \frac{u'l_t}{\nu}, \quad b = 1, \quad (6.9)$$

où  $l_t$  est l'échelle intégrale de la turbulence. Charlette et al. proposent d'utiliser la loi suivante :

$$\mathcal{E} = \Xi(\delta_L^0) = \left[ 1 + \min \left( \frac{\Delta}{\delta_L^0}, \Gamma_C \frac{u'}{S_L^0} \right) \right]^\beta \quad (6.10)$$

Tout comme la fonction  $\Gamma$  proposée par Colin, la fonction  $\Gamma_C$  est déterminée de façon empirique (voir [14]) à partir des quantités  $\Delta$ ,  $\delta_L^0$ ,  $u'$  et  $S_L^0$ . La valeur de 0,5 est proposée pour l'exposant  $\beta$ , mais celui-ci peut également être déterminé de façon dynamique à partir des grandeurs résolues en LES [15] [107].

Si l'on compare les équations (6.1) et (6.5), on remarque que dans la zone de flamme, où  $\alpha = 1$ , le terme de diffusion moléculaire filtré et le terme de diffusion turbulente sont modélisés de la façon suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho D_k} \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial (\overline{\rho u_i \bar{Y}_k} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} \mathcal{F} \mathcal{E} D_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right). \quad (6.11)$$

2. Nous reviendrons plus en détail sur l'expression de ce terme dans la section 6.3.2.

Hors de la flamme où  $\mathcal{EF} = 1$  et  $\alpha = 0$ , on utilise les fermetures classiques, ce qui donne :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}} \right) - \frac{\partial (\overline{\rho u_i Y_k} - \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{Y}_k})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho} (D_k + D_k^t) \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right). \quad (6.12)$$

Enfin, le terme source chimique filtré s'écrit sous la forme :

$$\overline{\omega}_k = \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{F}} \hat{\omega}_k^{TAB}(Z, c). \quad (6.13)$$

On remarque que l'approche « flamme épaissie » ne nécessite pas d'augmenter la dimension de la table FTC.

### 6.1.3 Approche flamme filtrée

Fiorina et al. [29] proposent une autre approche pour prendre en compte l'interaction chimie-turbulence dans le cadre d'un modèle FTC : l'approche dite de flamme filtrée. Cela peut être vu comme une variante de l'approche « flamme épaissie », bien que reposant sur un filtre similaire à celui de la LES. On retrouvera donc des similitudes avec le modèle de flamme épaissie, notamment concernant le recours à une fonction d'efficacité pour modéliser le plissement de sous-maille. La méthode consiste à générer une table de grandeurs filtrées à partir de la table FTC laminaire. Les grandeurs filtrées  $\tilde{\phi}$  sont obtenues par convolution de chaque variable  $\phi$  de la table laminaire avec un filtre  $F_\Delta$  :

$$\overline{\rho \tilde{\phi}} = \iiint \rho \phi(\mathbf{x}') F_\Delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (6.14)$$

où  $\mathbf{x}$  est la position dans le domaine de calcul. L'intégration se fait en principe sur tout le domaine de calcul mais la fonction filtre  $F_\Delta$  est en général non-nulle sur un espace très limité autour de la position considérée. Le modèle baptisé F-TACLES (Filtered TABulated Chemistry for LES) a été validé avec un filtre gaussien classique :

$$F_\Delta(\mathbf{x}) = \left( \frac{6}{\pi \Delta^2} \right)^{1/2} \exp \left( -\frac{6\mathbf{x}^2}{\Delta^2} \right) \quad (6.15)$$

où  $\Delta$  est l'échelle du filtre. On peut éventuellement faire une table prenant en compte différentes tailles de filtre, ce qui ajoute une dimension à la table.

Les grandeurs filtrées au sens de l'équation (6.14) (fractions massiques, termes source chimiques, propriété du mélange pour une approche FTC directe, ...) sont donc extraites de la table et directement utilisées dans les équations résolues. Ainsi, pour l'équation de transport de la fraction massique de l'espèce  $k$ , on a :

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{Y}_k}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho} \alpha_k(\tilde{Z}, \tilde{c}, \Delta) D_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right) + \Omega_k(\tilde{Z}, \tilde{c}, \Delta) + \overline{\omega}_k(\tilde{Z}, \tilde{c}, \Delta). \quad (6.16)$$

où  $\overline{\omega}_k(\tilde{Z}, \tilde{c}, \Delta)$  est le terme source chimique filtré selon (6.14) et  $\alpha_k(\tilde{Z}, \tilde{c}, \Delta)$  est un terme correcteur pour le flux de diffusion moléculaire filtré, pris également dans la table et défini ainsi :

$$\alpha_k = \frac{\overline{\rho D_k \nabla \tilde{c}}}{\overline{\rho D \nabla \tilde{c}}}. \quad (6.17)$$

Le terme  $\Omega_k(\tilde{Z}, \tilde{c}, \Delta)$  est la divergence du flux turbulent :

$$\Omega_k = -\nabla \cdot (\overline{\rho u_i Y_k} - \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}). \quad (6.18)$$

Ce dernier est exprimé à partir des solutions de flammes laminaires utilisées pour générer la table, en négligeant le plissement de la flamme turbulente :

$$\Omega_k(\tilde{Z}, \tilde{c}, \Delta) = \overline{\rho_0(Z) S_L^0(Z) \nabla \cdot \tilde{Y}_k} - \overline{\rho_0(Z) S_L^0(Z) \nabla \cdot Y_k}, \quad (6.19)$$

où  $\rho_0$  est la masse volumique des gaz frais.

Le modèle F-TACLES permet de reproduire la propagation de la flamme laminaire filtrée à la bonne vitesse sur un maillage grossier comme sur un maillage fin. En revanche, comme pour les modèles de flamme épaissie, il est nécessaire d'utiliser une fonction d'efficacité pour modéliser le plissement en sous-maille. Quoi qu'il en soit, outre le fait qu'il soit consistant avec la LES, le modèle F-TACLES présente l'avantage d'une augmentation moindre de l'épaisseur thermique du front de flamme. Cela induit une augmentation de la fréquence de coupure du filtre [2], et permet ainsi de mieux capter la dynamique de la flamme. Enfin, signalons que les auteurs couplent l'approche flamme filtrée avec l'approche PDF présumée pour prendre en compte la variance de  $Z$  en sous-maille. Ils utilisent donc une table FTC turbulente à quatre entrées ( $\tilde{Z}, Z_v, \tilde{c}, \Delta$ ).

## 6.2 Approche retenue dans CEDRE pour des calculs LES

Pour des raisons pratiques, c'est l'approche de flamme épaissie qui a été retenue dans un premier temps pour modéliser l'interaction chimie-turbulence. Celle-ci présente quelques faiblesses théoriques par rapport à F-TACLES. Cependant, elle présente l'avantage d'avoir été déjà introduite dans le code CEDRE pour la résolution directe de la chimie (c'est à dire avec calcul direct des taux de réaction à partir d'une cinétique chimique), et elle permet d'obtenir une propagation correcte de la flamme dans les zones où celle-ci est suffisamment résolue par le maillage. Néanmoins, la version du modèle de flamme épaissie présente dans CEDRE n'a pas été développée pour une utilisation avec un modèle type FTC et nécessite donc quelques adaptations, avant validation.

L'utilisation conjointe de la flamme épaissie avec le modèle de chimie tabulée ne présente pas de différence majeure par rapport à son utilisation avec la résolution directe d'une cinétique chimique. Néanmoins trois points doivent retenir notre attention :

- Les expressions (6.6) et (6.10) pour la mesure du plissement  $\Xi(\delta_L^0)$  intervenant dans le calcul de la fonction d'efficacité  $\mathcal{E}$  (6.6) et (6.10) sont basées sur une épaisseur de flamme laminaire  $\delta_l^0$  et une vitesse de flamme laminaire  $S_l^0$ . Dans l'utilisation classique du modèle (i.e. hors chimie tabulée), ces paramètres doivent être fournis par l'utilisateur sous forme de constantes. Ils ne peuvent donc pas tenir compte d'une richesse variable au sein de l'écoulement, et nécessitent d'être calculés au préalable. Dans le cas d'une chimie tabulée, ces deux paramètres peuvent être directement extraits de la table (hormis pour une table de type flamme de diffusion, on reviendra sur ce point dans la section 6.4). Il sont ainsi fonction de la richesse locale de l'écoulement puisque la fraction de mélange est une des entrées de la table, et la mise en donnée est simplifiée pour l'utilisateur.
- Le senseur de flamme a été initialement formulé [57] pour des cinétiques chimiques réduites. Néanmoins une autre forme de ce senseur a été utilisée dans [52] pour une chimie tabulée. De plus, il a également été montré que l'utilisation d'un senseur de flamme permettait de diminuer l'épaississement dans la zone de préchauffage de la flamme [52], ce qui pouvait améliorer la modélisation de l'interaction de la flamme avec les structures turbulentes. Dans le cadre des travaux sur le modèle F-TACLES [1] il a été montré que, dans le cas d'une flamme filtrée, l'augmentation de l'épaisseur thermique de flamme est plus faible que l'augmentation de l'épaisseur de réaction de la flamme, conduisant à une meilleure modélisation de la réponse dynamique d'une flamme pulsée qu'avec un modèle TFLES avec épaississement constant. Dans les deux cas (flamme épaissie avec senseur, et flamme filtrée), limiter l'épaississement thermique est une manière d'améliorer l'interaction de la flamme avec l'écoulement. Pour le modèle de flamme épaissie utilisé dans ce travail, le choix du senseur aura donc un impact important sur la qualité des résultats de simulation.
- Sans chimie tabulée, l'épaississement de la flamme ne permet pas de prendre en compte la variance de la richesse en sous-maille. L'utilisation d'une chimie tabulée permet de lever cette limitation. En effet, il est tout à fait possible de convoluer les quantités à stocker dans la table avec une densité de probabilité présumée de la fraction de mélange  $Z$ , comme cela est fait pour le modèle F-TACLES [1]. Ce point sera abordé en 6.4. Pour l'approche « flamme épaissie », la chimie tabulée devrait donc permettre d'améliorer la prise en compte de l'interaction chimie/turbulence par rapport à ce que permet son utilisation avec une cinétique réduite.

## 6.3 Régime prémélangé : adaptation de l’approche flamme épaissie pour le modèle FTC

Dans un premier temps, on s’intéresse à la validation de l’approche flamme épaissie pour le modèle FTC dans le cas des écoulements prémélangés. Pour cela, on choisit d’étudier un cas de flamme laminaire monodimensionnelle sous-résolue. Ce cas élémentaire permet de vérifier que l’on respecte une propriété essentielle du modèle, la conservation de la vitesse de propagation de la flamme. On compare donc les résultats de calcul obtenus l’un, sans épaississement, sur un maillage suffisamment fin pour résoudre correctement la flamme, et l’autre avec épaississement sur un maillage déraffiné. Puisque le senseur de flamme pilote la zone d’épaississement, et qu’il a ainsi un effet direct sur l’interaction flamme-tourbillon, deux étapes ont été considérées pour le travail de validation. D’abord, le modèle est validé pour un épaississement constant, ne faisant pas intervenir le senseur de flamme. Puis, la formulation du senseur de flamme est étudiée, et la validation est poursuivie en laissant cette fois le senseur de flamme contrôler l’épaississement. La configuration retenue pour cette validation est une flamme  $C_{10}H_{22}$ /air stœchiométrique, à une pression de 19,5 bar et une température des gaz frais de 728 K. Ces conditions ont été retenues car elles sont représentatives des conditions rencontrées dans les foyers aéronautiques (ex : configuration TLC en régime de montée). Le carburant est injecté sous forme liquide dans les foyers, mais ce n’est pas l’objet de cette validation, pour laquelle le carburant est donc injecté sous forme gazeuse et prémélangé avec l’air. La cinétique utilisée pour générer la table est celle proposée par Luche [60].

### 6.3.1 Validation du couplage entre chimie tabulée et flamme épaissie, dans le cas d’un épaississement constant

#### Calcul de référence sans épaississement de la flamme

Deux calculs ont été effectués pour obtenir la solution de référence avec le code CEDRE. Ces deux calculs diffèrent seulement par le nombre de points dans le front de flamme,  $n = 5$  pour l’un et  $n = 10$  pour l’autre. La taille de maille est directement fonction de ce nombre de points ( $\Delta = \frac{\delta_l^0}{n}$ ). Pour dimensionner le maillage, l’épaisseur de flamme  $\delta_l^0$  est extraite de la table générée avec Cantera. On voit sur la figure 6.1 que la vitesse de flamme obtenue avec 5 points dans le front de flamme ( $n = 5$ ) est très fluctuante (variation relative de 28%). Avec  $n = 10$  la fluctuation est beaucoup plus faible (variation relative de 3%). La solution comportant 10 points dans le front de flamme est donc retenue. On remarque que la vitesse de flamme obtenue est légèrement supérieure (de 3%) à la vitesse calculée par Cantera. Ceci est très certainement dû aux erreurs de calcul de la température liées au remplacement d’espèces non transportées par de l’azote (voir chapitre 1). Néanmoins, cela n’a pas d’incidence sur les tests effectués ci-après, puisque l’on compare entre elles des solutions obtenues avec CEDRE dans lesquelles on transporte les mêmes espèces.

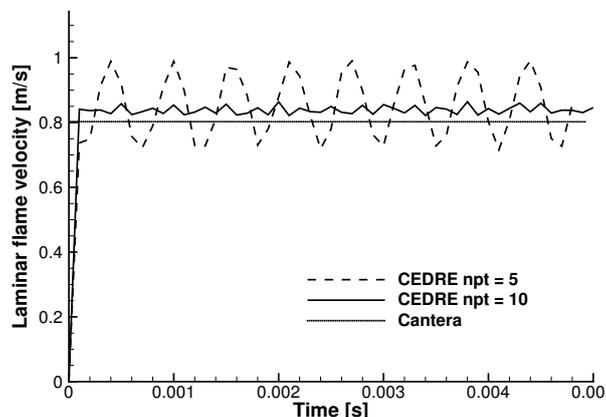


FIGURE 6.1 – Évolution de la vitesse de flamme laminaire obtenue avec Cantera (Référence), et avec CEDRE pour des maillages de 5 et 10 points dans le front de flamme, sans épaississement.

## Calcul avec épaisseur constant

Le calcul avec épaisseur constant a été réalisé pour une valeur typique de  $\mathcal{F}$  égale à 40. La taille des mailles a été augmentée également d'un facteur 40. Sachant que la taille de maille initiale était telle qu'il y avait 10 mailles à l'intérieur du front de flamme, la taille de maille après épaisseur correspond à quatre fois l'épaisseur initiale de flamme. La figure 6.2 montre que la vitesse de flamme obtenue est comparable à celle obtenue sur maillage fin sans épaisseur. On note que la fluctuation de la vitesse de flamme a quasiment disparu, probablement du fait d'un filtrage des instabilités d'origine numérique par le maillage.

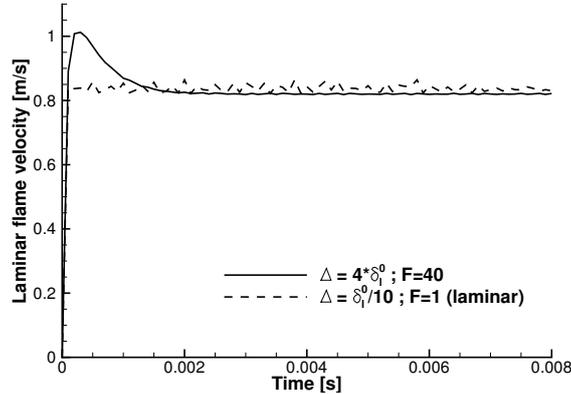


FIGURE 6.2 – Comparaison de la vitesse de flamme obtenue sur un maillage de pas  $40\frac{\delta_l}{10}$  avec un épaisseur  $\mathcal{F} = 40$ , et sur un maillage de pas  $\frac{\delta_l}{10}$  sans épaisseur (ou  $\mathcal{F} = 1$ ).

Ces premiers tests permettent de valider le couplage de l'approche flamme épaissie avec le modèle FTC, en l'absence de l'utilisation du senseur de flamme, c'est à dire quand on force à 1 la valeur du paramètre  $\alpha$  intervenant dans l'équation (6.5), quelle que soit la position dans le domaine de calcul. On s'intéresse dans la suite au choix et à la validation d'une formulation de ce senseur.

### 6.3.2 Choix d'un senseur de flamme adapté au couplage flamme épaissie/FTC

On a vu précédemment que, pour ne pas modifier la diffusion hors de la flamme, un senseur de flamme est utilisé dans l'approche flamme épaissie. Le senseur proposé initialement par Légier et al. [57] est formulé à l'aide d'un taux de pseudo-réaction proche de la loi d'Arrhenius :

$$\Omega = Y_F^{\nu_F} Y_O^{\nu_O} \exp\left(-\Gamma \frac{T_a}{T}\right), \quad (6.20)$$

où  $Y_F$  et  $Y_O$  sont respectivement la fraction massique de carburant et celle de d'oxydant,  $T_a$  est la température d'activation,  $\nu_F$  et  $\nu_O$  sont les exposants de concentration du carburant et de l'oxydant, et enfin  $\Gamma$  une constante du modèle permettant d'ajuster cette température d'activation pour élargir l'effet du senseur. Un taux de réaction maximum  $\Omega_{max}$  peut être évalué pour toute flamme laminaire à richesse bien déterminée. A partir de  $\Omega_{max}$ , on peut exprimer le paramètre  $\alpha$  de l'équation (6.5), jouant le rôle de senseur de flamme, sous la forme :

$$\alpha = \tanh\left(\beta \frac{\Omega}{\Omega_{max}}\right), \quad (6.21)$$

où  $\beta$  est une autre constante du modèle permettant d'ajuster la transition entre les zones épaissies et non épaissies.

On peut objecter que la validité de l'expression (6.21) pour  $\alpha$  est limitée du fait qu'elle a été établie à l'aide d'une pseudo-cinétique à une étape. Dans le cas d'une cinétique chimique à plusieurs étapes, il peut être délicat de déterminer des paramètres  $T_a$ ,  $\nu_F$  et  $\nu_O$  représentatifs du comportement de la cinétique à plusieurs étapes. En effet, toutes les réactions d'une cinétique complexe ne s'activent pas dans la même zone de la flamme et cela doit être pris en considération. Évidemment, pour l'approche

Cas test	Température des gaz frais	Pression	Complexité de la cinétique	Nombre de points dans le front de flamme	Épaissement maximum
KERO_LUCHE	728 K	19,5 bar	91 espèces	10	40
2S_KERO_BFER	473 K	1 bar	6 espèces	5	20

TABLE 6.1 – Principales caractéristiques des configurations de flamme laminaire retenues pour les tests de flamme épaissie

FTC, le senseur n’aura d’effet que sur les espèces transportées. Néanmoins, on peut voir sur la figure 6.3 que même ces espèces principales peuvent avoir des épaisseurs réactionnelles différentes. Pour les mêmes raisons, si l’on souhaite représenter un carburant par plusieurs composants, ce qui permet d’avoir une meilleure représentation d’un carburant réel, les paramètres pourront être difficiles à choisir. Enfin, le taux de réaction maximum  $\Omega_{max}$  étant défini à une richesse fixée, le senseur n’aura pas la même sensibilité dans les zones plus ou moins riches de l’écoulement.

Dans [52], on propose une alternative à la formule (6.21) : le senseur est ici basé sur la variable d’avancement normalisée  $c$  du modèle de chimie tabulée :

$$\alpha = 16[c(1 - c)]^2. \quad (6.22)$$

Cette formulation est intéressante puisqu’elle ne présente pas les limitations évoquées précédemment, étant indépendante de la cinétique et de la formulation du carburant. De plus, d’un point de vue utilisateur, ce senseur de flamme ne contient pas de constante dont la valeur est à déterminer.

Dans ce qui suit, différentes formulations du senseur de flamme sont testées. Pour cela, on reprend le cas test de la flamme laminaire 1D prémélangée, à 19,5 bar et 728 K pour les gaz frais, avec la cinétique détaillée proposée par Luche. Néanmoins, comme on vient de l’évoquer, le senseur donné par (6.21) a été formulé pour des cinétiques mono-étape. On utilise donc dans la suite un second cas test basé sur la cinétique 2S\_KERO\_BFER<sup>3</sup>[31]. Ainsi, le problème des épaisseurs réactives pouvant être différentes selon les espèces est déconnecté de ce second cas test. Cette deuxième configuration de flamme prémélangée concerne un mélange stœchiométrique  $C_{10}H_{20}$ /air à 473 K et 1 bar. Ces conditions sont celles utilisées par Franzelli et al. [31] pour valider la cinétique 2S\_KERO\_BFER. Pour ce cas, un nombre de 5 cellules dans le front de flamme a été suffisant pour obtenir une vitesse de flamme stable, ce qui correspond à un épaississement maximum  $\mathcal{F}^{max} = 20$  pour une taille de maille de  $4 \times \delta_l^0$ . Dans la suite, « KERO\_LUCHE » fera référence à la configuration avec cinétique détaillée et « 2S\_KERO\_BFER » fera référence à la configuration avec cinétique réduite. Le tableau 6.1 récapitule les caractéristiques principales des deux configurations. Afin d’analyser l’effet du senseur de flamme, on comparera les résultats issus de simulations avec senseur de flamme à ceux obtenus avec un épaississement constant.

### Adaptation d’un senseur de flamme basé sur le taux de réaction du carburant

Comme indiqué précédemment, le choix des paramètres de la formulation donnée par l’équation (6.21) peut être délicat pour une chimie détaillée. On a donc décidé de modifier cette formulation pour l’adapter à l’approche FTC, tout en gardant pour  $\alpha$  une forme basée sur le taux de réaction du carburant. On remplace ainsi le pseudo taux de réaction  $\Omega$  par le taux de réaction tabulé du carburant  $\dot{\omega}_F(c, Z)$ . On exprime ainsi la quantité  $\alpha$  de la façon suivante :

$$\alpha = \tanh \left( \beta \frac{\dot{\omega}_F(c, Z)}{\dot{\omega}_F^{max}(Z)} \right), \quad (6.23)$$

3. Cette cinétique comporte deux étapes, mais on a constaté que la zone de réaction du CO est pratiquement confondue avec celle du carburant. Le modèle TFLES a déjà été utilisé avec succès avec cette cinétique.

où  $\dot{\omega}_F^{max}(Z)$  est le maximum du taux de réaction du carburant à  $Z$  fixé :  $\max_c[\dot{\omega}_F(c, Z = Z)]$  où  $Z$  est la fraction de mélange dans la flamme. Cette version du senseur s'adapte naturellement à la richesse locale de l'écoulement puisque  $\max_c(\dot{\omega}_F)$  est fonction de la richesse (on rappelle que la fraction de mélange est directement fonction de la richesse). Ce n'est pas le cas de la formulation basée sur  $\Omega^{max}$ , dont les paramètres sont déterminés pour une unique richesse par l'utilisateur. De plus, pour traiter les carburants multicomposants, on choisit de définir  $\dot{\omega}_F$  comme :

$$\dot{\omega}_F = \sum_1^{n_f} |\dot{\omega}_f| \quad (6.24)$$

où  $n_f$  est le nombre de composants du carburant, et  $\dot{\omega}_f$  est le taux de réaction tabulé de chacun de ces composants.

Un premier test sur maillage fin nous montre (figure 6.3) que ce senseur, appliqué à une cinétique détaillée, n'est pas actif dans la zone de réaction de toutes les espèces. En particulier, il n'est pas actif dans la zone de réaction du  $\text{CO}_2$ .

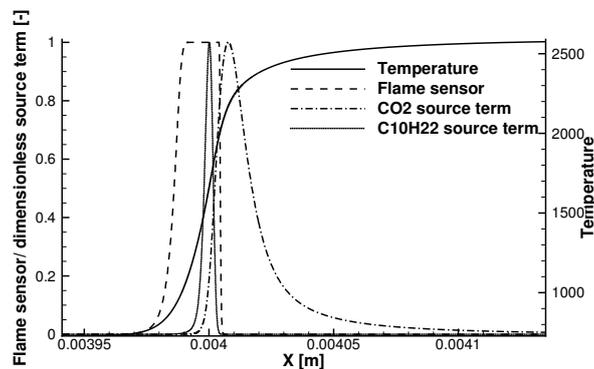


FIGURE 6.3 – Évolution du senseur  $\alpha$  (eq. 6.23) le long de la flamme laminaire obtenue avec Cantera

Les résultats obtenus sur les configurations KERO\_LUCHE et 2S\_KERO\_BFER sont présentés sur la figure 6.4. Les évolutions au cours du temps de la vitesse de flamme obtenues avec un épaississement local ou constant sont comparées, pour chaque configuration. Sur cette même figure, les profils de température et de taux de réaction du  $\text{CO}_2$  sont comparés, et l'évolution du senseur le long du domaine est également représentée.

Une valeur de 500 a été choisie pour le paramètre  $\beta$ , ce qui revient à saturer le senseur à 1 quand  $\dot{\omega}_F(c, Z)$  atteint 0,2% de  $\dot{\omega}_F^{max}(Z)$ . On observe que dans le cas 2S\_KERO\_BFER, la vitesse de flamme obtenue avec épaississement local est proche de celle obtenue avec épaississement constant, mais reste instable. La cause de cette instabilité n'est pas déterminée. Dans le cas KERO\_LUCHE, la vitesse de flamme est surestimée (+8,4%) en plus d'être instable. En regardant l'évolution de taux de réaction du  $\text{CO}_2$  (partie gauche de la figure 6.4), on constate que ce dernier, dans le cas KERO\_LUCHE, réagit en dehors de la zone où le senseur est actif, d'où un terme source bien plus élevé qu'avec un épaississement  $\mathcal{F}$  constant. *Remarque : seul le taux de réaction du  $\text{CO}_2$  est présenté, mais l'effet est le même pour d'autres espèces comme  $\text{CO}$  ou  $\text{H}_2\text{O}$ .*

Des tests supplémentaires ont été effectués dans lesquels on propose d'autres formulations de la quantité  $\alpha$ , toujours basées sur les taux de réaction, pour détecter la flamme (voir annexe G). Néanmoins, aucun de ces tests n'a donné de résultat satisfaisant. Par conséquent, on élimine les senseurs de flamme basés sur des taux de réaction pour appliquer l'approche « flamme épaissie » avec le modèle FTC. En effet, cela ne permet pas d'épaissir correctement l'ensemble de la zone réactive de la flamme, du fait des variations des épaisseurs réactives rencontrées avec une chimie multi-étapes.

### Test d'un senseur de flamme basé sur la variable d'avancement normalisée du modèle de chimie tabulée

La formulation du senseur de flamme basée sur la variable d'avancement normalisée du modèle de chimie tabulée donnée par l'équation (6.22) et proposée dans [52] a été étudiée. Un test sur la flamme

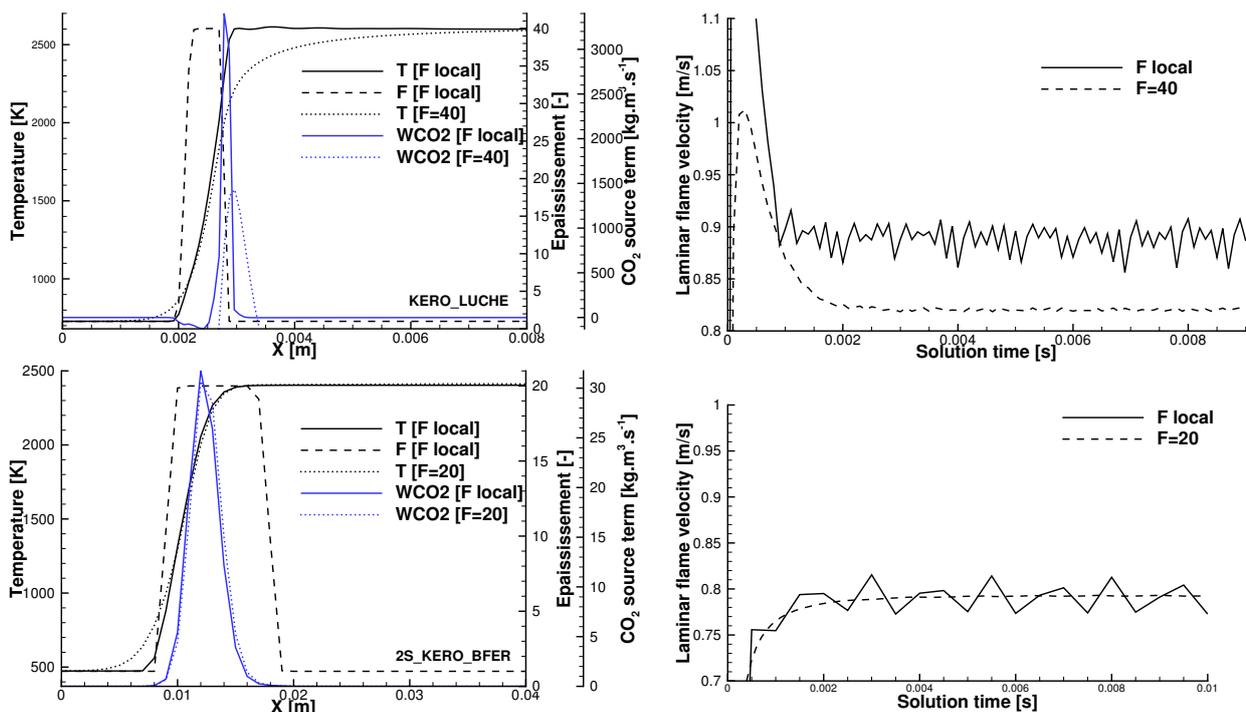


FIGURE 6.4 – Comparaison entre épaisseur local (basé sur le taux de réaction du carburant) et épaisseur constant sur un flamme laminaire prémélangée 1D. En haut : configuration KERO\_LUCHE. En bas : configuration 2S\_KERO\_BFER.

bien résolue obtenue avec Cantera a été effectué pour la configuration KERO\_LUCHE (figure 6.5). Ce test montre que la zone où la quantité  $\alpha$  est maximale est beaucoup moins large qu'avec le senseur basé sur le taux de réaction. En revanche, la valeur de  $\alpha$  est non nulle dans la zone de réaction du CO<sub>2</sub>, même si la valeur reste faible ( $\alpha < 0,25$ ) et ne garantit pas d'obtenir un épaisseur suffisant dans cette zone. Comme précédemment, le senseur a également été testé sur la configuration 2S\_KERO\_BFER.

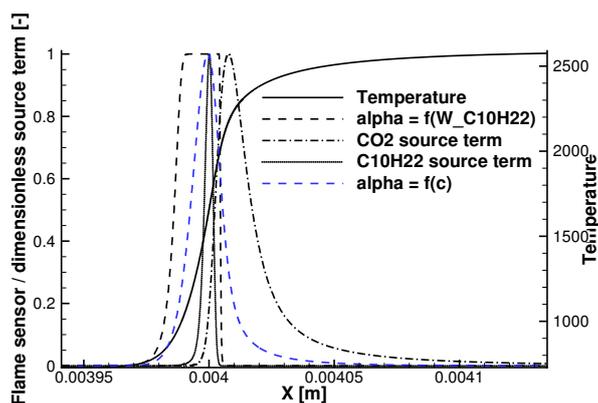


FIGURE 6.5 – Évolution du senseur (eq.6.22) le long de la flamme laminaire obtenue avec Cantera (KERO\_LUCHE)

La comparaison entre épaisseur local et constant est présentée sur la figure 6.6. On observe une reproduction correcte de la vitesse de flamme pour le cas KERO\_LUCHE bien que l'épaisseur n'agisse pas suffisamment sur le terme source de CO<sub>2</sub>, du fait que la valeur de  $\alpha$  correspondante est faible. Il est difficile d'expliquer pourquoi la vitesse de flamme obtenue reste correcte. En revanche pour le cas 2S\_KERO\_BFER, l'utilisation du senseur ne permet pas de retrouver la vitesse de flamme laminaire. Là encore, le senseur n'agit pas dans la zone de réaction du CO<sub>2</sub>. Le senseur basé sur la variable d'avancement normalisée ne donne pas non plus satisfaction au vu des tests effectués. Même

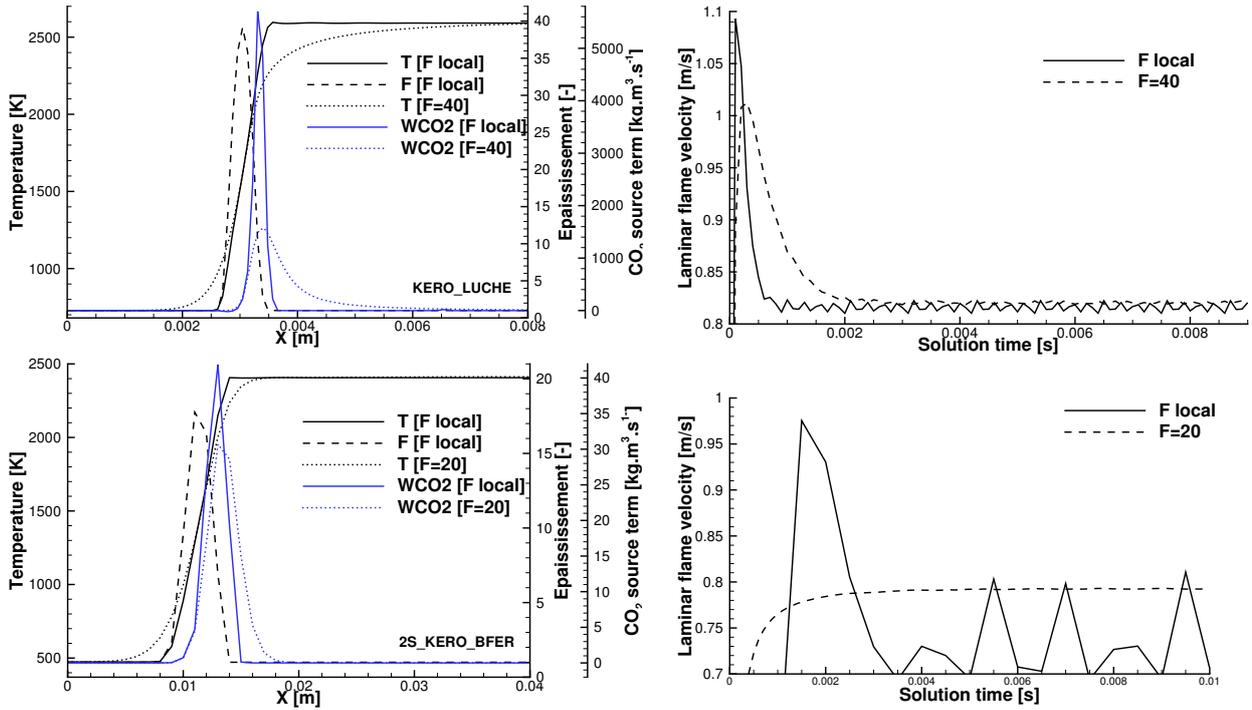


FIGURE 6.6 – Comparaison entre épaisseur local (basé sur la variable d’avancement normalisée) et épaisseur constant sur un flamme laminaire prémélangée 1D. En haut : configuration KERO\_LUCHE. En bas : configuration 2S\_KERO\_BFER.

pour le cas KERO\_LUCHE, pour lequel on retrouve la vitesse de flamme laminaire, l’utilisation de la variable d’avancement normalisée pose certains problèmes. La variable d’avancement utilisée dans ce dernier test est, avant normalisation, de la forme  $\hat{c} = Y_{CO_2} + Y_{CO}$ . Dans le cas d’une flamme à richesse élevée, la réaction  $CO/CO_2$  est relativement peu intense et conduit à une évolution lente de la variable d’avancement dans les gaz brûlés tant que l’équilibre n’est pas atteint (voir figure 6.7, où le paramètre  $\mathcal{F}$  reste supérieur à 5 en aval de la flamme). Cela conduit à une activation du senseur de flamme et donc à l’application du facteur d’épaisseur dans toute la partie de l’écoulement occupée par les gaz brûlés n’étant pas encore à l’équilibre. Par ailleurs, la variable d’avancement que l’on souhaite pouvoir utiliser pour la problématique des  $NO_x$  (voir chapitre 4) est de la forme  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{\mathcal{M}_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{\mathcal{M}_{CO}} + 10 \times \frac{Y_{NO}}{\mathcal{M}_{NO}}$ . Dans ce cas, du fait de l’évolution lente du  $NO$ , on retrouve le problème de l’activation du senseur dans les gaz brûlés, y compris mélange stœchiométrique ou pauvre (voir figure 6.8, où le paramètre  $\mathcal{F}$  reste supérieur à 15 en aval de la flamme).

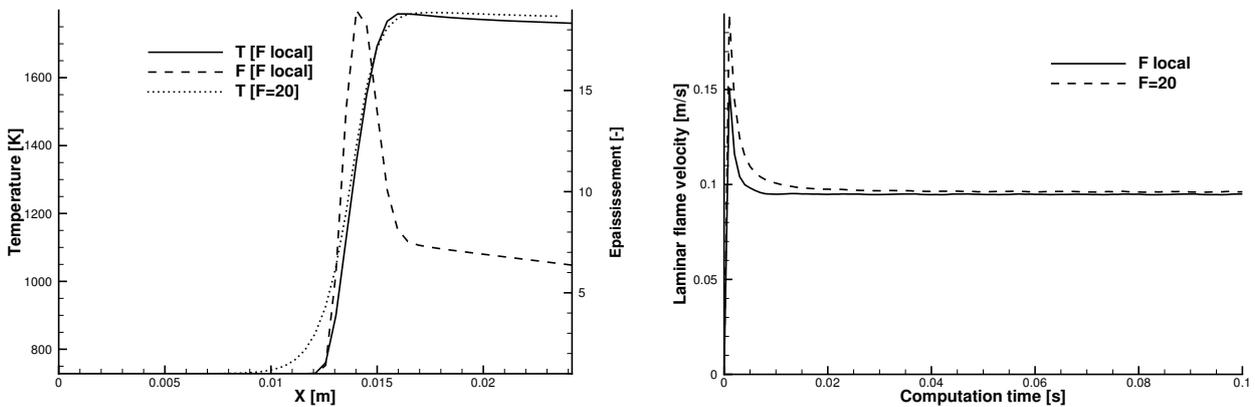


FIGURE 6.7 – Comparaison entre épaisseur local et épaisseur constant sur un flamme laminaire prémélangée 1D de richesse  $\Phi = 3,0$ , avec  $\alpha = 16(c(1 - c))^2$  où  $c = f(CO_2, CO)$ .

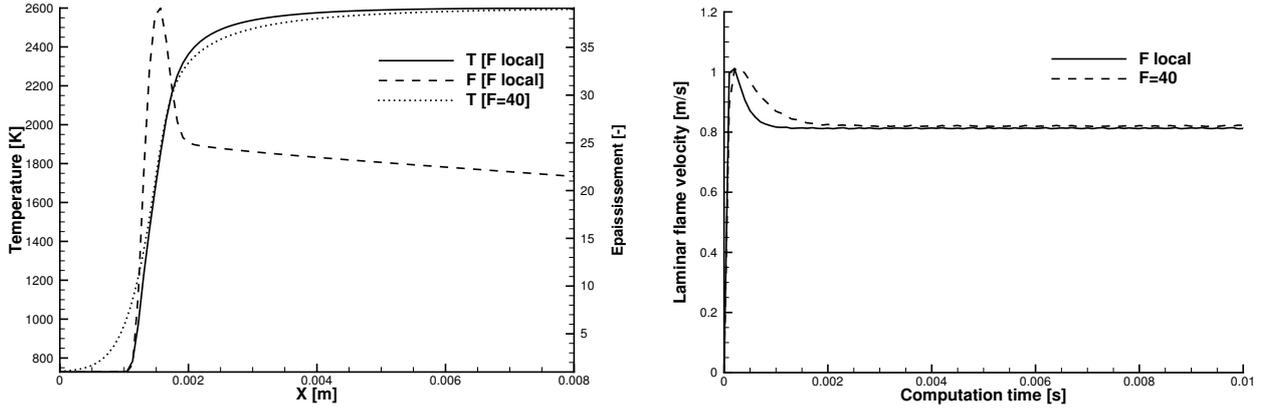


FIGURE 6.8 – Comparaison entre épaisseur local et épaisseur constant sur un flamme laminaire prémélangée 1D de richesse  $\Phi = 1, 0$ , avec  $\alpha = 16(c(1 - c))^2$  où  $c = f(CO_2, CO, NO)$ .

### Reformulation du senseur de flamme

Les deux formes de senseur de flamme qui ont été présentées ne permettent pas de reproduire correctement la vitesse de flamme d'une flamme prémélangée sur maillage grossier. Néanmoins, la formulation de  $\alpha$  basée sur la variable d'avancement normalisée semble avoir le potentiel, d'après la figure 6.5, pour provoquer un épaisseur sur l'ensemble de la zone de réaction de la flamme. En effet, contrairement à la formulation de  $\alpha$  basée sur le taux de réaction du carburant, celle basée sur la variable  $c$  est non nulle dans la zone de réaction du  $CO_2$ . C'est pourquoi on s'oriente, dans ce travail de thèse, vers un senseur de flamme basé sur la variable d'avancement normalisée. Toutefois, la valeur du senseur de flamme obtenue avec l'équation (6.22) reste trop faible ( $\alpha < 0,25$ ) pour épaissir correctement la flamme dans la zone de réaction du  $CO_2$ . Il serait souhaitable que la valeur de  $\alpha$  se rapproche de 1 dans la zone de réaction de chaque espèce. De plus, selon la formulation de la variable  $c$  qui est utilisée, l'équation (6.22) peut conduire à une valeur du senseur de flamme non nulle en aval de la flamme, alors que l'épaisseur n'est plus nécessaire dans cette zone pour discrétiser les taux de réaction, compte tenu des faibles gradients de fraction massique dans les gaz brûlés. Enfin, on a évoqué précédemment que l'interaction flamme-tourbillon pouvait être mieux prédite si l'épaisseur était limité dans la zone de diffusion thermique. La formulation (6.22) a donc été adaptée en se fixant pour objectifs :

- d'obtenir une valeur de 1 dans la zone de réaction de chacune des espèces ;
- d'obtenir une valeur de 0 en aval de flamme là où l'épaisseur n'est pas nécessaire même si des réactions relativement lentes s'y déroulent ;
- d'obtenir une valeur proche de 0 dans la zone de diffusion thermique, pour améliorer la modélisation de l'interaction flamme-tourbillon.

Pour cela, on définit une zone dite de flammelette, où l'on considère que l'on a effectivement une structure de type flammelette du fait des forts gradients de concentration (par opposition au reste de l'écoulement où l'on a de faibles gradients, y compris dans les gaz brûlés où se poursuivent des réactions relativement lentes). On fixe le centre de cette zone sur l'abscisse de la flamme  $x_{fl}$  (abscisse à laquelle la température atteint la moitié de sa valeur maximale). On fixe l'épaisseur de cette zone comme étant égale à  $L_{fl} = 10\delta_l^0$ , où  $\delta_l^0$  est l'épaisseur thermique de la flamme. Pour que le senseur de flamme agisse exclusivement dans cette zone, on définit une variable d'avancement dite saturée,  $c_{sat}$ , dont la valeur n'évolue plus et reste égale à 1 en aval de la zone de flammelette, même si des réactions lentes y ont lieu. Ainsi, le senseur  $\alpha$ , contenant le terme de forme  $c_{sat}(1 - c_{sat})$ , est nul en aval de la zone de flammelette. La variable d'avancement saturée est définie comme :

$$c_{sat} = \min\left(1, \frac{\hat{c}}{\hat{c}|_{x=x_{sat}}}\right), \quad (6.25)$$

où  $x_{sat}$ , l'abscisse de saturation, est définie comme  $x_{sat} = x_{fl} + \frac{L_{fl}}{2}$ . Cette variable d'avancement saturée est basée sur la même définition de  $\hat{c}$  que celle utilisée pour le calcul de  $c$ . Par conséquent, elle ne fait

pas appel à des paramètres supplémentaires qu'il reviendrait à l'utilisateur de fixer. Cette variable saturée atteint son maximum, qui vaut 1, en  $x_{sat}$ , la fin de la zone de flammelette, indépendamment du fait que l'équilibre soit atteint ou non dans cette zone. Passé cette limite, on considère que les gradients sont suffisamment faibles pour que cette partie de la flamme soit correctement résolue sur un maillage grossier.

Concernant l'objectif de limiter l'épaississement dans la zone de diffusion thermique, on propose de remplacer dans (6.22) l'expression  $c(1 - c)$  par  $c^2(1 - c)$ , de façon à centrer le maximum de  $\alpha$  en  $c = \frac{2}{3}$  plutôt qu'en  $c = 0,5$ . En effet, on peut voir sur la figure 6.5 que les réactions ont plutôt lieu dans la flamme en  $c \geq 0,5$ . La zone  $c < 0,5$  peut être assimilée à la zone de diffusion thermique, qui serait épaissie autant que la zone de réaction de la flamme, si la valeur de  $\alpha$  était maximale en  $c = 0,5$ . En décalant le maximum de  $\alpha$  en  $c = \frac{2}{3}$ , celui-ci se trouve d'après la figure 6.5 approximativement au centre de la zone de réaction, qui est la zone où l'on veut que l'épaississement s'applique. Afin que le senseur de flamme garde en son maximum une valeur identique au senseur non modifié, soit  $\max(\alpha) = 1$ , la valeur de la constante de l'équation (6.22) a dû être modifiée, passant de 16 à 46,56.

La fonction tangente hyperbolique utilisée par Légier et al. [57] a été reprise dans la formulation de  $\alpha$ , car elle permet de contrôler les transitions du senseur de flamme, et notamment de faire en sorte que le senseur  $\alpha$  ait une valeur de 1 dans l'ensemble de la zone de réaction. On obtient finalement l'expression suivante pour le senseur de flamme :

$$\alpha = \tanh\{\beta \times 46.56[c_{sat}^2(1 - c_{sat})]^2\}. \quad (6.26)$$

Une évolution du nouveau senseur obtenue sur maillage fin sur la configuration KERO\_LUCHE est montrée sur la figure 6.9, en prenant deux définitions différentes de  $\hat{c}$ , et en prenant  $\beta = 10$ . On voit que la définition de  $\hat{c}$  modifie l'évolution du senseur de flamme, mais contrairement à ce qui est observé avec la formulation originale, celui-ci redevient nul dans les gaz brûlés, y compris avec une définition de  $\hat{c}$  incluant le NO. On voit aussi que l'activation du senseur de flamme se fait en aval de la position à laquelle la température commence à s'élever, même si l'utilisation de la fonction tanh tend à limiter cet effet.

Il peut paraître paradoxal que le senseur qui s'appuie sur la variable d'avancement contenant la fraction massique de NO, espèce à évolution lente, retombe plus rapidement à zéro que l'autre senseur. L'explication réside dans le fait que, dans la variable d'avancement impliquant NO, les fractions massiques sont divisées par les masses molaires correspondantes, ce qui tend à diminuer le poids de l'espèce CO<sub>2</sub> relativement à celui de l'espèce CO, entraînant une évolution de  $\hat{c}$  plus raide dans la flamme, puis quasi nulle dans les gaz brûlés avant que l'abscisse  $x_{sat}$  soit atteinte. Le senseur de flamme chute alors plus rapidement là où l'évolution de  $\hat{c}$  est plus raide, et sa valeur est proche de zéro là où  $\hat{c}$  n'évolue que très peu. Passé l'abscisse  $x_{sat}$ , l'évolution de NO entraîne de nouveau une croissance marquée de  $\hat{c}$ , mais  $c_{sat}$  qui intervient dans le calcul du senseur  $\alpha$  sature alors à la valeur de 1.

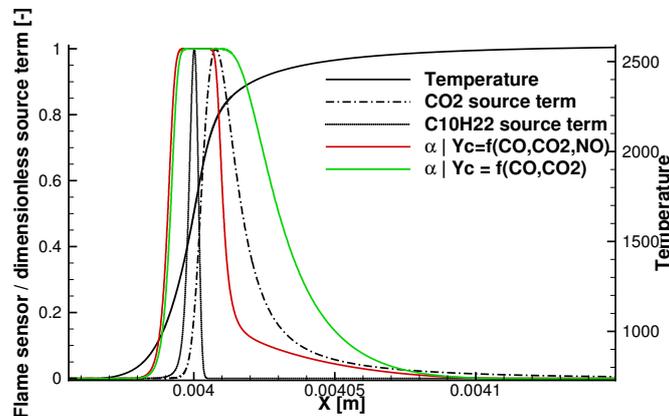


FIGURE 6.9 – Évolution du senseur (eq. 6.26) le long de la flamme laminaire obtenue avec Cantera (KERO\_LUCHE)

La formulation (6.26) a été testée sur les deux configurations KERO\_LUCHE et 2S\_KERO\_BFER. Pour KERO\_LUCHE, le test a été effectué pour deux définitions de  $\hat{c}$  incluant ou non le NO. Les résultats obtenus avec  $\beta = 10$  sont présentés sur la figure 6.10. On observe cette fois que la vitesse de flamme est correcte pour les deux configurations. De plus, on n’observe plus d’épaississement dans les gaz brûlés quand le NO est inclus dans la variable d’avancement. Cette forme de sensor donne satisfaction sur les cas tests étudiés et sera donc conservée pour la suite de ce travail.

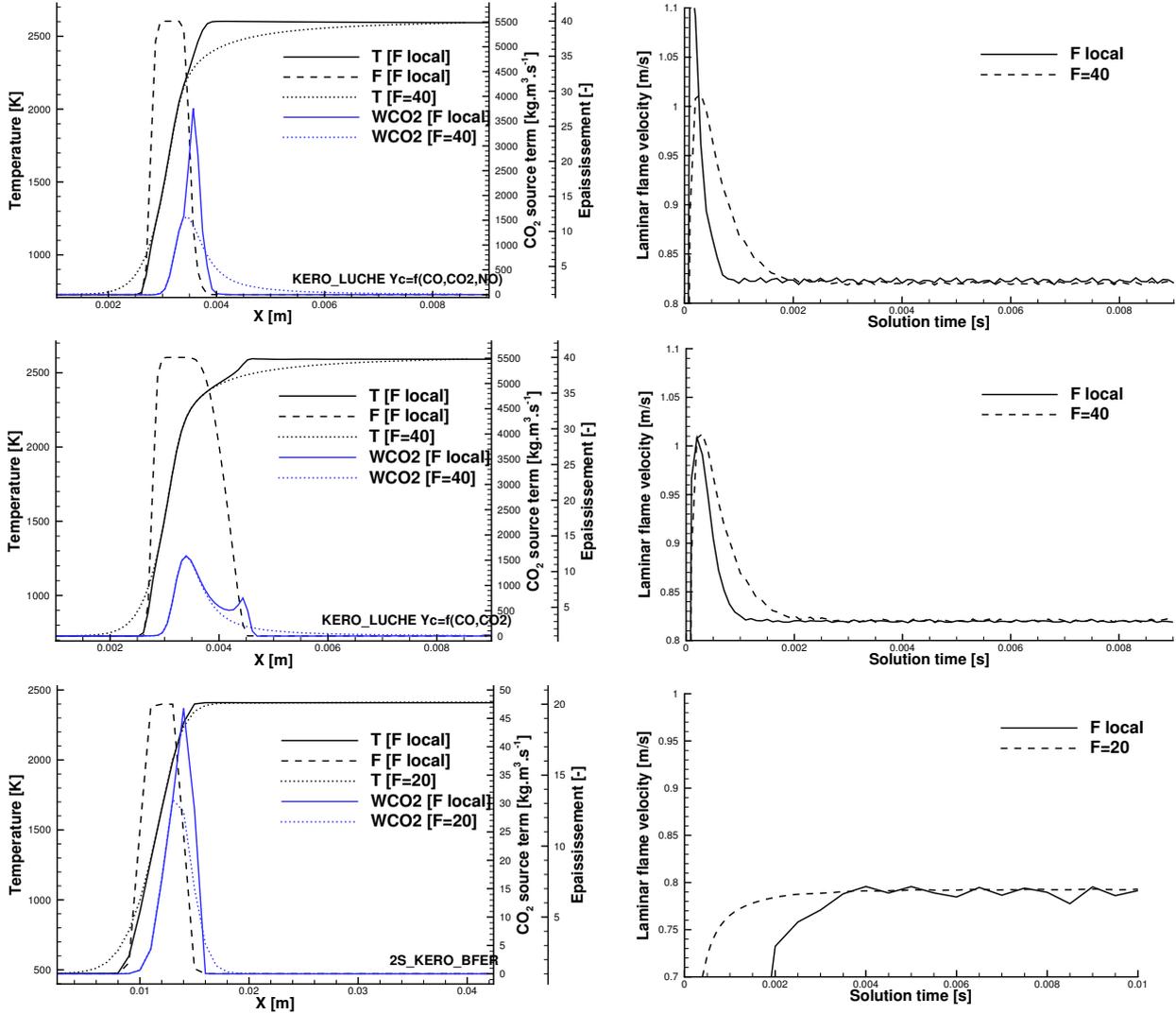


FIGURE 6.10 – Comparaison entre épaisseur local (eq. 6.26) et épaisseur constant sur une flamme laminaire prémélangée 1D. En haut : configuration KERO\_LUCHE avec  $\alpha$  calculé selon (6.26) et NO dans la variable d’avancement. Au centre, configuration KERO\_LUCHE avec  $\alpha$  calculé selon (6.26) sans NO dans la variable d’avancement. En bas : configuration 2S\_KERO\_BFER.

## 6.4 Régimes partiellement prémélangés et de diffusion : couplage des approches statistique et de flamme épaisse

L’approche flamme épaisse a été développée dans le cadre de la combustion en régime prémélangé. Pour prendre en compte la variance de la fraction de mélange  $Z$  en sous-maille, il est donc nécessaire d’ajouter à cette approche un modèle prenant en compte l’effet de cette variance. Dans ce but, on utilise une approche statistique basée sur l’utilisation d’une  $\beta$ -PDF pour la fermeture du taux de réaction. Comme évoqué en section 6.1, l’utilisation d’une  $\beta$ -PDF pour  $Z$  semble appropriée. De plus, des  $\beta$ -PDF pour  $Z$  ont été utilisées dans l’approche F-TACLES [3], et ont permis d’obtenir de bons

résultats.

En couplant flamme épaisse et  $\beta$ -PDF pour  $Z$ , l'équation résolue pour le transport des espèces chimiques reste l'équation (6.5), mais le terme source fait cette fois intervenir le terme tabulé obtenu par intégration de la PDF de  $Z$ . Suivant la formulation du modèle FTC retenue dans CEDRE, ce terme s'écrit donc :

$$\dot{\omega}_k = \dot{\omega}_k^{TAB}(\tilde{Z}, Z_v, c) + \dot{\omega}_k^{relax} = \int_0^1 \dot{\omega}_k^{TAB}(Z, c) P(Z; \tilde{Z}, Z_v) dZ + \dot{\omega}_k^{relax}. \quad (6.27)$$

L'utilisation d'une  $\beta$ -PDF pour  $Z$  nécessite de résoudre une équation de transport supplémentaire pour la variance de sous-maille  $Z_v = \overline{Z^2} - \tilde{Z}^2$ . Celle-ci peut s'exprimer sous la forme [22] :

$$\frac{\partial \overline{\rho} Z_v}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{u}} Z_v) = -\nabla \cdot (\overline{\tau Z_v}) + \nabla \cdot (\overline{\rho D_Z} \nabla Z_v) - 2\overline{\tau Z} \cdot \nabla \tilde{Z} - 2\overline{s_{\chi Z}} + \overline{\dot{\omega}_{Z_v}} \quad (6.28)$$

avec  $\overline{\tau Z_v} = \overline{\rho \tilde{u}'' Z''^2}$ ,  $\overline{\tau Z} = \overline{\rho \tilde{u}'' Z''}$  et le terme  $\overline{\dot{\omega}_{Z_v}}$  lié à l'évaporation de  $Z$ , qui a deux contributions :  $2(\overline{Z \dot{\omega}_Z} - \tilde{Z} \overline{\dot{\omega}_Z})$  et  $-(\overline{Z^2 \dot{\omega}_Z} - \tilde{Z}^2 \overline{\dot{\omega}_Z})$ .

Les fermetures implémentées lors de la thèse de Savre [92] sont des fermetures courantes de la littérature. Ainsi, les flux turbulents  $\overline{\tau Z}$  et  $\overline{\tau Z_v}$  intervenant dans cette équation sont évalués au moyen d'une hypothèse de Boussinesq, ce qui donne pour les termes du second membre :

$$-\nabla \cdot \overline{\tau Z_v} = \nabla \cdot \left( \overline{\rho} \frac{\nu_t}{S_{ct}} \nabla Z_v \right), \quad (6.29)$$

et :

$$-2\overline{\tau Z} \cdot \nabla \tilde{Z} = 2\overline{\rho} \frac{\nu_t}{S_{ct}} |\nabla \tilde{Z}|^2. \quad (6.30)$$

Le terme de dissipation de  $Z_v$  est évalué en utilisant une hypothèse de relaxation linéaire :

$$-2\overline{s_{\chi Z}} = -2C_d^{Z_v} \overline{\rho} \frac{Z_v}{\tau_t} = -2C_d^{Z_v} \overline{\rho} Z_v f_t \quad (6.31)$$

où  $f_t$  est la fréquence turbulente généralement définie en LES comme  $f_t = \frac{\nu_t}{\Delta^2}$ , et  $C_d^{Z_v}$  est un coefficient du modèle. Il convient de noter que la fréquence turbulente implémentée dans CEDRE est définie comme  $f_t = \frac{\sqrt{C_\mu \nu_t}}{C_s^2 \Delta^2}$ , où  $C_\mu = 0,09$  est une constante du modèle  $k-\epsilon$  et  $C_s$  la constante de Smagorinsky souvent prise entre 0,1 et 0,2. Pour retrouver la fermeture utilisée dans la littérature pour la dissipation scalaire de  $Z_v$ , il conviendrait donc d'introduire dans le second membre de l'équation (6.31) le facteur  $\frac{C_s^2}{\sqrt{C_\mu}}$  (dont la valeur varie entre 0,03 et 0,13 selon la valeur prise par  $C_s$ ).

Concernant le coefficient  $C_d^{Z_v}$ , Pera et al. [78] proposent d'utiliser une procédure de type Germano pour déterminer dynamiquement la valeur de celui-ci. Dans le code CEDRE une valeur constante de 1 est imposée comme cela semble être le cas dans d'autres travaux [22, 77].

Pour finir, les écoulements considérés dans le présent travail sont diphasiques et nécessitent une fermeture pour les termes faisant intervenir le taux d'évaporation  $\overline{\dot{\omega}_z}$ <sup>4</sup>. Les travaux de Savre [92] puis Petrova [81] ne portaient que sur des écoulements monophasiques et la fermeture de ces termes n'était donc pas traitée dans CEDRE jusqu'ici. Les travaux de Pera et al. [78] montrent que le terme  $(\overline{Z^2 \dot{\omega}_Z} - \tilde{Z}^2 \overline{\dot{\omega}_Z})$  est négligeable devant les termes de production et dissipation de  $Z_v$ . Ce n'est pas le cas du terme  $2(\overline{Z \dot{\omega}_Z} - \tilde{Z} \overline{\dot{\omega}_Z})$  qui doit donc être fermé. On choisit d'utiliser un modèle proposé par Hollman et Gutheil [42], repris par Pera et al. [78] :

$$2(\overline{Z \dot{\omega}_Z} - \tilde{Z} \overline{\dot{\omega}_Z}) = C_v^{Z_v} Z_v \frac{\overline{\dot{\omega}_Z}}{\tilde{Z}} \quad (6.32)$$

Le coefficient  $C_v^{Z_v}$  est fixé à 0,5 par Hollman et Gutheil dans un contexte RANS, et déterminé de façon dynamique en LES par Pera et al., par une procédure type Germano. Dans CEDRE, on impose une

4. On rappelle que ce terme d'évaporation apparait en premier lieu dans l'équation de transport de  $Z$ . Il est détaillé dans le chapitre 5 consacré aux modifications apportées au modèle FTC pour traiter les écoulements diphasiques.

valeur constante de 0,5 pour  $C_v^{Z_v}$ . Il pourrait être intéressant d'appliquer une procédure dynamique, mais il semble plus cohérent de l'appliquer à l'ensemble des termes pouvant en bénéficier (viscosité turbulente dans une approche type Smagorinsky dynamique, constante  $C_d^{Z_v}$  du terme de dissipation et constante  $C_v^{Z_v}$  que l'on vient d'évoquer). Toutefois, cela nécessite d'implémenter une procédure supplémentaire de filtrage des champs résolus dans CEDRE qui ne fait pas l'objet de ce travail de thèse.

Après fermeture des différents termes, l'équation résolue pour le transport de la variance  $Z_v$  est finalement :

$$\frac{\partial \bar{\rho} Z_v}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} Z_v) = \nabla \cdot \left( \bar{\rho} \left( D_Z + \frac{\nu_t}{S_{ct}} \right) \nabla Z_v \right) + 2\bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{ct}} |\nabla \tilde{Z}|^2 - 2C_d^{Z_v} \bar{\rho} Z_v f_t + C_v^{Z_v} Z_v \overline{\dot{\omega}_Z} \quad (6.33)$$

Par manque de temps, il n'a pas été possible de valider le couplage des approches « flamme épaissie » et « PDF présumée » à l'aide de calculs LES sur une flamme turbulente académique. Cette modélisation sera donc directement appliquée sur la configuration semi-industrielle étudiée en dernière partie de ce mémoire. Il faut également signaler que si le couplage des approches « flamme épaissie » et « PDF présumée » permet de traiter des écoulements à richesse variable, il n'est néanmoins pas possible d'utiliser telle quelle l'approche « flamme épaissie » conjointement avec la version flamme de diffusion du modèle FTC. En effet, la vitesse de flamme n'est pas définie dans une table de type flammes de diffusion, ce qui pose problème pour le calcul de la fonction d'efficacité  $\mathcal{E}$ . Pour effectuer ce type de calcul, il reste donc à définir un équivalent à cette grandeur (qui n'est autre qu'une intégrale du taux de réaction du carburant) dans une flamme de diffusion. Une autre possibilité serait d'utiliser la table de diffusion de façon simultanée avec une table de prémélange, qui fournirait alors la vitesse de flamme.

## Bilan

Le couplage des approches FTC et flamme épaissie a été implémenté dans le code CEDRE. Une nouvelle formulation du senseur de flamme a été établie. Celle-ci rend l'effet du senseur peu dépendant de la variable d'avancement utilisée et limite l'épaississement dans la zone de diffusion thermique de la flamme afin d'améliorer la réponse dynamique de celle-ci une fois épaissie. Le couplage FTC/flamme épaissie a été validé sur des simulations de flammes 1D laminaires sous-résolues par le maillage. On reproduit correctement la propagation de la flamme épaissie sur ces maillages grossiers. Une étape supplémentaire de validation pourrait être effectuée sur une flamme turbulente académique, afin de valider le comportement de la fonction d'efficacité qui ne peut pas être testée sur des flammes 1D laminaires. Toutefois, l'approche flamme épaissie a déjà été utilisée dans le code CEDRE avec des cinétiques chimiques réduites et les fonctions d'efficacité ne sont pas impactées par le traitement de la cinétique chimique, qu'elle soit tabulée ou réduite, ce qui explique que cette étape de validation n'ait pas été abordée. Il faut noter que les vitesse et épaisseur de flamme qui interviennent dans le calcul de ces fonctions sont, dans le cas du modèle FTC, des grandeurs locales de l'écoulement, alors que dans le cas d'une chimie réduite, ce sont des constantes dont la valeur est fixée pour une richesse unique. Les fonctions d'efficacité sont donc a priori mieux évaluées dans les écoulements à richesse variable lorsque le modèle FTC est utilisé. On estime que le couplage FTC et « flamme épaissie » effectué dans CEDRE est applicable en l'état à des configurations semi-industrielles telles que celle traitée en seconde partie de ce mémoire, dans la limite où les tables utilisées permettent de calculer la vitesse de flamme nécessaire à l'évaluation de la fonction d'efficacité  $\mathcal{E}$ .

Les travaux exposés dans les chapitres précédents ont permis d'aboutir à un modèle FTC robuste, qui s'intègre dans l'architecture du code CEDRE du fait de son implémentation via les termes source, tout en respectant la conservation de la masse par les réactions chimiques, et en limitant les erreurs d'évaluation de la température du mélange, induites par le fait de ne pas transporter toute les espèces de la table.

Le modèle peut être utilisé avec une table générée soit à partir de flammes de prémélange, soit à partir de flammes de diffusion, selon le régime de combustion dans lequel se trouve la configuration étudiée. Dans le cas où le régime de combustion varie au sein du foyer, allant du prémélange à la diffusion, le modèle FTC permettra de reproduire les principales caractéristiques de la combustion, en particulier le dégagement de chaleur, comme cela a été montré au chapitre 2. Néanmoins, dans ce chapitre, une dégradation des prédictions des concentrations de certaines espèces chimiques a également été mise en évidence, lorsque la table utilisée ne correspond pas au régime local de l'écoulement. L'évaluation des concentrations d'espèces polluantes, avec une unique table de type prémélange ou diffusion, dans le cas d'un régime de combustion variable, pourra donc être impactée par ce problème. Il serait intéressant d'évaluer cette erreur dans le cas de l'écoulement complexe d'une chambre de combustion aéronautique qui présente effectivement une variation spatiale du régime de combustion.

Concernant la prédiction des polluants, les travaux réalisés sur le couplage du modèle de Leung et al. avec le modèle FTC pour la prédiction des suies ont montré une certaine capacité de la méthode à prédire des niveaux de suies proches des mesures pour des flammes laminaires académiques, au prix d'un ajustement des constantes du modèle de Leung. L'évaluation de cette modélisation sur une configuration représentative des foyers aéronautiques reste à effectuer. L'amélioration de la modélisation des espèces polluantes produites par des réactions chimiques relativement lentes a également été effectuée. On a proposé pour cela une méthode d'extension de la table FTC, au moyen de calculs PFR, permettant de prendre en compte les temps caractéristiques relativement grands d'espèces comme les  $\text{NO}_x$ , ou encore le CO dans les zones riches. Là encore, l'application de cette modélisation à une chambre de combustion aéronautique doit être étudiée.

Le modèle FTC de CEDRE a également été modifié pour permettre le traitement de la combustion en présence d'une injection du carburant sous forme liquide, que l'on rencontre dans tous les foyers aéronautiques. Toutefois, les temps caractéristiques d'évaporation des gouttes de carburant entraînent une variation du régime local de combustion. On a déjà évoqué ce problème, et l'impact qu'il peut avoir sur la prédiction des espèces polluantes. L'amélioration du traitement des écoulements dont le régime de combustion varie localement sort du cadre donné à cette thèse.

Pour finir, on a proposé un couplage des approches « flamme épaissie » et « PDF présumée » pour modéliser l'interaction chimie-turbulence en LES dans le cas d'écoulements présentant des fluctuations de richesse sous l'échelle de la maille, y compris dans le cas d'une évaporation du carburant liquide. Par manque de temps, l'approche n'a pas été validée sur une flamme turbulente académique, mais a été directement utilisée pour la simulation de la combustion turbulente dans une configuration semi-industrielle. Cette simulation est présentée dans la seconde partie de ce mémoire.

Outre les limitations que l'on vient d'évoquer, il faut signaler que le modèle FTC de CEDRE ne permet pas une prise en compte totale des pertes thermiques au sein de l'écoulement. Du fait que l'on transporte l'enthalpie dans le code CEDRE, la température qui est calculée tient compte des pertes énergétiques liées aux différents transferts thermiques se produisant dans l'écoulement. En revanche, du fait de l'hypothèse d'adiabaticité utilisée pour générer la table FTC, les taux de réaction extraits de celle-ci ne prennent pas en compte ces pertes thermiques. Les taux de réaction sont évalués avec une température adiabatique, quelle que soit la température locale de l'écoulement. Pour prendre en compte l'effet des pertes thermiques sur les taux de réaction, il est nécessaire d'ajouter une dimension à la table, de manière à inclure les solutions de flammes multidimensionnelles comportant différents niveaux de pertes thermiques.

Malgré les limites qu'elle présente, la modélisation FTC, suite aux développements que l'on vient de résumer, permet la simulation d'une configuration de type industriel, et offre la capacité de prédire les concentrations de différentes espèces polluantes, et cela de manière simultanée. La qualité de ces prédictions sur ce type de configuration sera évaluée en seconde partie de ce mémoire.

## Deuxième partie

# Validation de l'approche FTC sur une chambre de combustion dotée d'un injecteur aéronautique



De nombreux travaux ont été effectués sur la simulation de configurations expérimentales mettant en jeu des systèmes d'injection issus de foyers aéronautiques, dans des chambres de combustion reproduisant des conditions plus ou moins proches de celles obtenues en vol (pression, températures d'injection, carburant utilisé, géométrie, etc...). On propose de passer en revue des études effectuées sur ces configurations, avec un intérêt marqué pour les travaux portant sur la problématique des émissions polluantes. Cette revue n'est pas exhaustive, elle se limite aux configurations réactives qui nous ont semblé les plus marquantes. Bien que le carburant soit injecté sous forme liquide dans les foyers aéronautiques, on a pris en considération des études dans lesquelles le carburant est pré-vaporisé. Celles-ci apportent en effet des enseignements sur la validité des modèles de combustion turbulente lorsqu'ils sont appliqués dans les foyers aéronautiques, en s'affranchissant des incertitudes liées à la modélisation des flammes diphasiques. Sauf mention contraire, les travaux présentés ont été réalisés au moyen de simulations de type LES.

Il est utile de rappeler qu'une chambre de combustion aéronautique est de forme annulaire et équipée de plusieurs injecteurs répartis le long de cet anneau (environ 20 à 40 injecteurs selon la puissance du moteur). Un exemple de géométrie de chambre annulaire est présenté sur la figure 8.1. Compte tenu de la périodicité dans la direction azimutale de ce type de chambre, il est courant de ne simuler qu'un secteur de la chambre comprenant un ou plusieurs injecteurs. Un secteur mono-injecteur est mis en évidence en bleu sur la figure 8.1.

Pour commencer, on peut citer les travaux de James et al. [45] qui ont réalisé la simulation d'un modèle de secteur de chambre comprenant un injecteur tourbillonnaire avec atomiseur pour le kérosène, des jets de dilution, et des flux de refroidissement. La pression dans la chambre et la température d'admission ne sont pas précisées. Le calcul a été réalisé avec une cinétique à deux étapes pour le propane, celle de Westbrook et Dryer [110], couplée avec un modèle de type « Eddy Break-Up » (EBU). La seule comparaison avec l'expérience porte sur la distribution radiale de richesse (moyennée dans la direction azimutale). La position du pic de richesse est mal reproduite par les calculs LES, ce que les auteurs attribuent à des conditions aux limites perfectibles (il est pas précisé sur quelles conditions aux limites portent les améliorations envisagées, ni la nature de ces dernières).

Les travaux de Menon et al. [62] portent sur un secteur de chambre General Electrics doté de deux injecteurs de type Twin Annular Premixing Swirler (TAPS). Deux points de fonctionnement ont été étudiés : l'un avec une pression chambre de 9 atm et une température d'admission de l'air de 580 K, l'autre avec une pression de 24 atm et une température d'entrée d'air de 900 K. Le carburant est injecté sous forme d'un spray qui a été modélisé dans le calcul. Deux modélisations de la combustion turbulente ont été testées : le modèle Linear Eddy Mixing (LEM) et un modèle de type EBU, tous deux complétés par une cinétique chimique pour le kérosène à trois étapes, dont une pour le NO. Les calculs ont montré l'importance d'une modélisation correcte du temps de mélange des réactifs pour que la flamme soit accrochée de manière physique (et non dans les canaux de l'injecteur comme avec le modèle EBU), mais aucune comparaison avec l'expérience n'est effectuée.

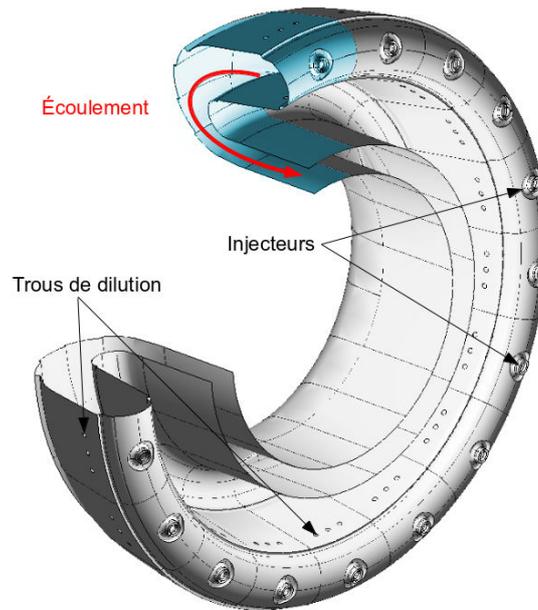


FIGURE 8.1 – Exemple de géométrie d’une chambre de combustion annulaire équipant un moteur aéronautique (ici une chambre d’hélicoptère). Extrait de [6].

Boudier et al. [10, 11] et Auzillon [2] ont effectué la simulation d’un secteur de chambre d’hélicoptère Turbomeca. Dans cette configuration, le carburant est supposé prévaporisé et prémélangé à de l’air lorsqu’il est injecté dans la chambre. Les travaux de Boudier et al. [10] ont été effectués sur un point de fonctionnement correspondant à une pression de 8 bar. Le profil radial de température en sortie de chambre (moyennée dans la direction azimutale) a été mieux reproduit avec l’approche LES plutôt qu’avec l’approche RANS, sans pour autant reproduire correctement la position du pic de température obtenue expérimentalement. Les calculs effectués en raffinant le maillage [11] montrent que la résolution du maillage a peu d’effet sur les profils moyens de température, de vitesse et de taux de réaction, dans la zone proche de l’injection, mais davantage d’effet sur les valeurs RMS de fluctuations de température. Les travaux d’Auzillon [2] ont été effectués pour un point de fonctionnement correspondant à une pression de 5 bar et une température d’entrée de 575 K. Les simulations ont permis de reproduire la position des pics de température sur la surface des parois de la chambre, pics obtenus expérimentalement à l’aide d’une peinture thermo-sensible. Seule cette donnée expérimentale était disponible pour la validation du calcul.

Lecocq et al. [53] ont également simulé un secteur de chambre Turbomeca. Là encore, le carburant liquide est supposé prévaporisé. L’influence des transferts radiatifs sur les émissions de suie a été mise en évidence, mais le manque de données expérimentales n’a pas permis de valider les résultats obtenus. Cette même chambre a été simulée dans son intégralité par Boudier et al. [9], Staffelbach et al. [96], et Wolf et al. [111]. Les simulations de Boudier et al. [9], et Staffelbach et al. [96] ont montré que le calcul LES était capable de prédire l’existence d’oscillations de pression auto-entretenues dans la chambre de combustion. Le calcul a également montré la nécessité de simuler la géométrie complète de la chambre pour obtenir les modes acoustiques azimutaux. En effet, la simulation d’un secteur de chambre à laquelle sont appliquées des conditions limites de périodicité ne permet pas de les obtenir. Une difficulté à prédire la bonne fréquence de ces oscillations pour chacun des modes rencontrés a toutefois été constatée et attribuée à une mauvaise connaissance de l’impédance imposée aux conditions limites. La validation du calcul se fait seulement par l’intermédiaire de la fréquence d’oscillation de la pression. Les calculs de Wolf et al. [111] ont montré que cette fréquence d’oscillation obtenue par le calcul ne dépendait pas de la résolution du maillage. L’allumage de cette chambre complète Turbomeca a également été simulé par Boileau et al. [6], en modélisant cette fois le kérosène liquide sous forme de phase dispersée. Cette étude a permis de montrer des mécanismes de propagation de la flamme d’un injecteur à l’autre, celle-ci se faisant principalement par l’expansion des gaz brûlés. Signalons que la

pression dans la chambre est relativement faible (1 bar) puisque l'allumage correspond à une phase de mise en fonctionnement du moteur dans laquelle le compresseur n'est pas en action.

La simulation d'une chambre annulaire a également été effectuée par Chapuis et al. [13], mais peu d'informations sont disponibles concernant le point de fonctionnement étudié et la géométrie des injecteurs. De plus, aucune comparaison avec l'expérience n'est effectuée.

Ihme et al. [44], Moin et al. [65], Mahesh et al. [61] se sont intéressés à la simulation d'un secteur de chambre Pratt&Whitney PW 6000. Celui-ci est étudié dans un régime correspondant à une pression de 20 bar dans la chambre. L'injecteur tourbillonnaire est composé de trois étages pour l'air et le carburant est injecté sous forme liquide. Les gouttes de carburant ont été modélisées suivant une approche lagrangienne de la phase dispersée, tandis que la combustion a été modélisée à l'aide d'une approche de type chimie tabulée (PVA [82] dans [61, 65], FGM [70] dans [44]). Les résultats expérimentaux utilisés pour la validation se limitent à un profil radial de température dans le plan de sortie de la chambre, ainsi que la répartition du débit d'air entre différents éléments (trous de dilution, étages de l'injecteur, etc...) dans [61, 65], ou les indices d'émission pour les espèces NO et CO dans [44]. Moin et al. [65] et Mahesh et al. [61] rapportent une prédiction correcte du débit à 5 % près. Moin et al. [65] ont également obtenu un bon accord concernant la prédiction du profil radial de température. Les résultats de Ihme et al. [44] n'ont pas été comparés à l'expérience en terme de répartition du débit d'air et montrent un moins bon accord concernant la prédiction du profil radial de température. L'indice de NO est tout de même bien reproduit dans leur calcul (38 % par rapport à l'indice mesuré expérimentalement), bien que la modélisation utilisée pour le NO présente des défauts déjà évoqués au chapitre 4.

Pantangi et al. [76] ont effectué le calcul d'un secteur de chambre à section carrée, dans lequel le carburant est pré-vaporisé avant d'être injecté. L'injecteur tourbillonnaire est constitué d'un tube central pour le carburant et d'un étage de vrilles co-axial pour l'air. Le point de fonctionnement étudié correspond à une pression chambre de 6 bar, des températures d'admission de l'air et du carburant de 623 K et 673 K, et une richesse globale de 0,9. Un film d'air est également utilisé pour prévenir la formation de suie sur le hublot. La simulation ne prend pas en compte la modélisation des suies ni des pertes radiatives, ni le film d'air protégeant le hublot. La simulation effectuée utilise un modèle de Smagorinsky dynamique et un modèle de chimie tabulée FGM [70]. Les résultats obtenus sont en bon accord avec les profils de vitesse expérimentaux, obtenus par Laser Doppler Velocimetry (LDV). Des champs de concentration de vapeur de kérosène et de OH obtenus expérimentalement par Planar Laser-Induced Fluorescence (PLIF) ont également été utilisés pour la validation du calcul. On observe que la simulation LES donne un jet de vapeur kérosène plus étalé que dans l'expérience. La position relative du champ de OH par rapport au champ de kérosène est assez bien reproduite, mais sa position dans la fenêtre de mesure est donnée trop en aval par la simulation.

Hannebique et al. [39] ont simulé un des points de fonctionnement de la configuration étudiée dans le projet Towards Lean Combustion (TLC) [100], qui sera détaillée dans les chapitres suivants. Une modélisation eulérienne de la phase dispersée a été utilisée, avec notamment l'utilisation de la méthode Fuel Injection Method by Upstream Reconstruction (FIMUR) [89] pour la modélisation de l'atomiseur situé au niveau de la zone pilote. La viscosité de sous-maille est calculée par un modèle Wall Adapting Local Eddy-viscosity (WALE) [69] et la cinétique à deux étapes 2S\_KERO\_BFER [31] est utilisée conjointement avec une approche de type « flamme épaissie » pour modéliser la combustion turbulente. Le point de fonctionnement étudié correspond à une pression de 19,5 bar, des températures d'admission de l'air et du kérosène liquide de 728 K et 300 K et une richesse globale de 0,44. Les résultats du calcul ne sont pas comparés aux résultats expérimentaux, mais ils montrent la grande complexité de la flamme.

Eberle et al. [26] ont effectué une simulation Unsteady RANS de la configuration étudiée dans le programme FIRST. C'est une chambre à section carrée, fonctionnant à une pression de 3 bar et dotée d'un injecteur swirler à trois étages de vrilles. Un modèle SST est utilisé pour modéliser la turbulence. Une cinétique contenant 46 espèces est utilisée pour traiter les réactions chimiques, notamment les espèces aromatiques polycycliques hydrocarbonnées (PAH) intervenant dans la formation des suies. Cette formation à partir des PAH est calculée à l'aide d'un modèle à deux équations, l'une pour la fraction massique de suie, l'autre pour la densité de particules de suie. Les transferts radiatifs

sont modélisés au moyen d'une hypothèse de milieu optiquement mince, et une approche « PDF présumée » est utilisée pour modéliser l'interaction de la turbulence avec le rayonnement, ainsi qu'avec la combustion. Des écarts modérés avec les profils expérimentaux de vitesse (Stéréo Particle Image Velocimetry) et de température (Coherent Anti-Stokes Raman Spectroscopy) sont attribués à une modélisation inadaptée de certains phénomènes instationnaires avec l'approche URANS. La topologie des suies obtenue expérimentalement par des mesures Laser n'est que partiellement reproduite. On note en effet que la production de suie au niveau de l'axe de la flamme n'est pas reproduite par le calcul et que ce dernier donne une oxydation trop rapide des suies en aval de la flamme. Les niveaux de fraction volumique obtenus par le calcul sont de plus surestimés, mais l'échelle utilisée sur les figures ne permet pas de déterminer dans quelle mesure. Signalons que 338 000 heures CPU sont nécessaires pour réaliser le calcul sur 19 millions de cellules, du fait du grand nombre d'espèces devant être transportées.

On constate que parmi l'ensemble des études présentées, les comparaisons entre les résultats de calcul et de l'expérience sont généralement très limitées du fait de la complexité des mesures expérimentales dans les configurations étudiées. De plus, peu de travaux portent sur la validation des simulations d'émissions polluantes dans ces foyers, et la validité des modèles de combustion pour cette problématique reste à déterminer. Les calculs présentés dans la suite de ce mémoire ont pour but de confronter les résultats de simulations effectuées avec le modèle FTC aux mesures expérimentales réalisées au sein et en sortie d'une chambre de combustion équipée d'un injecteur aéronautique.

Afin d'évaluer la qualité des prédictions d'émissions polluantes obtenues à l'aide du modèle FTC développé en première partie de ce mémoire, on s'intéresse, dans le cadre de cette thèse, à la simulation de la configuration TLC [100]. Celle-ci a été étudiée expérimentalement sur les bancs de l'Onera, et numériquement lors de la thèse de Luc-Henry Dorey [23]. Cette configuration a été choisie car, parmi l'ensemble des mesures expérimentales réalisées, on trouve des profils de température au sein du foyer et un champ de fraction volumique de suie, et cela pour plusieurs points de fonctionnement représentatifs des conditions de vol d'un moteur civil. Cette configuration est d'autant plus intéressante qu'elle est dotée d'un injecteur tourbillonnaire multi-points de type Twin Annular Premixed Burner (TAPS), qui est un des systèmes d'injection qui équipent, et équiperont de plus en plus, les moteurs aéronautiques civils. Le système d'injection TAPS, la géométrie du foyer TLC et les mesures réalisées sur les bancs de l'Onera sont présentés dans ce chapitre.

## Sommaire

<b>9.1</b>	<b>Géométrie de la configuration</b> . . . . .	<b>120</b>
<b>9.2</b>	<b>Point de fonctionnement étudié</b> . . . . .	<b>121</b>
<b>9.3</b>	<b>Mesures expérimentales</b> . . . . .	<b>122</b>
	Profils de température au sein du foyer . . . . .	122
	Champ de radical OH et de vapeur de kérosène . . . . .	122
	Fraction volumique de suie au sein du foyer et en sortie de chambre . . . . .	122
	Mesures de concentration en sortie de chambre . . . . .	122

## 9.1 Géométrie de la configuration

Le dispositif expérimental TLC [100] est une chambre de combustion à section carrée équipée d'un injecteur de type Twin Annular Premixing swirler (TAPS) conçu par SNECMA. Ce type de système d'injection est destiné à créer un mélange rapide des réactifs de façon à obtenir une combustion homogène, globalement pauvre, se déroulant à des températures relativement basses, afin de limiter la formation de  $\text{NO}_x$  dans le foyer. On reviendra de façon plus détaillée sur la géométrie de ce système d'injection. Le foyer TLC, conçu et étudié expérimentalement à l'Onera, est représenté sur la figure 9.1. Il est constitué des parties suivantes :

- Un plénum permet de tranquilliser l'air entrant, afin d'assurer une alimentation homogène de l'injecteur. L'air entrant dans le plénum est préchauffé selon le point de fonctionnement étudié.
- Un bras alimente l'injecteur en kérosène liquide.
- L'injecteur, composé d'un étage de vrilles radiales et deux étages de vrilles axiales, impulse des mouvements de swirl contrarotatifs à l'air introduit dans la chambre. Cet injecteur est doté d'un atomiseur créant un spray de carburant au niveau de l'axe, et d'un système d'injection multi-points alimentant en carburant l'étage de vrilles radiales. Le rôle des différents étages de vrilles et des systèmes d'injection du carburant est décrit plus en détail par la suite.
- Une chambre de combustion à section carrée est suivie d'un convergent avec col amorcé, permettant de la maintenir à la pression du point de fonctionnement étudié.
- Un bras de mesure en sortie de chambre permet d'effectuer des prélèvements pour analyser la composition chimique des gaz sortant de la chambre.
- Un circuit de refroidissement (non représenté sur la figure 9.1) permet de prélever une part du débit d'air dans le plénum, et de le réinjecter sous forme de films afin de refroidir les parois latérales de la chambre d'une part, et la paroi située dans le plan d'injection, appelée fond de chambre, d'autre part.

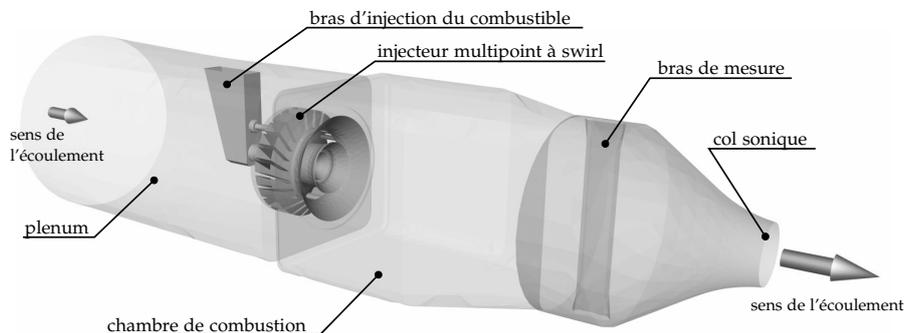


FIGURE 9.1 – Représentation de la configuration expérimentale TLC (Extrait de [23])

L'injecteur swirler multipoint ou TAPS est présenté plus en détail sur la figure 9.2. Les deux étages de vrilles axiales contrarotatives et l'atomiseur situé au niveau de l'axe servent à former une flamme pilote riche, destinée à stabiliser la combustion. L'injection contrarotative au travers de ces deux étages de vrilles permet d'augmenter le cisaillement de l'air, ce qui favorise la fragmentation des gouttes. Cela permet également de générer un mouvement de recirculation autour de la zone pilote qui favorise la stabilisation de la flamme, au moyen du réchauffement des gaz frais par les gaz brûlés. Le système d'injection multi-points est constitué d'un ensemble d'orifices permettant d'injecter des gouttes de carburant au niveau des vrilles de l'étage principal (vrilles radiales). Cet ensemble est destiné à créer une flamme principale, stabilisée par la flamme pilote, produisant l'essentiel du dégagement de chaleur. 90 % du débit d'air passe par cet étage, de manière à ce que la flamme principale se trouve dans un régime prémélangé suffisamment pauvre pour limiter la formation des  $\text{NO}_x$ . Le mouvement de swirl généré par les vrilles de l'étage principal contribue à former une importante zone de recirculation, favorable à la stabilisation de la flamme.

Signalons que la chambre de combustion TLC est de section carrée pour des besoins de métrologie, et équipée d'un seul injecteur TAPS. Cette configuration ne permet pas de reproduire tous les phénomènes physiques se déroulant dans une chambre annulaire complète, mais l'absence de ces phénomènes

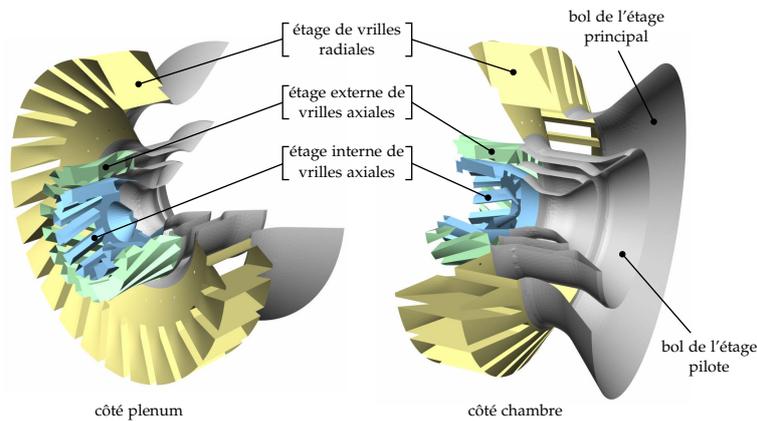


FIGURE 9.2 – Représentation de l'injecteur de type TAPS équipant la configuration TLC (Extrait de [23])

n'a pas d'impact significatif sur la formation des polluants, qui est le principal objet de notre étude.

## 9.2 Point de fonctionnement étudié

La configuration TLC a été étudiée expérimentalement pour différents régimes de vol, notamment ceux définis par le cycle Landing-Take-Off (LTO) de l'Organisation de l'Aviation Civile Internationale (OACI), qui vise à certifier les émissions polluantes produites lors des phases de vol ayant lieu autour des aéroports. Les mesures expérimentales ont été effectuées pour trois des points de fonctionnement du cycle (approche, taxi, montée, voir [23]) ainsi que pour le point correspondant au régime de croisière. Le point de fonctionnement présentant le plus de résultats expérimentaux, notamment en terme de profils de température est le régime d'approche. C'est donc ce point qui a été retenu pour le travail effectué dans cette partie.

Le régime d'approche du cycle LTO correspond à une poussée fournie par le moteur égale à 30 % de sa poussée maximale. Les paramètres d'injection et les conditions dans la chambre correspondant à ce régime sont listés dans le tableau 9.1.

Pression	9,5 bar
Richesse globale	0,264
Débit d'air	$0,717 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$
Température d'admission de l'air	592 K
Débit de carburant	$12,868 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$
Répartition atomiseur - système multi-points (débit carburant)	50 % - 50 %
Température d'admission du carburant	300 K

TABLE 9.1 – Caractéristiques d'injection et conditions au sein de la chambre TLC au point de fonctionnement « approche ».

### 9.3 Mesures expérimentales

Les différents résultats expérimentaux disponibles pour le point de fonctionnement étudié (régime d'approche) sont présentés dans ce qui suit <sup>1</sup>.

#### Profils de température au sein du foyer

Les niveaux de température dans la chambre ont été caractérisés au moyen de la technique de mesure CARS (Coherent Anti-Stokes Raman Scattering), qui est une technique optique, donc non intrusive [38]. Ces mesures ont permis d'obtenir quatre profils de température. La position des points formant ces profils est indiquée sur la figure 9.3. On peut voir que les profils ne couvrent qu'une portion limitée de la hauteur de la chambre, ce qui est dû à la taille des hublots du dispositif expérimental. La précision des mesures CARS est une fonction décroissante de la température. Elle est de 5 % à 300 K, atteint 3 % à 1700 K, puis reste pour des températures plus élevées.

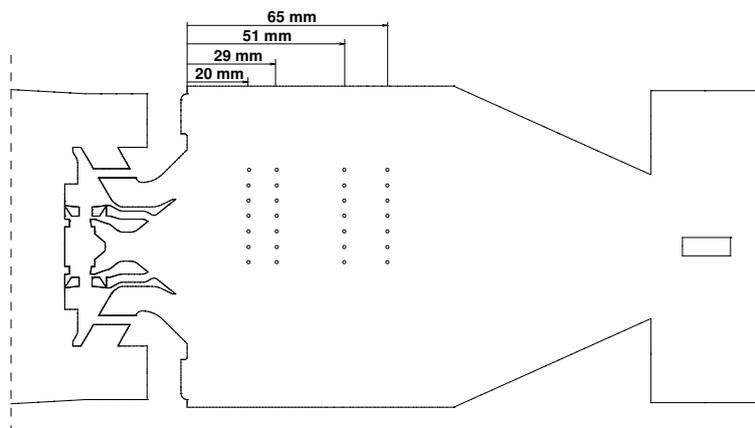


FIGURE 9.3 – Position, dans le plan médian de la chambre, des profils de mesure CARS. Les symboles représentent la position des points de mesures pour chaque profil.

#### Champ de radical OH et de vapeur de kérosène

Les champs de concentration de radical OH et de vapeur de kérosène ont été déterminés au moyen de mesures utilisant la technique PLIF (Planar Laser Induced Fluorescence) [73, 74, 75]. La vapeur de kérosène a été détectée par l'intermédiaire d'une espèce aromatique représentative de ce carburant. Les mesures du radical OH et de l'espèce aromatique ont été effectuées simultanément et répétées dans différents plans de la chambre (médian et transversaux) comme le montre la figure 9.4.

#### Fraction volumique de suie au sein du foyer et en sortie de chambre

Le champ de fraction volumique de suie a été caractérisé dans le plan médian de la chambre à l'aide de mesures LII (Laser Induced Incandescence) [33]. Des mesures de classification des particules ont également été réalisées en sortie de chambre permettant de caractériser leur taille et leur nombre.

#### Mesures de concentration en sortie de chambre

Une analyse de la composition des gaz en sortie de chambre a été effectuée au moyen de prélèvements de gaz au niveau du bras de mesure, en différentes positions par rapport à l'axe de révolution de l'injecteur :  $-48$  mm,  $-38$  mm,  $-25$  mm,  $0$  mm,  $32$  mm,  $43$  mm. Ces analyses ont permis de déterminer des profils de concentration de  $\text{NO}_x$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{CO}$ , et d'imbrûlés. A partir des analyses de gaz, un profil de

1. Seules les mesures sur chambre allumée sont présentées car ce sont celles qui nous intéressent pour la validation des calculs réactifs effectués. D'autres mesures ont cependant été réalisées à froid [54, 55, 56]) au centre ONERA du Fauga-Mauzac, permettant de déterminer les caractéristiques de la phase liquide dispersée en l'absence de combustion.

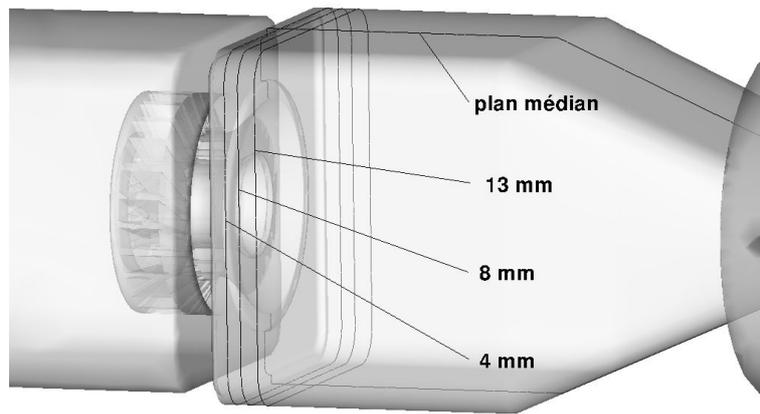


FIGURE 9.4 – Position des plans de mesure LIF dans la chambre, les distances sont données relativement au plan d'injection.

richesse a également été calculé, ainsi qu'un profil de température en faisant l'hypothèse que les gaz ont atteint la température d'équilibre en sortie de la chambre.



On présente dans la première section de ce chapitre la mise en donnée du calcul du point de fonctionnement « approche » de la configuration TLC. La simulation de ce point de fonctionnement a déjà été réalisée dans les travaux de thèse de L.-H. Dorey [23]. Excepté ce qui concerne le modèle de combustion, on reprend l'essentiel de la mise en donnée effectuée lors de ce travail. Dans les calculs qui seront décrits dans les chapitre suivants, la modélisation de la combustion est effectuée à l'aide du modèle FTC développé en première partie de ce mémoire. La mise en donnée relative à ce modèle est présentée dans la deuxième section de ce chapitre. Cette mise en données concerne aussi la modélisation de l'Interaction Chimie-Turbulence (ICT), dont plusieurs versions sont mises en œuvre dans les calculs qui seront décrits dans les chapitres suivants.

## Sommaire

<b>10.1 Maillage et mise en donnée, hors combustion</b>	<b>126</b>
10.1.1 Domaine de calcul et maillage	126
10.1.2 Stratégie de calcul	126
10.1.3 Mise en donnée du solveur CHARME pour la phase gazeuse	126
Modélisation de la turbulence	126
Conditions aux limites	127
Méthode numérique	128
10.1.4 Mise en donnée du solveur SPARTE pour la phase liquide dispersée	128
Modèles	128
Conditions aux limites	129
Relaxation des termes d'évaporation	129
<b>10.2 Modélisation FTC</b>	<b>131</b>
10.2.1 Génération de la table FTC	131
10.2.2 Modélisation de l'interaction chimie-turbulence	131
10.2.3 Couplage avec le modèle de Leung pour le calcul de la formation des suies	131
10.2.4 Extension de la table FTC pour le traitement des espèces à « chimie lente »	132
10.2.5 Choix des espèces à transporter dans CEDRE	132

## 10.1 Maillage et mise en donnée, hors combustion

### 10.1.1 Domaine de calcul et maillage

Le domaine de calcul utilisé dans la thèse de Dorey a été conservé. Les simplifications qui avaient été faites sont listées dans ce qui suit :

- Le bras d’injection du carburant n’a pas été pris en compte. L’effet de la présence du bras dans le plenum, sur l’écoulement d’air, est donc négligé.
- Des conditions limites débitantes sont directement imposées au niveau de l’injection multi-points et de l’atomiseur pour le kérosène.
- Le circuit de refroidissement n’est pas calculé. Celui-ci est composé d’un ensemble de canaux assez fins dont le maillage augmenterait considérablement le coût CPU du fait de la taille de maille nécessaire pour reproduire la perte de charge dans le circuit et donc des débits corrects pour chacun des films. Les débits d’air entrant dans la chambre au niveau de ces deux films sont donc imposés au moyen d’une condition à la limite débitante, en utilisant la répartition des débits mesurée expérimentalement.
- Certains détails technologiques tels que les chanfreins ont été négligés dans les vrilles pour ne pas générer de mailles trop petites. Leur effet sur l’écoulement est considéré comme négligeable.

Signalons également que le diamètre de col du convergent n’est pas connu de manière exacte car dans l’expérience, celui-ci est ajusté pour atteindre la pression chambre correspondant au point de fonctionnement étudié. Le diamètre de ce col est donc estimé, avec incertitude, à l’aide de corrélations.

Le maillage, contrairement à la géométrie, est différent de celui présenté dans [23] puisque Dorey a poursuivi ses travaux après sa thèse sur un maillage de 11 millions de cellules, contre 4 millions auparavant. C’est ce maillage plus fin qui a été utilisé pour réaliser les calculs présentés dans ce mémoire. Une visualisation de celui-ci est proposée sur la figure 10.1. On remarque le raffinement du maillage dans les vrilles de l’injecteur et dans la zone de réaction, où l’on trouve les plus petites échelles de l’écoulement. La taille caractéristique de maille au niveau de la zone de réaction est de  $250\ \mu\text{m}$ , et elle varie de  $150\ \mu\text{m}$  à  $300\ \mu\text{m}$  dans les vrilles de l’injecteur, au niveau de la paroi.

### 10.1.2 Stratégie de calcul

Les calculs ont été effectués à l’aide de deux solveurs de la chaîne CEDRE. L’un, CHARME traite la phase gazeuse, l’autre, SPARTE traite la phase liquide dispersée. Ces solveurs sont présentés en annexe A. Dorey a montré dans ses travaux que, du fait de la réabsorption du rayonnement par le gaz et de l’écart important entre la puissance radiative totale et le dégagement de chaleur, les transferts radiatifs ont un impact négligeable sur la température de l’écoulement. Ils ont en revanche un effet important sur les flux pariétaux, mais dans le cadre des calculs présentés ici, on ne s’intéresse pas à leur prédiction. Pour les calculs de polluants qui nous intéressent, seule l’obtention d’une température correcte est nécessaire. C’est pourquoi on ne prend pas en compte le rayonnement au moyen d’un troisième solveur comme cela a été fait dans [23]. Le pas de temps de la simulation a été fixé à  $5.10^{-7}\ \text{s}$  dans les deux solveurs CHARME et SPARTE. La même valeur a été utilisée pour la durée du cycle de couplage. Les échanges entre solveurs se font donc à chaque itération.

### 10.1.3 Mise en donnée du solveur CHARME pour la phase gazeuse

#### Modélisation de la turbulence

Le modèle de Smagorinsky (voir section A.1 de l’annexe A) est utilisé pour modéliser l’action des structures turbulentes sous l’échelle de la maille sur les structures résolues. Une valeur de 0,18 a été utilisée pour la constante  $C_s$  du modèle. Pour modéliser la couche limite qui n’est pas suffisamment résolue par le maillage, on utilise une loi de paroi [5, 72] qui permet de modéliser le coefficient de frottement et le flux de chaleur pariétal d’une couche limite attachée. Enfin, un nombre de Schmidt turbulent de 0,9 a été utilisé pour les flux de diffusion turbulents des espèces (voir section A.1 de l’annexe A).

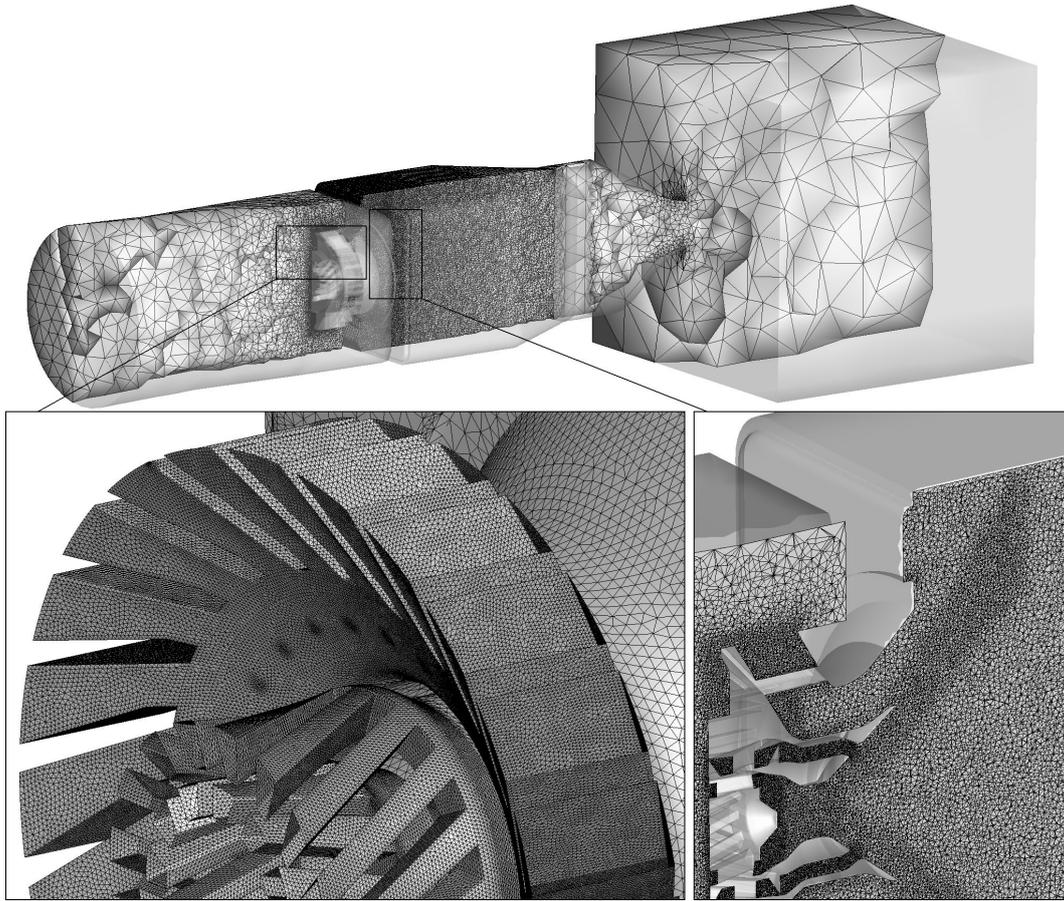


FIGURE 10.1 – Visualisation du maillage de la configuration TLC.

### Conditions aux limites

L'air est injecté au moyen de trois conditions à la limite de type débit entrant subsonique. L'injection principale (67,6 % du débit d'air total) se situe en entrée du plenum. Le débit injecté correspond au débit d'air total du point de fonctionnement auquel on a retranché le débit qui est normalement prélevé dans le plenum pour alimenter les films de refroidissement (alimentation qui, rappelons le, n'est pas calculée). Les deux autres conditions aux limites pour l'air entrant sont situées dans la chambre de combustion. Deux surfaces débitantes sont utilisées, l'une pour le film situé au niveau de la collerette (3,8 % du débit d'air total), et l'autre pour le film refroidissant les parois latérales (28,6 % du débit d'air total).

Les parois latérales de la chambre sont modélisées par une condition à la limite de type paroi adhérente à température imposée. En l'absence de mesure expérimentale de la température des parois, une valeur de 700 K a été retenue par Dorey. Cette condition à la limite est plus réaliste qu'une condition à la limite adiabatique, qui conduit à une température du gaz au contact de la paroi incompatible avec la tenue thermique du matériau solide. Notons également que la condition à la limite de type paroi adhérente est imposée avec une rugosité nulle.

Les autres parois de la géométrie de calcul sont modélisées avec une condition aux limites de type paroi adhérente adiabatique.

Une condition à la limite de type pression imposée est utilisée en sortie du domaine de calcul, en aval du col sonique amorcé. La valeur imposée correspond aux conditions ambiantes (101 325 Pa). En cas de recirculation de l'écoulement au niveau de la limite, la composition des gaz entrants est inconnue dans le calcul. Pour contourner ce problème, une option de réactualisation est utilisée, permettant de fixer l'état des gaz entrant au niveau de la limite. On choisit ici d'imposer un état correspondant à de l'air pur ayant une température de 1200 K, et une vitesse de  $10 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ . Un récapitulatif des conditions aux limites utilisées est présenté dans le tableau 10.1.

Élément modélisé	Type de condition limite
Entrée d'air du plénum	Débit subsonique
Température	592 K
Débit	$0,485 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$
Composition	$Y_{\text{N}_2} = 0,767; Y_{\text{O}_2} = 0,233$
Film de refroidissement - parois latérales de la chambre	Débit subsonique
Température	592 K
Débit	$0,205 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$
Composition	$Y_{\text{N}_2} = 0,767; Y_{\text{O}_2} = 0,233$
Film de refroidissement - colerette	Débit subsonique
Température	592 K
Débit	$0,027 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$
Composition	$Y_{\text{N}_2} = 0,767; Y_{\text{O}_2} = 0,233$
Parois latérales de la chambre	Paroi adhérente à température imposée
Température de paroi	700 K
Autres parois	Paroi adhérente adiabatique

TABLE 10.1 – Conditions aux limites utilisées dans le solveur CHARME.

## Méthode numérique

Les calculs de la configuration TLC ont été réalisés avec un schéma de flux HLLC [99], et une discrétisation d'ordre 2 en espace utilisant une procédure de limitation du gradient au niveau des faces [19]. Un schéma implicite d'ordre 1 en temps a été utilisé compte tenu de la raideur de certains termes sources chimiques. Le pas de temps utilisé est de  $5 \cdot 10^{-7}$  s. Cette valeur est suffisamment faible pour que l'erreur d'ordre 1 du schéma en temps n'impacte pas significativement les calculs. De plus, il a été constaté, lors de calculs effectués pour tester la mise en donnée, qu'un pas de temps plus élevé conduisait à une divergence de la méthode numérique, malgré l'implicitation en temps.

### 10.1.4 Mise en donnée du solveur SPARTE pour la phase liquide dispersée

#### Modèles

Les modèles utilisés dans SPARTE pour traiter le chauffage, l'évaporation et la force de traînée s'exerçant sur le gaz sont présentés dans la section A.2 de l'annexe A. On récapitule ici les modèles choisis pour le calcul de la configuration TLC. Le coefficient de la force de traînée est calculé au moyen de la loi de Schiller-Naumann. Pour calculer les transferts thermiques entre les gouttes et le gaz environnant, une hypothèse de conduction infinie est utilisée, et le nombre de Nusselt est évalué

à l'aide d'une corrélation de Ranz-Marshall. Le nombre de Sherwood intervenant dans le calcul des transferts thermiques gaz-goutte, et dans la vitesse de régression des gouttes est également évalué suivant une corrélation de Ranz-Marshall. La fragmentation secondaire n'a pas été prise en compte dans le calcul, car Dorey a constaté que sa modélisation entraînait des instabilités lors du calcul de la configuration TLC en régime approche (régime retenu pour cette étude) [23].

## Conditions aux limites

Les parois de la chambre sont modélisées à l'aide d'une condition à la limite d'interaction complexe à température imposée (voir section A.2). De la même façon que dans CHARME, on impose une température estimée à 700 K, en l'absence de données expérimentales. Une rugosité de 0 est imposée, ce qui correspond à une paroi lisse.

Les parois de l'injecteur sont modélisées avec une condition aux limites de type paroi avec rebond (voir section A.2). L'angle de rebond est compris entre  $1^\circ$  et  $2^\circ$ , la restitution énergétique est fixée à 10 %. Cette direction de rebond quasiment parallèle à la paroi a été retenue par Dorey [23] car elle offre une manière simple et robuste, bien que rudimentaire, de représenter la formation d'un film liquide sur la paroi.

Le kérosène est injecté par l'intermédiaire de deux conditions aux limites différentes. L'une concerne la modélisation du système multi-points qui alimente l'étage de vrilles principal, la seconde celle de l'atomiseur qui alimente la zone pilote. Dans le régime d'approche, le débit d'injection du kérosène est réparti à parts égales entre les deux systèmes d'injection, soit un débit de  $6,434 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$  par système.

L'atomiseur est un injecteur pressurisé de type simplex produisant un spray en forme de cône creux. La nappe liquide créée en sortie d'injecteur est très vite atomisée, et n'est pas prise en compte dans le calcul en tant que telle. La modélisation de l'atomisation primaire est encore très coûteuse, et la connaissance des caractéristiques du dard liquide créé par l'atomiseur est trop incomplète pour mettre en place ce type de modélisation. Le kérosène est donc injecté directement sous forme d'un spray de gouttes. Les gouttes sont injectées à l'aide d'injecteurs ponctuels (voir section A.2 de l'annexe A), au nombre de 100, réparties le long d'un anneau de 0,5 mm de diamètre situé dans le plan d'injection de l'atomiseur. La direction d'injection est donnée de façon à reproduire un demi-angle de spray de  $30^\circ$ , tel que celui créé par l'atomiseur. La vitesse d'injection est définie en fonction du débit de carburant de l'atomiseur et de la surface débitante (voir [23]). Le diamètre moyen des gouttes a été estimé à  $15 \mu\text{m}$  à partir des mesures de granulométrie effectuées à froid au centre ONERA du Fauga-Mauzac. La dispersion en taille des gouttes dans le spray n'a pas été prise en compte, car cette donnée n'est pas connue, n'ayant pas été déterminée expérimentalement.

Le système multi-points est composé de 24 orifices de 0,5 mm de diamètre. Celui-ci est modélisé à l'aide de conditions limites de type surface débitante (voir section A.2), une pour chaque orifice. Les gouttes de carburant sont injectées au niveau de ces 24 surfaces débitantes, avec une taille estimée à  $25 \mu\text{m}$  à partir des mesures de granulométrie. Elles sont injectées dans la direction de la normale à la surface débitante, avec une vitesse estimée à partir du débit et de la surface de chaque orifice.

La température du kérosène est de 300 K en entrée du bras d'injection, puis celui-ci se réchauffe avant d'arriver à l'injecteur du fait des échanges thermiques avec l'air plus chaud du plénum. Dorey [23] a estimé les échanges thermiques pariétaux le long des différentes conduites du bras d'injection à l'aide de corrélations, ce qui lui a permis d'obtenir une estimation de la température du kérosène au niveau du système multipoints et de l'atomiseur central. Les températures d'injection du kérosène obtenues pour chacun des systèmes d'injection sont données dans le tableau 10.2, qui récapitule l'ensemble des conditions aux limites utilisées dans le solveur SPARTE.

## Relaxation des termes d'évaporation

Les temps caractéristiques de l'évolution du gaz environnant et de l'évaporation des gouttes de kérosène sont assez difficiles à estimer, notamment en LES. En effet, le caractère instationnaire du calcul entraîne une évolution continue des paramètres pilotant ces phénomènes. C'est pourquoi la valeur du paramètre de relaxation des termes d'évaporation (section A.2) a été fixée à 1, de façon à

Élément modélisé	Type de condition limite
Injection pilote	Injecteur ponctuel (100 injecteurs répartis en couronne)
Débit de carburant	$6,434 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ (pour les 100 injecteurs)
Diamètre des gouttes	15 $\mu\text{m}$
Vitesse d'injection axiale	$37,67 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
Vitesse d'injection radiale	$21,75 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
Intervalle de temps d'injection	$5 \cdot 10^{-7} \text{ s}$
Injection multipoint	Surface débitante (1 par orifice)
Débit de carburant	$6,434 \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ (pour les 24 orifices)
Diamètre des gouttes	25 $\mu\text{m}$
Vitesse d'injection normale	$1,82 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
Intervalle de temps d'injection	$5 \cdot 10^{-7} \text{ s}$
Nombre de goutte injectées par intervalle	12
Parois de la chambre	Paroi avec interaction complexe
Température de paroi	700 K
Rugosité	0 m
Parois de l'injecteur	Paroi avec rebond
Angle de rebond minimum	1°
Angle de rebond maximum	2°
Coefficient de restitution énergétique	10 %

TABLE 10.2 – Conditions aux limites utilisées dans le solveur SPARTE (les différents types de condition limites sont décrits à la section A.2).

annuler toute relaxation, ce qui assure que le couplage respecte les temps caractéristiques du problème. On fait l'hypothèse que ce choix n'entraîne pas d'oscillations de la solution qui soient prépondérantes devant les fluctuations de l'écoulement instationnaire, supposant ainsi que l'évaluation des grandeurs RMS ne sera pas perturbée.

## 10.2 Modélisation FTC

### 10.2.1 Génération de la table FTC

La mise en donnée du modèle FTC de CEDRE consiste principalement à sélectionner une table chimique appropriée aux conditions du calcul ainsi qu'une modélisation de la turbulence. Concernant le choix de la table, il a été montré dans la première partie de ce mémoire que le modèle FTC pouvait être utilisé avec une table basée sur des flammes prémélangées, ou sur des flammes de diffusion. Les calculs de Dorey [23] montrent la présence des deux régimes dans la zone de flamme, ce qui implique qu'aucun des types de table n'est parfaitement adapté pour l'ensemble de la zone réactive. Les développements présentés en première partie de ce mémoire concernant la modélisation des  $\text{NO}_x$  et de l'interaction chimie-turbulence ont été validés sur des cas prémélangés. Le couplage du modèle FTC avec le modèle de Leung pour les suies a été validé sur flamme de diffusion dans ce mémoire, mais avait déjà été validé sur flamme prémélangée dans les travaux de Dorey [24]. Par conséquent, le choix d'une table de type prémélange semble présenter plus de garanties concernant la robustesse du calcul puisque c'est ce régime qui a fait l'objet du plus grand nombre de validations dans des situations que l'on peut rapprocher de celle qui est traitée dans ce chapitre. C'est donc une table de type prémélange qui a été retenue pour les calculs de la configuration TLC présentés. On rappelle que les travaux du chapitre 5 ont montré que l'on peut utiliser une table de type monophasique pour traiter la combustion diphasique. Pour générer cette table, il est nécessaire de déterminer la température initiale du mélange d'air et de vapeur de carburant. Compte tenu du faible débit de carburant par rapport au débit d'air, on néglige l'effet du chauffage et de l'évaporation des gouttes sur la température de ce mélange. Par conséquent, la table a été générée pour une température de gaz frais de 592 K, soit celle de l'air injecté. La pression a été fixée à 9,5 bar ce qui correspond à la pression dans la chambre de combustion. Une discrétisation comportant 150 points selon  $Z$  et 100 points selon  $c$  a été utilisée pour le stockage des solutions dans la table.

On rappelle que la table utilisée ne prend pas en compte d'éventuelles pertes thermiques. Cette limitation est compatible avec la simulation du foyer TLC puisque comme on l'a dit précédemment, l'effet du rayonnement sur la température locale de l'écoulement et des échanges thermiques avec les gouttes est faible et qu'il n'y a pas au sein du foyer TLC d'autres sources de pertes thermiques dans la zone de réactions chimiques où s'applique le modèle FTC.

### 10.2.2 Modélisation de l'interaction chimie-turbulence

Concernant la modélisation de l'interaction chimie-turbulence, plusieurs calculs ont été réalisés afin de comparer différentes approches. Un premier calcul a été effectué sans modélisation de l'interaction chimie-turbulence. Un second calcul a été réalisé avec l'approche « flamme épaissie » et un troisième calcul a été fait avec les approches couplées « flamme épaissie » et  $\beta$ -PDF pour  $Z$ . Concernant l'approche « flamme épaissie », utilisée seule ou combinée avec l'approche  $\beta$ -PDF, on a retenu les options de modélisation suivantes : la limite supérieure du facteur d'épaississement maximum  $\mathcal{F}^{max}$  a été fixée à  $60^1$  ce qui correspond à la valeur utilisée par Dorey [23] pour la simulation du foyer TLC avec une cinétique chimique utilisée conjointement avec l'approche « flamme épaissie ». La fonction d'efficacité utilisée est celle de Charlette (6.10), dans laquelle la valeur de  $\beta$  est fixée à 0,5. Pour le calcul combinant « flamme épaissie » et  $\beta$ -PDF, un nombre de 10 points a été retenu pour la discrétisation de la variance de la fraction de mélange  $Z_v$  dans la table FTC turbulente.

### 10.2.3 Couplage avec le modèle de Leung pour le calcul de la formation des suies

Concernant la modélisation de la formation des suies, on a utilisé le modèle de Leung couplé avec le modèle FTC tel qu'il a été présenté au chapitre 3. La richesse globale du foyer TLC correspond à un mélange relativement pauvre. On a donc supposé que les concentrations d'espèces chimiques intermédiaires étaient suffisamment faibles pour que leur contribution à l'énergie du mélange soit

---

1. On rappelle que  $\mathcal{F}^{max}$  est défini comme  $\frac{\Delta}{\delta_L^0}$ ,  $\Delta$  étant la taille de caractéristique de la maille et  $\delta_L^0$  l'épaisseur thermique de la flamme laminaire. Afin d'éviter que  $\mathcal{F}^{max}$  prenne des valeurs irréalistes dans certaines cellules, on doit limiter en pratique sa valeur maximale dans le code CEDRE.

négligeable. Cette hypothèse a permis d'utiliser la technique de couplage du modèle de Leung avec l'approche FTC consistant à extraire directement les concentrations de  $C_2H_2$  et OH dans la table. Les constantes intervenant dans la cinétique du modèle de Leung sont celles proposées par Dorey (voir tableau 3.2 du chapitre 3.)

#### 10.2.4 Extension de la table FTC pour le traitement des espèces à « chimie lente »

Pour la modélisation des  $NO_x$ , on a utilisé la méthode d'extension de la table par calculs de PFR proposée au chapitre 4. Comme indiqué dans ce dernier, il est nécessaire d'inclure la fraction massique du NO dans la variable d'avancement de façon à ce que celle-ci soit monotone en fonction de l'abscisse au sein de la flamme calculée, pour une valeur de  $Z$  déterminée, dans la table FTC étendue :

$$\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{\mathcal{M}_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{\mathcal{M}_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{\mathcal{M}_{NO}}. \quad (10.1)$$

Le NO entrant dans la formulation de  $\hat{c}$  a évidemment dû être ajouté à la liste des espèces transportées.

La valeur de  $\kappa$  a d'abord été fixée à 10, comme discuté au chapitre 4, pour les trois calculs FTC, correspondant chacun à un modèle d'interaction chimie-turbulence différent. Les résultats obtenus avec cette valeur de  $\kappa$  ont montré que celle-ci ne donnait pas un poids suffisant à l'espèce NO, dans le calcul de  $\hat{c}$ , pour que son évolution soit pilotée par son terme source tabulé plutôt que par le terme de relaxation du modèle FTC (on reviendra plus en détail sur ce point dans le chapitre portant sur l'analyse des résultats). La valeur de  $\kappa$  a donc été relevée à 100, et les trois calculs ont été repris avec cette valeur. On peut s'attendre à ce que le changement de la valeur de  $\kappa$  ne modifie le comportement du modèle FTC que dans les zones de gaz brûlés, où les niveaux de NO sont suffisants pour influencer sur la valeur de  $c$ . Par conséquent, on peut penser que le dégagement de chaleur dans la flamme ne sera pas modifié, et que la structure de l'écoulement et les niveaux de température ne sont pas affectés. Seuls les niveaux de polluants en sortie devraient être impactés dans le calcul par ce changement de valeur de  $\kappa$ .

#### 10.2.5 Choix des espèces à transporter dans CEDRE

Concernant les espèces à transporter, l'utilisation d'une espèce fictive, comme proposé au chapitre 1, n'a pas été retenue car, telle qu'elle est implémentée dans CEDRE, cette approche n'est pas compatible avec l'utilisation d'une  $\beta$ -PDF pour  $Z$  (problème évoqué au chapitre 1). Il a donc été nécessaire de procéder à une analyse énergétique telle que celle présentée en section 1.1.4 pour choisir les espèces à inclure dans le calcul CFD. En toute rigueur, il aurait été nécessaire de transporter une quinzaine d'espèces pour que l'erreur portant sur le calcul de la température du mélange soit négligeable (voir tableau 1.1 du chapitre 1). En pratique, on a limité (au NO près) le nombre d'espèces à transporter à celui utilisé par Dorey pendant sa thèse de façon à maintenir un coût CPU équivalent. Les espèces retenues pour ces trois calculs sont donc :  $C_{10}H_{22}$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $H_2O$ ,  $NO$  et  $N_2$ , cette dernière étant, en l'absence d'espèce fictive, celle associée à la conservation de la masse (voir section 1.1.4). Le fait de limiter de cette manière le nombre d'espèces transportées implique des déviations non négligeables de la température de l'écoulement, comme montré au chapitre 1. Cependant, ces déviations se produisent uniquement dans des zones de richesse élevée ( $\phi > 1,5$ ), ce qui d'après les résultats de Dorey, concerne une faible partie de l'écoulement. Ces déviations étant un phénomène local, on peut supposer que cela n'affecte pas l'ensemble du calcul. Signalons que l'on a choisi de modéliser la vapeur de kérosène par l'unique espèce  $C_{10}H_{22}$ , tandis que Luche avait proposé d'utiliser un mélange de  $C_{10}H_{22}$ ,  $C_9H_{12}$  et  $C_9H_{18}$  [60]. Des simulations de flamme de prémélange 1D ont été effectuées avec le code Cantera [37], en utilisant l'une ou l'autre de ces compositions pour le carburant. Les résultats de ces calculs montrent que les propriétés principales de la flamme (vitesse de flamme laminaire, température de gaz brûlés) obtenues avec la seule espèce  $C_{10}H_{22}$  comme carburant sont très proches de celles obtenues avec le mélange des espèces  $C_{10}H_{22}$ ,  $C_9H_{12}$  et  $C_9H_{18}$ , comme le montre la figure 10.2. Par conséquent, afin de limiter le temps CPU, on modélise la vapeur de carburant par la seule espèce  $C_{10}H_{22}$ , ce qui économise la résolution de deux équations de transport.

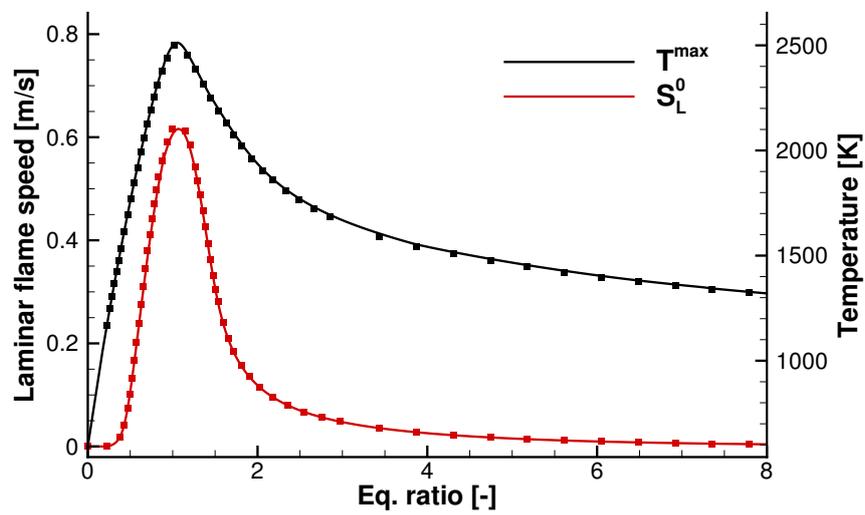


FIGURE 10.2 – Comparaison des vitesse de flamme et température de gaz brûlés obtenues pour deux compositions de carburant : traits continus, 100 % de  $C_{10}H_{22}$ , symboles, 76,7%(en masse) de  $C_{10}H_{22}$ , 13,2% de  $C_9H_{12}$ , 10,1 % de  $C_9H_{18}$ .



Une analyse des résultats de simulation du foyer TLC obtenus avec le modèle FTC, pour différentes modélisations de l'interaction chimie-turbulence, est présentée dans ce chapitre. Dans un premier temps, les caractéristiques générales de l'écoulement sont présentées : aérodynamique, structure de la phase dispersée, perte de charge du système d'injection, répartition de la richesse locale et du dégagement de chaleur. Puis, les résultats des calculs sont comparés avec différentes mesures expérimentales présentées au chapitre 9 : champ de radical OH obtenu par PLIF, profils de température au sein du foyer mesurés par CARS, champ de fraction volumique de suie obtenu par LII et concentrations de polluants (suies,  $\text{NO}_x$ , CO et imbrûlés  $\text{C}_x\text{H}_y$ ) en sortie de chambre. Pour conclure ce chapitre, la validité de la modélisation FTC pour la simulation des polluants est discutée suite aux comparaisons avec l'expérience.

## Sommaire

11.1	Aérodynamique de l'écoulement . . . . .	137
11.2	Structure de la phase dispersée . . . . .	138
11.3	Pression au sein du foyer et pertes de charge du système d'injection . .	140
11.4	Richesse locale de l'écoulement . . . . .	140
11.5	Position de la flamme dans le foyer TLC . . . . .	144
11.6	Dégagement de chaleur, et température en sortie de foyer . . . . .	145
11.7	Température de l'écoulement gazeux . . . . .	149
11.8	Comparaison avec les profils de température expérimentaux . . . . .	154
11.9	Prédictions des niveaux de suie dans la chambre . . . . .	156
11.10	Émissions de $\text{NO}_x$ . . . . .	161
11.11	Indices d'émission de CO et d'imbrûlés . . . . .	166
11.12	Effet de la valeur de $\kappa$ sur les résultats. . . . .	169
11.13	Effet du couplage des approches « PDF de $Z$ présumée » et « flamme épaisse » sur le calcul du facteur d'épaississement. . . . .	171

Plusieurs calculs ont été effectués avec différentes approches concernant la modélisation de l’interaction chimie-turbulence. La première approche a consisté à ne pas modéliser l’ICT, c’est à dire à exprimer les taux de réaction en fonction des seules fraction de mélange et variable d’avancement filtrées :  $\dot{\omega}_i = \dot{\omega}_i^{TAB}(\tilde{Z}, \tilde{c})$ . Sur les figures, on fera référence à ce calcul sous le nom « No ICT model ». La seconde approche utilise le modèle de flamme épaissie. Celui-ci consiste notamment à formuler les taux de réaction comme  $\dot{\omega}_i = \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{F}} \dot{\omega}_i^{TAB}(\tilde{Z}, \tilde{c})$ , où  $\mathcal{F}$  et  $\mathcal{E}$  sont respectivement les facteur d’épaississement et fonction d’efficacité de la méthode. Sur les figures, on fera référence à ce calcul sous le nom « Flamme épaissie » ou encore « TFLES ». La troisième approche a consisté à coupler les modèles « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée », ce qui se traduit par une modélisation des taux de réaction sous la forme  $\dot{\omega}_i = \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{F}} \dot{\omega}_i^{TAB}(\tilde{Z}, \tilde{Z}_v, \tilde{c})$ , où  $Z_v$  est la variance de la fraction de mélange  $Z$  et  $\dot{\omega}_i^{TAB}(\tilde{Z}, \tilde{Z}_v, \tilde{c})$  est le résultat de la convolution du terme  $\dot{\omega}_i^{TAB}(\tilde{Z}, \tilde{c})$  avec la PDF présumée. Sur les figures, on fera référence à ce calcul sous le nom « Flamme épaissie +  $P_\beta(Z)$  » ou encore « TFLES+  $P_\beta(Z)$  ».

Précisons que l’approche « Flamme épaissie » présentée au chapitre 6 comporte deux points de modélisation qu’il convient de distinguer. Le premier point concerne l’épaississement artificiel du front de flamme, qui permet de discrétiser correctement ce dernier lorsque l’échelle de la maille est supérieure à l’épaisseur de flamme, y compris lorsque l’écoulement est laminaire. Selon les schéma numériques de discrétisation spatiale utilisés, cet épaississement du front de flamme peut s’avérer indispensable pour assurer la stabilité du calcul. Le second aspect de l’approche « Flamme épaissie » concerne la modélisation de l’interaction chimie-turbulence au moyen d’une fonction d’efficacité  $\mathcal{E}$ . Par conséquent, une manière d’effectuer un calcul sans modélisation de interaction chimie-turbulence, serait d’utiliser l’approche « Flamme épaissie » sans fonction d’efficacité ( ce qui revient à fixer  $\mathcal{E} = 1$  en tout point du domaine ). Pour le calcul « No ICT model », nous avons préféré ici ne pas utiliser l’approche « flamme épaissie ». Le front de flamme est donc peu discrétisé, mais la stabilité du calcul est assurée pas la diffusion numérique du schéma de flux décentré utilisé (HLLC [99]).

On présente dans ce qui suit l’analyse des résultats obtenus avec la variable d’avancement définie comme  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$  avec une valeur de  $\kappa$  égale à 100. Les premiers calculs effectués avec une valeur de  $\kappa = 10$  ont entraîné une erreur très importante sur la prédiction de la concentration du NO. Ce problème sera discuté en fin de chapitre.

Signalons que certains résultats des travaux de Dorey [23], obtenus avec la cinétique à deux étapes pour le kérosène 2S\_KERO\_BFER [31], sont comparés à ceux obtenus avec FTC. Cela permet d’apporter des informations supplémentaires par rapport à la comparaison avec les mesures expérimentales.

Les calculs présentés ont été effectués sur la machine CURIE du GENCI (Grand Équipement National de Calcul Intensif) située au CEA (Commissariat à l’Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives), équipée de processeurs Intel® Sandy Bridge. Chaque calcul a été effectué sur 480 cœurs. Le coût des calculs est résumé dans le tableau 11.1. Ce coût n’inclut pas le transitoire de démarrage. Pour interpréter le temps physique simulé, on peut se référer au temps de traversée de la chambre de combustion estimé par L.-H. Dorey à  $1.10^{-2}$  s. On rappelle que le maillage utilisé comporte 11 millions de mailles.

Référence du calcul	Temps physique simulé	temps de restitution	temps CPU
No ICT Model	0,056 s	7,5 jours	251 $\mu$ s/ité. /maille
TFLES	0,051 s	7 jours	257 $\mu$ s/ité. /maille
TFLES + $P_\beta(Z)$	0,05 s	7,5 jours	280 $\mu$ s/ité. /maille

TABLE 11.1 – Temps de calcul des simulations du foyer TLC avec le modèle FTC

## 11.1 Aérodynamique de l'écoulement

La figure 11.1 montre une visualisation de l'écoulement moyen, représenté par un champ de vecteurs vitesse dans le plan médian de la chambre. On observe l'accélération de l'écoulement au passage des vrilles, ainsi que la présence d'une large zone de recirculation, qui permet de stabiliser la flamme par un apport d'énergie à la zone de réaction par les gaz brûlés. La figure 11.2 montre les principales lignes de courants colorées en fonction de l'étage de vrilles qu'elles traversent. On voit nettement le contournement de la zone de recirculation par ces lignes de courant. Sur différents plans de coupe représentés, on remarque que les lignes de courant issues des étages interne (en bleu) et externe (en rouge) de vrilles axiales, alimentant la zone pilote, sont très rapidement positionnées à la même distance à l'axe (dès le deuxième plan de coupe), traduisant un mélange rapide des flux d'air provenant de ces deux étages de vrilles. En revanche, les lignes de courant issues de l'étage de vrilles radiales (en vert) ne se mêlent pas avec les autres lignes de courant, mais les contournent. Par conséquent, les échanges entre l'écoulement issu de l'étage principal et celui issu de l'étage pilote ne se font qu'au travers des structures turbulentes.

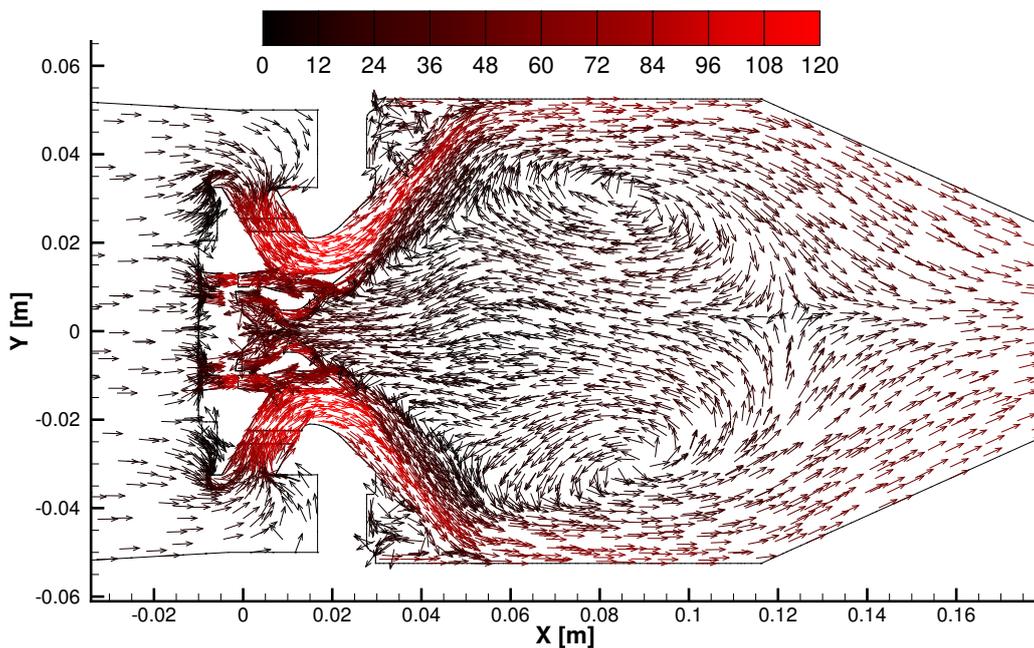


FIGURE 11.1 – Visualisation des vecteurs de vitesse moyenne dans le plan médian du foyer TLC, colorés par la norme de la vitesse moyenne en  $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$  (incluant sa composante normale au plan).

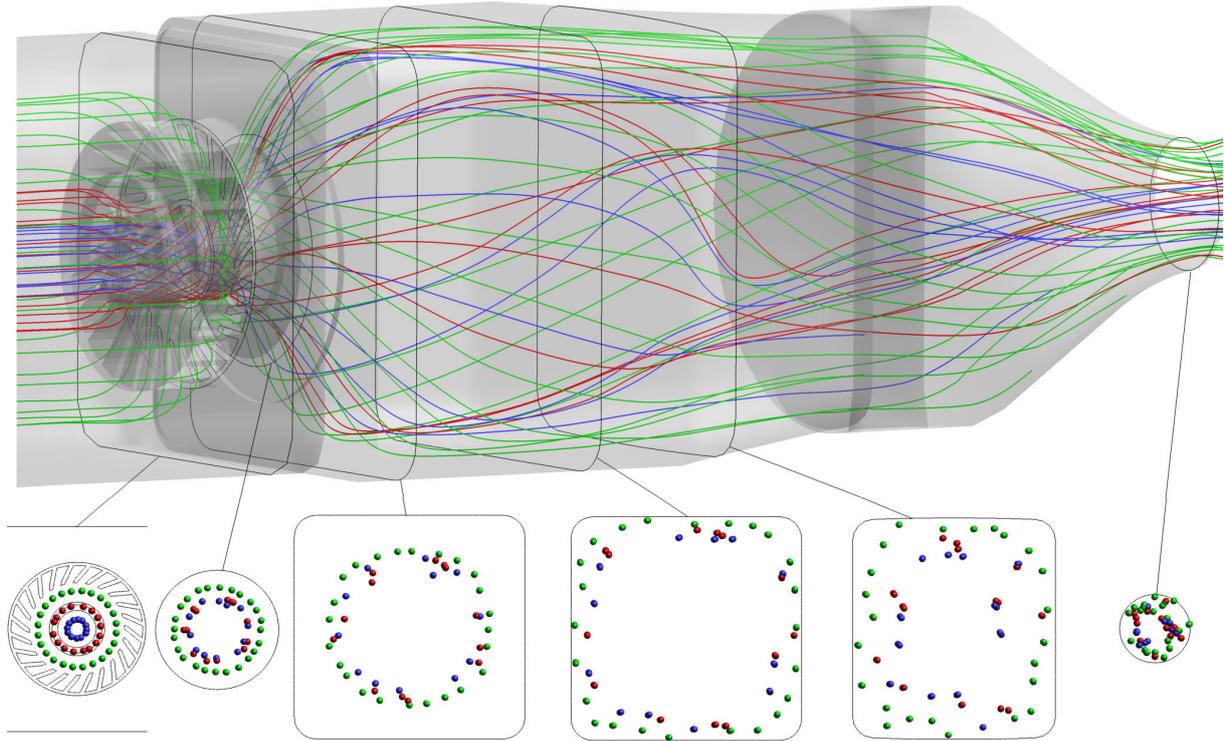


FIGURE 11.2 – Lignes de courant principales de l'écoulement moyen au sein de la chambre TLC. En rouge : lignes de courant traversant l'étage interne de vrilles axiales (zone pilote) ; en bleu : lignes de courant traversant l'étage externe de vrilles axiales (zone pilote) ; en vert : lignes de courant traversant l'étage principal (vrilles radiales, zone multipoint). Calcul réalisé avec  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$ ,  $\kappa = 100$  et les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

## 11.2 Structure de la phase dispersée

Un champ instantané de gouttes de carburant est représenté sur la figure 11.3. On voit nettement que les gouttes injectées par le système multi-points sont entraînées par la rotation de l'écoulement gazeux issu de l'étage principal, tandis que les gouttes injectées dans la zone pilote ont une trajectoire beaucoup plus chaotique, que l'on peut attribuer à l'interaction des écoulements contrarotatifs issus des vrilles axiales. La cohérence des jets de gouttes créés par le système multi-points est peut-être surestimée du fait que l'on n'utilise pas de modèle de dispersion turbulente dans le solveur SPARTE traitant la phase dispersée (le solveur possède un modèle de dispersion turbulente adapté au RANS et non à la LES). Les gouttes représentées sur la figure 11.3 ont été colorées en fonction de leur diamètre, à gauche, et de leur température (uniforme dans chaque goutte), à droite. On constate que ces dernières se réchauffent très rapidement, puisqu'en sortie du bol de l'injecteur, leur température a augmenté de 100 K. Ce réchauffement rapide permet à l'évaporation de commencer dans les vrilles. Ainsi, la majorité des gouttes injectées par le système multi-points avec un diamètre initial de 25  $\mu\text{m}$  voient leur taille décroître à 14  $\mu\text{m}$  en sortie du bol de l'injecteur. Malgré cela, une partie des gouttes atteint les parois de la chambre, ce qui signifie qu'elles ne sont pas toutes évaporées avant d'arriver sur la zone de flamme (représentée dans les pages suivantes), et qu'une partie traverse la flamme pour aller impacter les parois. L'évaporation de gouttes tout au long de la flamme entraîne naturellement une variation de la richesse locale dans cette dernière.

La figure 11.4 montre la fraction volumique de carburant liquide dans le plan médian. On constate que celle-ci atteint des valeurs supérieures à 1 % près de l'injection pilote, ce qui remet fortement en cause la validité des modèles établis avec une hypothèse de phase dispersée très diluée dans cette zone. Comme on l'a indiqué précédemment, pour remédier à ce problème, il faudrait mettre en place une

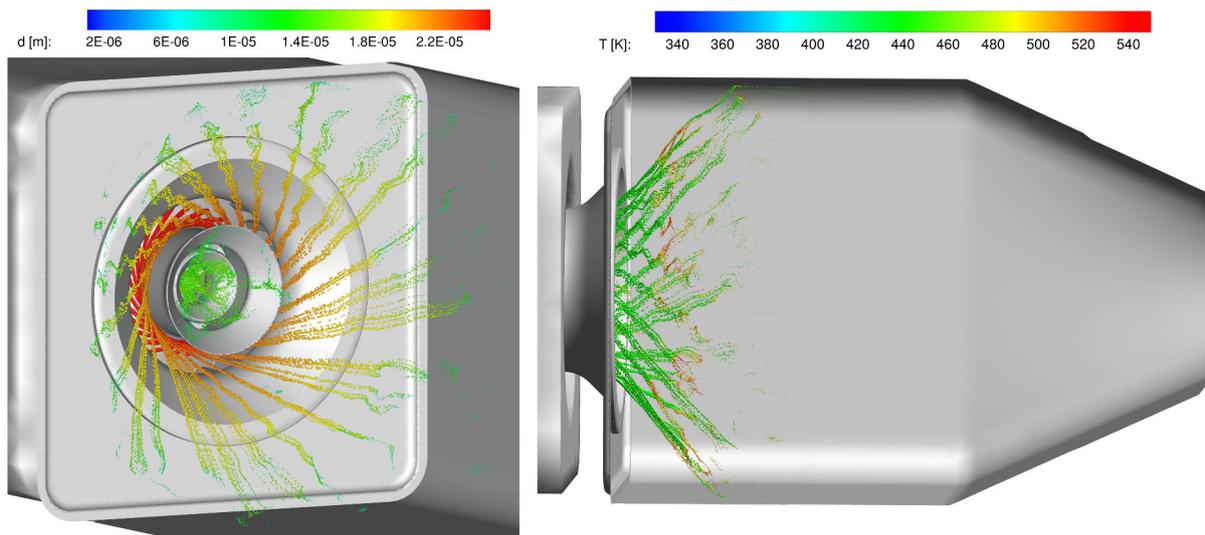


FIGURE 11.3 – Champ instantané de gouttes de carburant (une goutte numérique sur vingt est représentée), colorées par leur diamètre, à gauche, et par leur température (uniforme dans chaque goutte), à droite. Calcul réalisé avec  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{\mathcal{M}_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{\mathcal{M}_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{\mathcal{M}_{\text{NO}}}$ ,  $\kappa = 100$  et les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » couplées pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

modélisation du dard liquide et de l'atomisation primaire qui sont actuellement trop coûteuses pour l'application traitée. Concernant les calculs présentés ici, l'étendue de la zone dans laquelle la fraction volumique de liquide dépasse 1 % est relativement faible, et l'on suppose que cela n'altère pas le calcul dans les autres zones de l'écoulement. On s'est par exemple assuré que le débit moyen de carburant évaporé dans la chambre correspondait bien au débit de carburant liquide imposé aux limites.

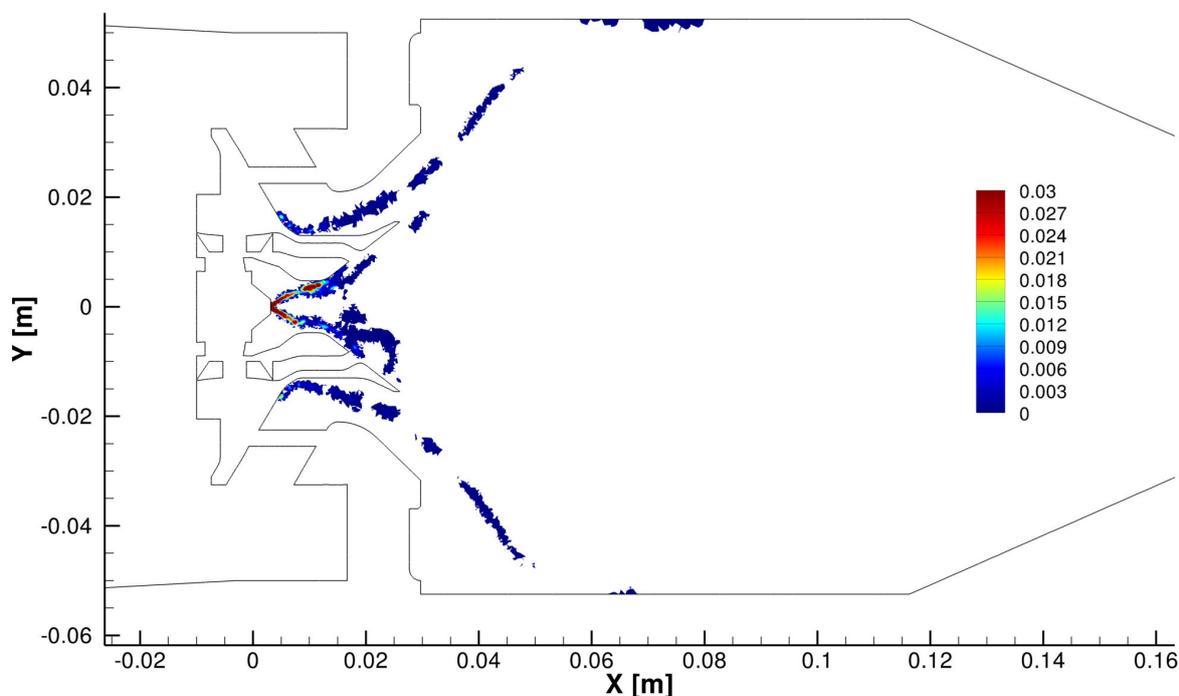


FIGURE 11.4 – Champ instantané de fraction volumique de carburant liquide. Calcul réalisé avec  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{\mathcal{M}_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{\mathcal{M}_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{\mathcal{M}_{\text{NO}}}$ ,  $\kappa = 100$  et les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

### 11.3 Pression au sein du foyer et pertes de charge du système d'injection

Une première validation du calcul peut être faite à partir des valeurs de pression obtenues dans le plenum et dans la chambre de combustion. Celles-ci permettent de valider deux points importants de la simulation. Le premier concerne la perte de charge du système d'injection, qui a été caractérisée expérimentalement. La reproduction par le calcul de cette perte de charge nécessite de modéliser correctement le frottement en paroi dans les vrilles du système d'injection. Cela permet de déterminer si le maillage de cette partie du domaine de calcul et les lois de parois utilisées sont adaptées à la modélisation de l'aérodynamique de l'écoulement dans le système d'injection. Le second point de validation concerne la pression atteinte dans le plenum. En effet, on a indiqué dans le chapitre précédent que le diamètre du col sonique n'était pas connu précisément dans l'expérience et que celui-ci était par conséquent déterminé à l'aide de corrélations afin de générer la géométrie utilisée dans les simulations. L'obtention par le calcul CFD d'une pression dans le plenum identique à celle du point de fonctionnement étudié permet donc de valider le diamètre du col imposé dans les calculs. La pression dans le plenum et la perte de charge du système d'injection obtenues dans les simulations et dans l'expérience sont retranscrites dans le tableau 11.2. La pression obtenue dans le plenum avec les différents calculs est inférieure de 1 % à la pression du point de fonctionnement (9,5 bar). L'erreur sur la prédiction de la perte de charge du système d'injection est de 0,14 bar, ce qui représente 1,5 % de la pression dans le plenum. Ces erreurs sont tout à fait acceptables et permettent de valider le diamètre de col imposé, ainsi que la modélisation de l'aérodynamique dans les vrilles de l'injecteur.

	Expérience	Simulation, $\kappa = 100$		
		No ICT model	TFLES	TFLES + $P_\beta(Z)$
Pression dans le plenum [bar]	9,45	9,4	9,36	9,4
Perte de charge du système d'injection [bar]	0,43	0,29	0,28	0,29

TABLE 11.2 – Comparaison des pression et perte de charge obtenues dans les calculs FTC avec les pressions mesurées expérimentalement.

### 11.4 Richesse locale de l'écoulement

Le champ de richesse locale de l'écoulement moyen obtenu avec le modèle FTC associé aux différentes approches retenues pour la modélisation de l'interaction chime-turbulence est présenté sur la figure 11.5. Hormis le fait que la richesse maximale est légèrement supérieure dans le cas où l'interaction chimie-turbulence (ICT) n'est pas modélisée, les champs obtenus sont très proches. Le fait d'avoir, près de l'injection, un niveau de richesse plus élevé sans modèle d'ICT, signifie que l'évaporation des gouttes injectées par l'atomiseur est plus rapide dans ce calcul, ce qui peut s'expliquer par une température localement plus élevée. Il se trouve que la flamme, représentée sur la figure 11.5 par une ligne d'iso-intensité des réactions, remonte dans le cas « No ICT model » jusqu'au nez de l'injection pilote, ce qui n'est pas réaliste. La flamme, en remontant jusqu'à la paroi, entraîne donc une élévation excessive de la température près du nez du pilote, accélérant dans le même temps la vitesse d'évaporation des gouttes. Le fait que la flamme remonte jusqu'à la paroi plutôt que d'être légèrement liftée est caractéristique d'une mauvaise évaluation de la vitesse de flamme, ce qui n'est pas surprenant dans un calcul sans modélisation de l'interaction chimie-turbulence. Quoi qu'il en soit, les profils de richesse obtenus avec les différents modèles d'interaction chimie-turbulence en sortie de la chambre de combustion, au niveau du bras de prélèvement des gaz, sont quasiment superposés, comme le montre la figure 11.6. Sur la partie gauche de cette figure, l'allure globale des profils de richesse extraits des

simulations reproduit assez bien celle qui a été obtenue expérimentalement. La dissymétrie du profil de richesse observée expérimentalement n'est en revanche pas reproduite dans le calcul. Il peut s'agir d'une dissymétrie de l'écoulement induite par le bras d'injection du carburant situé dans le plenum, bras qui n'a pas été pris en compte dans le calcul. Le faible nombre de points du profil de richesse ne permet pas cependant d'écarter une erreur de mesure responsable de cette dissymétrie. Par ailleurs, les niveaux de richesse semblent surestimés dans le calcul. La richesse moyenne dans le plan de sortie de la chambre obtenue dans les calculs est pourtant en accord avec la richesse globale du foyer. L'écart des résultats de calcul avec les mesures expérimentales peut s'expliquer :

- soit par une évaporation des gouttes qui ne serait pas complète dans l'expérience, ce qui semble assez peu probable compte tenu des températures mises en jeu ;
- soit par une mauvaise prédiction de l'aérodynamique en sortie de chambre, conduisant à une surestimation de la richesse au niveau du bras de mesure et par conséquent, à une sous-estimation de celle-ci dans le reste de la section (on peut voir sur la figure 11.7 que le calcul prédit des richesses beaucoup plus élevées le long de la ligne  $Y = 0$  qui correspond à la position du bras de mesure) ;
- soit par une erreur commise lors de la détermination expérimentale de la richesse à partir des analyses de gaz.

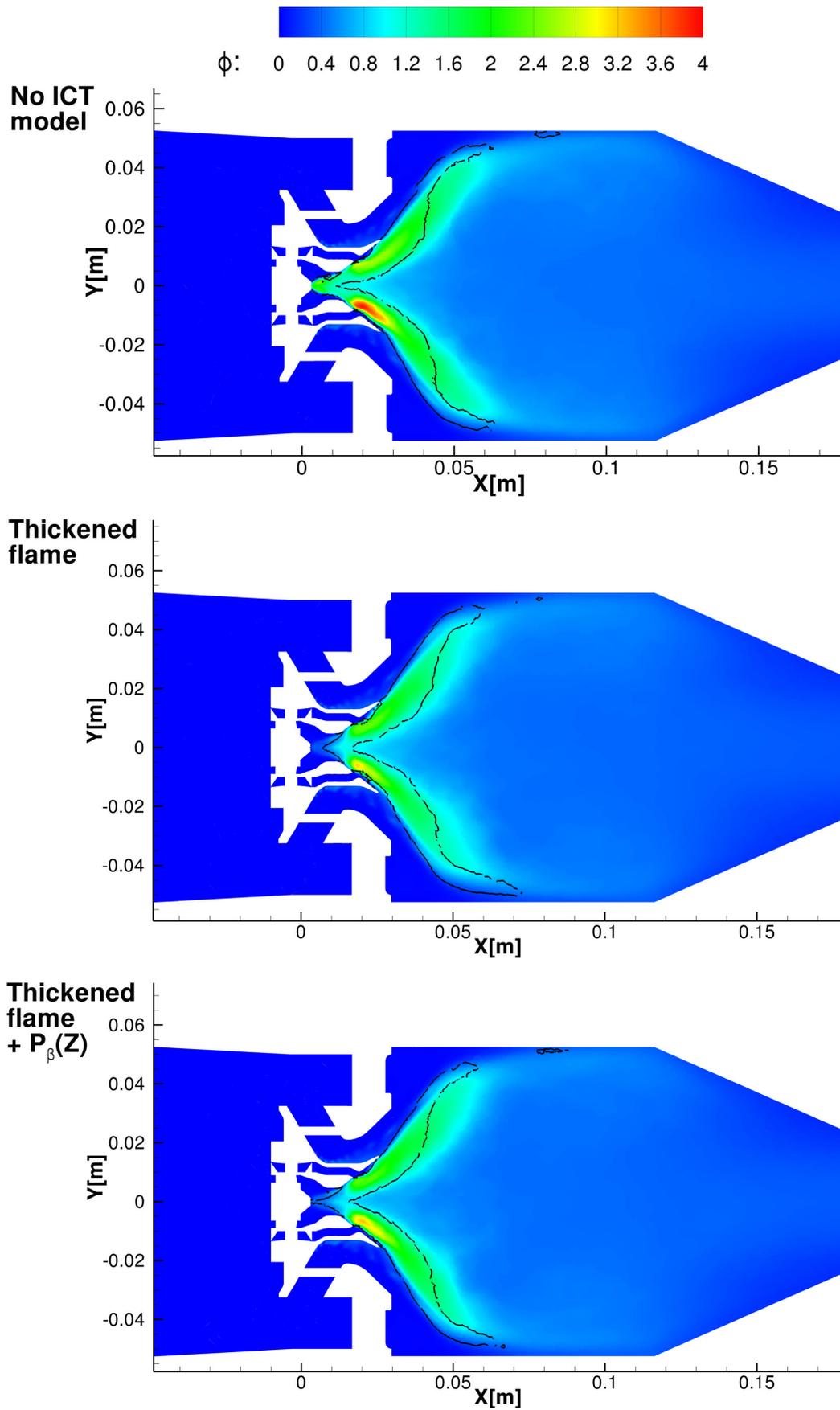


FIGURE 11.5 – Champ moyen de richesse locale dans le plan médian de la chambre et iso-ligne d'intensité des réaction  $\sum_i \max(0, \dot{\omega}_i) = 200 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ . Calcul réalisé avec  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{\mathcal{M}_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{\mathcal{M}_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{\mathcal{M}_{\text{NO}}}$ ,  $\kappa = 100$  et différentes approches pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

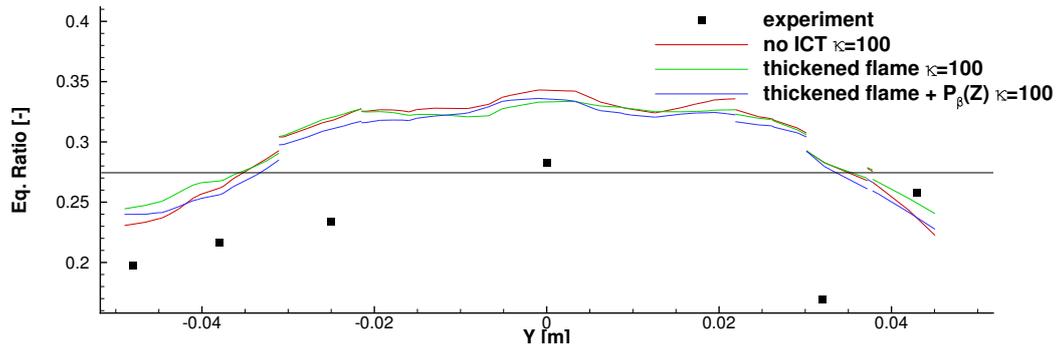


FIGURE 11.6 – Profil de richesse locale en sortie de chambre de combustion (au niveau du bras de prélèvement des gaz). Calculs réalisés avec  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$ ,  $\kappa = 100$  et différentes approches pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence. La ligne noire horizontale représente la richesse globale du foyer. *Les discontinuités des profils sont dues à un problème de post-traitement lié au découpage du domaine de calcul pour la parallélisation. En aucun cas ces discontinuités n'apparaissent dans les solutions obtenues avec le code CEDRE.*

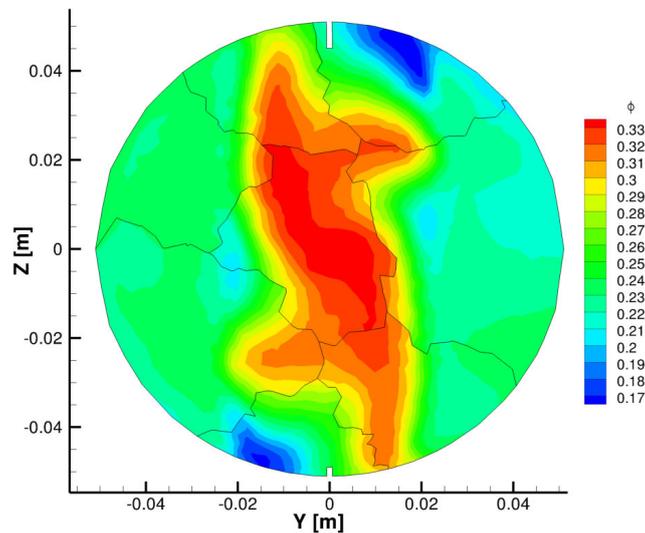


FIGURE 11.7 – Champ moyen de richesse locale dans le plan de sortie de la chambre (au niveau du bras de mesure). Calcul réalisé avec  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$ ,  $\kappa = 100$  et les approches « flamme épaissie » et « PDF de Z présumée » pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence. *Les discontinuités du champs sont dues à un problème de post-traitement lié au découpage du domaine de calcul pour la parallélisation, dont les limites figurent en noir. En aucun cas ces discontinuités n'apparaissent dans les solutions obtenues avec le code CEDRE.*

## 11.5 Position de la flamme dans le foyer TLC

Les mesures expérimentales par PLIF du radical OH permettent de situer la flamme dans le plan médian de la chambre de combustion. Cette position de la flamme a été comparée à celle obtenue dans les calculs à partir des taux de dégagement de chaleur (figure 11.8). On constate que l'on retrouve la forme conique de la flamme, et la position à laquelle les réactions sont les plus intenses. En revanche, l'ouverture de flamme est surestimée dans les différents calculs et l'on ne retrouve pas la forme de double cône visible sur les mesures du radical OH. Cette forme de double cône est due à la présence de deux flammes coniques, l'une étant issue de l'injection pilote et l'autre de l'injection multi-points. Les mesures indiquent que le début de la flamme pilote se situe à la même abscisse que le fond de chambre (limite gauche de la fenêtre de mesures sur la figure 11.8). Dans les calculs, la flamme issue de l'injection pilote est située beaucoup plus près de l'atomiseur, ce qui explique que l'on ne voit qu'un seul cône sur les résultats de simulation. La seule flamme visible dans le calcul est celle issue de l'injection multi-points, tandis que la flamme issue de l'injection pilote se trouve hors de la fenêtre de mesure représentée sur la figure 11.8. Le champs de dégagement de chaleur complet, c'est à dire n'étant pas artificiellement limité à la fenêtre de mesures, est donné pour chaque calcul en annexe H, section H.1. Cette mauvaise évaluation de la position de la flamme pilote peut s'expliquer par une mauvaise

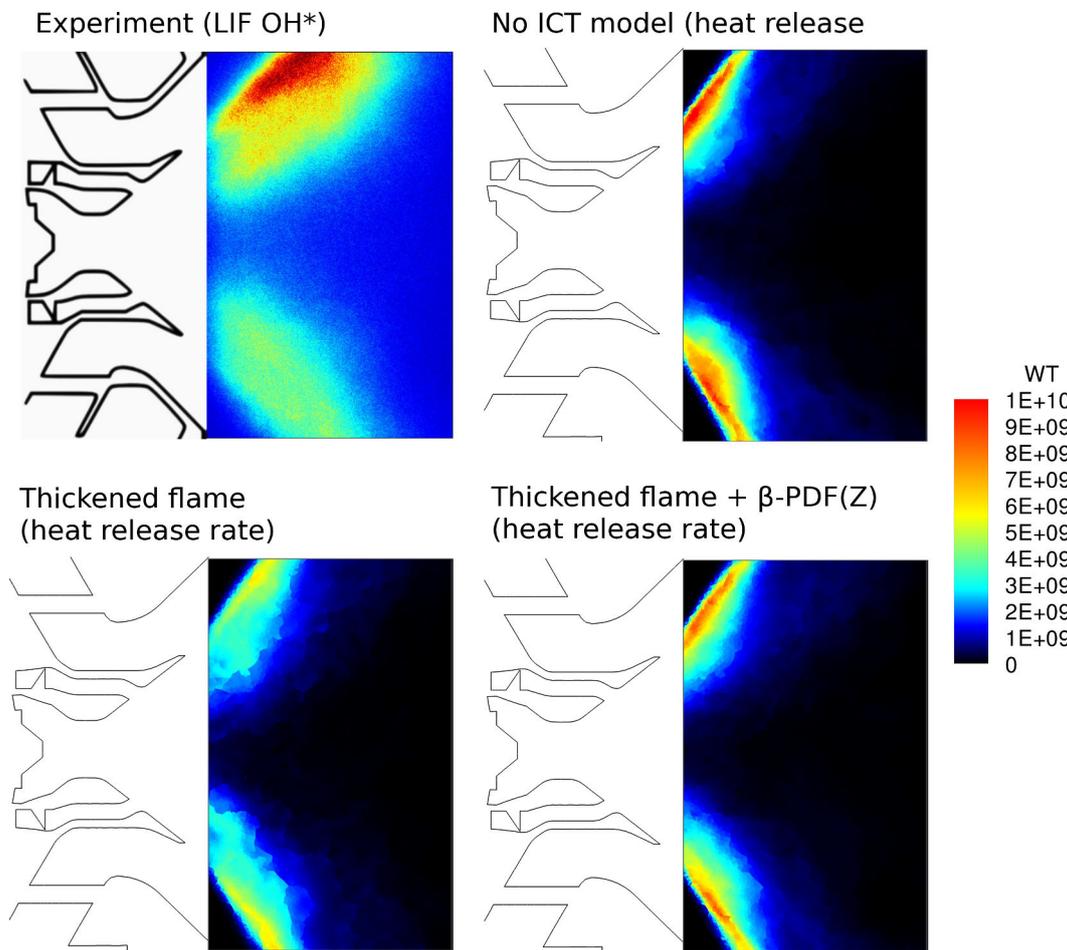


FIGURE 11.8 – Comparaison de la position de la flamme obtenue par PLIF du radical OH dans l'expérience, et à partir du dégagement de chaleur dans les simulations. Ces dernières ont été effectuées avec  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$ ,  $\kappa = 100$  et différentes approches de modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

modélisation du spray généré par l'atomiseur. En effet, on a déjà indiqué que cette modélisation donnait des fractions volumiques de gouttes trop élevées près de l'atomiseur, ce qui rend l'hypothèse de phase diluée invalide dans cette zone. Il est donc probable que l'évaporation des gouttes soit localement surestimée et que cette évaporation trop rapide permette alors à la flamme de s'accrocher au cœur

du système d'injection, près de l'atomiseur, ce qui ne semble pas être le cas dans l'expérience. Un meilleur traitement du spray dans la zone pilote devrait permettre à l'avenir d'améliorer les résultats des simulations du foyer TLC. En dehors de ce problème concernant la flamme pilote, on constate que la position de la flamme issue de l'injection multi-points est située trop en amont, excepté avec une modélisation de l'interaction chimie-turbulence par l'approche « flamme épaissie » utilisée seule. Celle-ci conduit à un dégagement de chaleur moins élevé que les autres modélisations de l'ICT, du moins dans la fenêtre représentée sur la figure 11.8, ce qui explique que la flamme se développe moins rapidement et se positionne plus en aval. C'est donc l'approche « flamme épaissie » qui reproduit le mieux la position de cette flamme.

## 11.6 Dégagement de chaleur, et température en sortie de foyer

L'intégrale du dégagement de chaleur dans la chambre de combustion est donnée dans le tableau 11.6 pour chacun des calculs effectués dans cette étude. Le dégagement de chaleur local est défini comme :

$$\dot{\omega}_T = \sum_{i=1}^M \dot{\omega}_i h_{f_i}^0, \quad (11.1)$$

où  $M$  est le nombre d'espèces chimiques transportées et  $h_{f_i}^0$  est l'enthalpie de formation de l'espèce  $i$ . On constate que tous les calculs effectués donnent des valeurs très proches de l'intégrale du dégagement de chaleur. Ces valeurs correspondent au dégagement de chaleur théorique calculé à partir du Pouvoir Calorifique Inférieur (PCI) du kérosène, qui est de l'ordre de  $43.10^6 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ , et du débit de carburant, qui est de  $1,29.10^{-2} \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ . Le dégagement de chaleur global est donc correctement reproduit par les différentes simulations. On peut constater sur la figure 11.9 que le fait d'utiliser l'une ou l'autre des approches retenues dans cette étude pour la modélisation l'interaction chimie-turbulence modifie la répartition de chaleur dans le foyer. Certes, le dégagement de chaleur se fait essentiellement aux alentours de la richesse  $\phi = 0,5$  dans les trois calculs, mais par exemple, entre  $\phi = 0,95$  et  $\phi = 1,0$ , sans modélisation de l'interaction chimie-turbulence, on obtient 2,5 % du dégagement de chaleur, tandis qu'on obtient 3,0 % avec l'approche « flamme épaissie » et 2,4 % avec les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » couplées.

FTC sans modèle d'ICT	$5,57.10^5 \text{ J} \cdot \text{s}^{-1}$
FTC « flamme épaissie »	$5,59.10^5 \text{ J} \cdot \text{s}^{-1}$
FTC « flamme épaissie » + « PDF de $Z$ présumée »	$5,45.10^5 \text{ J} \cdot \text{s}^{-1}$
Théorique ( $PCI \times \dot{m}_{\text{carburant}}$ )	$5,55.10^5 \text{ J} \cdot \text{s}^{-1}$

TABLE 11.3 – Dégagement de chaleur obtenue avec FTC, intégré sur l'ensemble du volume de la chambre de combustion, pour différents modèles d'interaction chimie-turbulence.

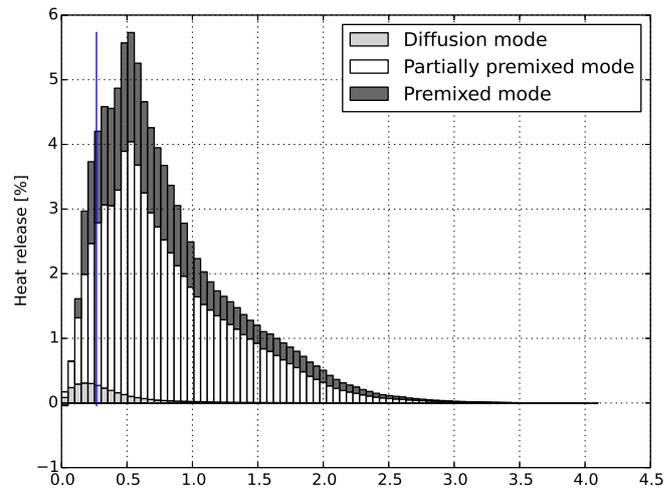
Sur la figure 11.9, on montre également la répartition du dégagement de chaleur en fonction du régime de combustion (prémélangé, partiellement prémélangé, ou de diffusion). Pour distinguer ces différents régimes, des indicateurs basés sur l'indice de Takeno ont été définis :  $\xi_p$  pour le prémélange,  $\xi_{pp}$  pour le prémélange partiel et  $\xi_d$  pour la diffusion. Ces indicateurs s'écrivent :

$$\xi_p = \max\left(0, \frac{\nabla Y_{\text{O}_2} \cdot \nabla Y_{\text{C}_{10}\text{H}_{22}}}{|\nabla Y_{\text{O}_2}| \cdot |\nabla Y_{\text{C}_{10}\text{H}_{22}}|}\right), \quad (11.2)$$

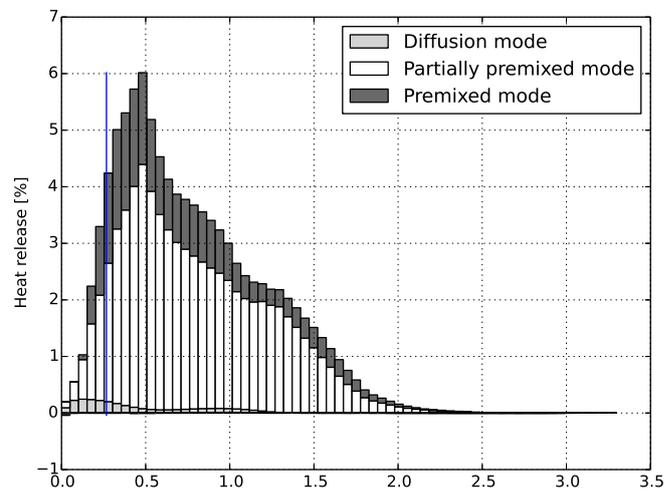
$$\xi_d = \max\left(0, -\frac{\nabla Y_{\text{O}_2} \cdot \nabla Y_{\text{C}_{10}\text{H}_{22}}}{|\nabla Y_{\text{O}_2}| \cdot |\nabla Y_{\text{C}_{10}\text{H}_{22}}|}\right), \quad (11.3)$$

$$\xi_{pp} = 1 - \frac{|\nabla Y_{\text{O}_2} \cdot \nabla Y_{\text{C}_{10}\text{H}_{22}}|}{|\nabla Y_{\text{O}_2}| \cdot |\nabla Y_{\text{C}_{10}\text{H}_{22}}|}. \quad (11.4)$$

No ICT model



« Thickened flame »



« Thickened flame »  
+  $P_\beta(Z)$

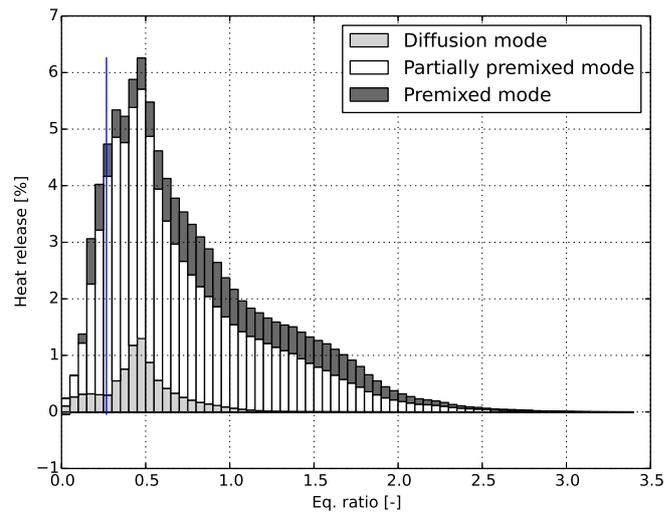


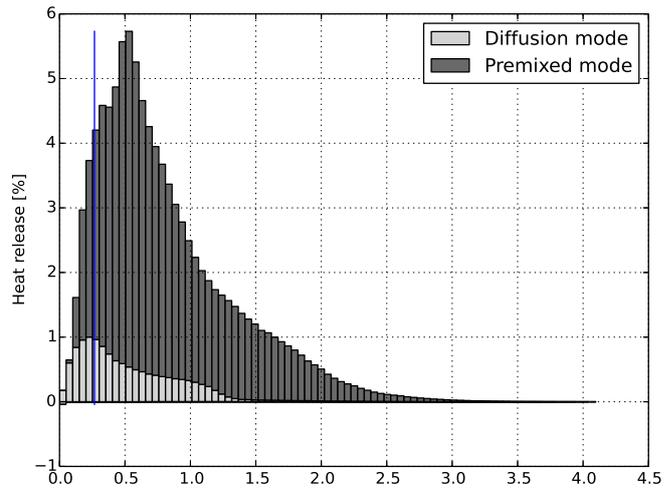
FIGURE 11.9 – Distribution du dégagement de chaleur dans la chambre en fonction de la richesse locale, pour différents modèles d'interaction chimie-turbulence avec distinction du régime de combustion. La ligne bleue verticale indique la richesse globale du point de fonctionnement étudié.

Avec ces définitions, lorsqu'en un point de la chambre de combustion les gradients de fraction massique des espèces  $O_2$  et  $C_{10}H_{22}$  sont de même direction et de même sens, l'indicateur  $\xi_p$  vaut 1 et les deux autres sont nuls. On peut alors considérer que la combustion s'effectue dans un régime prémélangé. Lorsque les gradients de fraction massique des espèces  $O_2$  et  $C_{10}H_{22}$  sont alignés mais de sens opposé, seul l'indicateur  $\xi_d$  est non nul, et vaut 1. On peut alors considérer que la combustion s'effectue dans un régime de diffusion. Enfin, quand ces gradients ne sont pas alignés, la quantité normée  $|\nabla Y_{O_2} \cdot \nabla Y_{C_{10}H_{22}}|$  devient inférieure au produit  $|\nabla Y_{O_2}| \cdot |\nabla Y_{C_{10}H_{22}}|$ . L'un des deux indicateurs  $\xi_p$  ou  $\xi_d$  est alors nul tandis que l'autre vaut  $\frac{|\nabla Y_{O_2} \cdot \nabla Y_{C_{10}H_{22}}|}{|\nabla Y_{O_2}| \cdot |\nabla Y_{C_{10}H_{22}}|}$ . On considère dans ce cas que la combustion ne s'effectue ni en régime prémélangé, ni en régime de diffusion, mais plutôt dans un régime partiellement prémélangé. La valeur de  $\xi_{pp}$  égale à  $1 - \frac{|\nabla Y_{O_2} \cdot \nabla Y_{C_{10}H_{22}}|}{|\nabla Y_{O_2}| \cdot |\nabla Y_{C_{10}H_{22}}|}$  indique de combien le régime s'éloigne du régime asymptotique (prémélangé ou de diffusion). La somme  $\xi_p + \xi_{pp} + \xi_d$  vaut par définition toujours 1 et la valeur des trois indicateurs permet d'avoir une idée de la répartition entre les trois régimes de combustion dans la cellule du domaine de calcul considérée. Cette valeur est une simple indication puisque le critère de Takeno ne permet pas toujours de caractériser parfaitement le régime de combustion. Pour obtenir la répartition du dégagement de chaleur entre les trois régimes de combustion cités, on a calculé en chaque cellule du maillage le dégagement de chaleur dans le régime prémélangé,  $\xi_p \dot{\omega}_T$ , dans le régime de diffusion,  $\xi_d \dot{\omega}_T$ , et dans le régime partiellement prémélangé,  $\xi_{pp} \dot{\omega}_T$ , la somme des trois permettant de retrouver  $\dot{\omega}_T$ . La distribution correspondante, cumulée sur l'ensemble du domaine de calcul, est représentée sur la figure 11.9, pour trois modélisations différentes de l'interaction chimie-turbulence. On constate que la répartition entre les régimes de combustion prémélangé, partiellement prémélangé et de diffusion est sensiblement la même pour les trois approches de modélisation de l'ICT. On note que la majorité du dégagement de chaleur se fait dans le régime partiellement prémélangé, et non dans le régime prémélangé, ce qui s'explique par la variation de richesse locale dans la flamme due à l'évaporation des gouttes. La faible part du dégagement de chaleur en mode prémélangé dans le foyer TLC laisse penser que la table FTC utilisée, constituée de flamme prémélangées, n'est pas la mieux adaptée pour la modélisation de la combustion dans cette configuration. On a déjà évoqué le fait que l'utilisation d'une table couvrant le régime partiellement prémélangé nécessite de nouveaux développements du code CEDRE. On tiendra compte de ce problème dans l'analyse des résultats qui suit. La répartition du dégagement de chaleur entre régime prémélangé et régime de diffusion, a également été calculée de manière plus habituelle d'après le critère de Takeno normalisé :

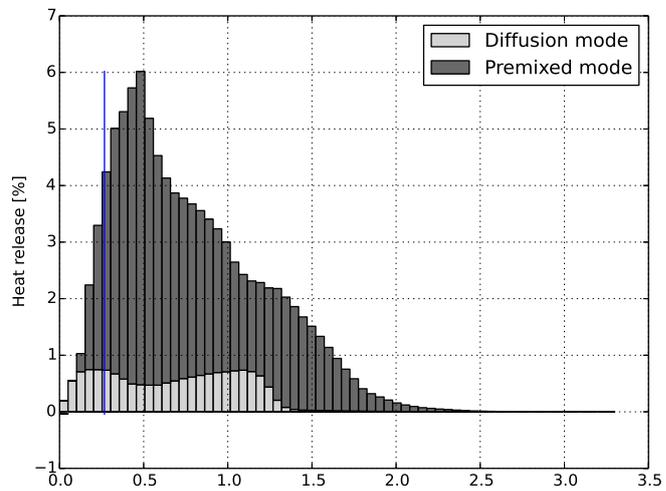
$$\mathcal{T} = \frac{\nabla Y_{O_2} \cdot \nabla Y_{C_{10}H_{22}}}{|\nabla Y_{O_2} \cdot \nabla Y_{C_{10}H_{22}}|}. \quad (11.5)$$

Ce dernier vaut strictement 1 ou  $-1$ , indiquant de façon binaire un régime prémélangé ou de diffusion. La distribution obtenue avec ce critère est donnée sur la figure 11.10. Cette manière de calculer indique un régime de combustion majoritairement prémélangé, confortant le choix d'une table de type flamme prémélangée plutôt que de type flamme de diffusion (qui sont actuellement les seuls choix possibles avec le modèle FTC de CEDRE).

no ICT modeling



« thickened flame »



« thickened flame »  
+  $P_\beta(Z)$

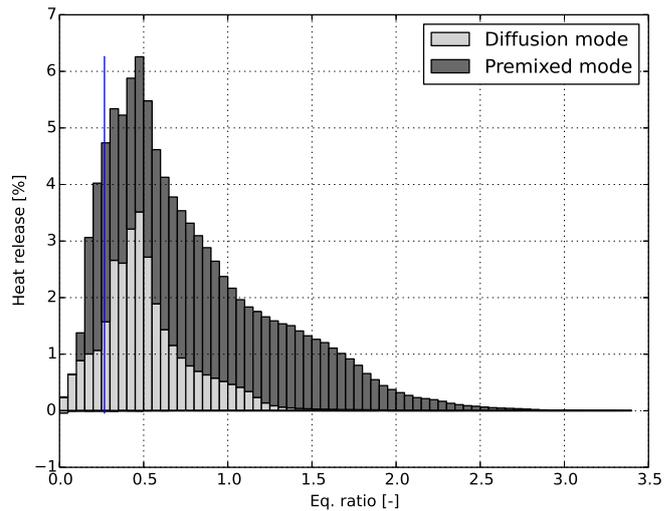


FIGURE 11.10 – Distribution du dégagement de chaleur dans la chambre en fonction de la richesse locale, pour différents modèles d’interaction chimie-turbulence et avec distinction du régime de combustion d’après (11.5). La ligne bleue verticale indique la richesse globale du point de fonctionnement étudié.

## 11.7 Température de l'écoulement gazeux

Le champ de température de l'écoulement est présenté sur la figure 11.11. On constate de légères dissymétries dans les plans correspondant aux plans de mesure par CARS, que l'on peut attribuer à la légère dissymétrie du maillage. Les topologies du champ de température obtenues avec les différentes modélisations de l'interaction chimie-turbulence (ICT) ne montrent pas de différence notable et ne seront donc pas présentées pour chaque modèle d'ICT. En revanche, les niveaux de température sont différents selon le modèle utilisé et on s'y intéresse plus en détail dans la suite de ce mémoire.

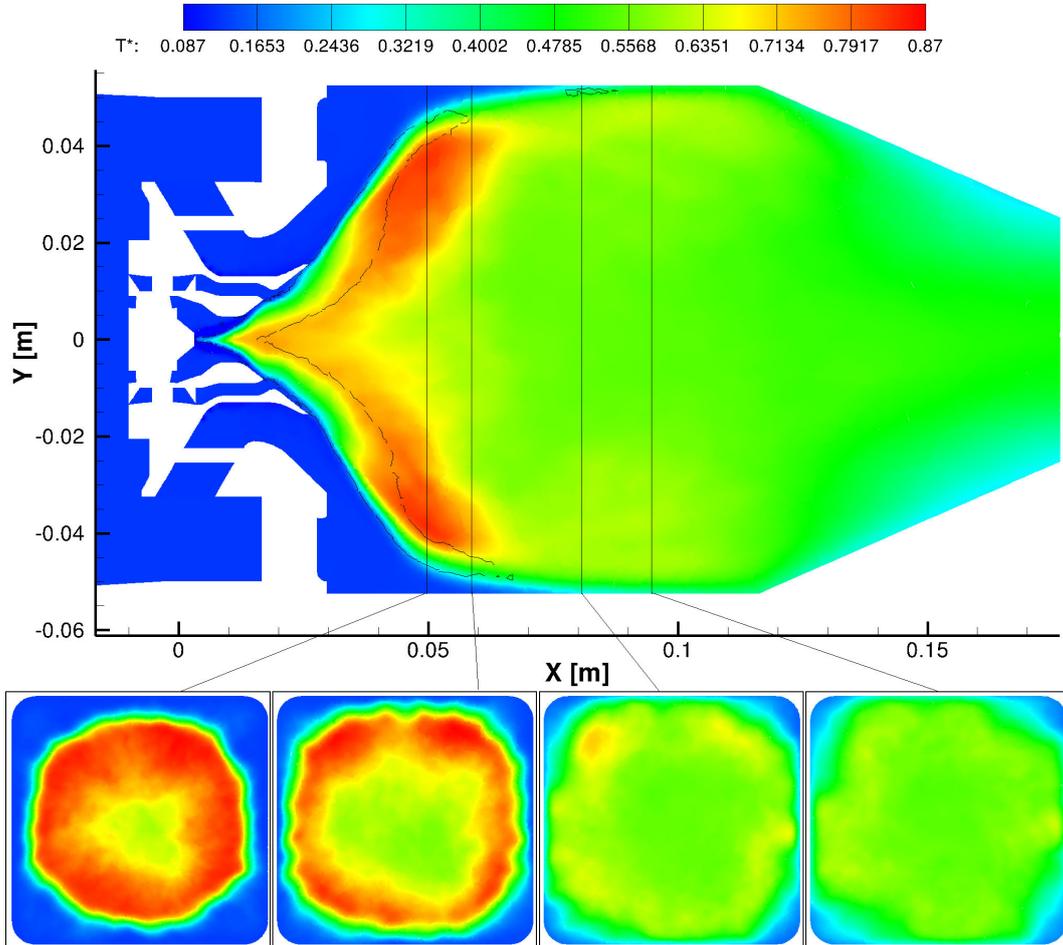


FIGURE 11.11 – Champ de température adimensionnée dans le plan médian de la chambre et iso-ligne d'intensité des réactions  $\sum_i \max(0, \dot{\omega}_i) = 200 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ . Calcul réalisé avec  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{M_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{M_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{M_{\text{NO}}}$ ,  $\kappa = 100$  et les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

Les figures 11.12, 11.13 et 11.14 présentent la répartition de la température en fonction de la richesse sous forme de nuage de points<sup>1</sup>. Sur ces figures ont également été représentées différentes enveloppes :

- en ligne continue, la température de mélange des gaz frais définie comme  $T_{\text{mél.}} = T|_{Z=1} \times Z + T|_{Z=0} \times (1 - Z)$ , où  $T|_{Z=1}$  est définie comme la température des gouttes de carburant, et  $T|_{Z=0}$  est la température d'injection de l'air,  $Z$  étant la fraction de mélange (on ne tient pas compte du refroidissement dû à l'évaporation des gouttes de carburant pour estimer cette température de mélange) ;
- en tirets, la température d'équilibre en fonction de la richesse, obtenue avec Cantera ;

1. Chaque point correspond à une cellule du maillage. Les cellules étant de taille variable, le nuage de point ne représente pas la densité de probabilité de la température dans la chambre. Il permet néanmoins de situer les températures atteintes dans le calcul par rapport à des enveloppes théoriques caractéristiques de la combustion

- en tirets longs-courts, la température maximale  $\max_c(T)$  en fonction de la richesse issue de la table FTC. Cette dernière peut en effet être plus élevée que la température d'équilibre, car à richesse élevée, avec la cinétique chimique utilisée, le  $\text{CO}_2$  qui est produit rapidement dans la flamme prémélangée, se dissocie ensuite partiellement dans les gaz brûlés.

Les points dépassant la température d'équilibre ont été colorés en vert, et ceux ayant une température plus faible que la température de mélange des gaz frais ont été colorés en rouge, le reste des points étant coloré en bleu. Le plan médian de la chambre, limité pour ne pas alourdir la figure à la partie amont de l'écoulement, a également été représenté sur la figure, et coloré suivant la même convention que le nuage de points. Ainsi, on peut situer dans le foyer les zones dans lesquelles la température se situe au-delà des enveloppes que l'on vient de définir.

La répartition de la température en fonction de la richesse est similaire dans les trois calculs. La valeur maximale suit globalement la courbe de température d'équilibre jusqu'à une richesse de 0,5, avant de décrocher aux alentours de la stœchiométrie, puis de revenir vers la température d'équilibre pour une richesse de 1,4, puis éventuellement dépasser la température maximale extraite de la table. Pour les valeurs de richesse les plus élevées, la température maximale atteinte diffère selon la modélisation de l'interaction chimie-turbulence utilisée. Avec l'approche « flamme épaissie » (figure 11.13), la température reste presque systématiquement inférieure à la température d'équilibre. Lorsque l'approche « flamme épaissie » est combinée à l'approche « PDF de  $Z$  présumée » (figure 11.14) la température dépasse celle d'équilibre, sans pratiquement dépasser la température maximale extraite de la table FTC. Sans modélisation de l'interaction chimie-turbulence, la température dépasse la température maximale de la table de la table, jusqu'à 150 K localement. La figure 11.15 montre la température extraite localement de la table pour le calcul sans modèle d'ICT. On constate que pour des richesses supérieures à 1,5, celle-ci est restée inférieure de 50 K à la valeur maximale  $\max_c(T)$  qu'elle atteint dans la table pour ces mêmes richesses, soit un écart pouvant atteindre 200 K avec la température obtenue dans CEDRE. L'origine de cet écart se trouve dans le nombre limité d'espèces de la table qui sont transportées dans CEDRE qui, comme on l'a montré au chapitre 1, entraîne une mauvaise évaluation des propriétés thermodynamiques, et par conséquent une déviation de la température déduite des équations de transport, par rapport à celle extraite directement de la table. On rappelle que la température est obtenue à partir de l'énergie totale dont l'équation est résolue dans CEDRE. Cette énergie totale résolue n'est pas affectée par les déviations de température. Par conséquent, ces dernières qui ne sont dues qu'à des modifications locales des propriétés thermodynamiques, ne se propagent pas au reste de l'écoulement. Comme on l'a supposé dans le chapitre précédent, ces déviations de température se limitent à des zones riches, dont l'étendue au sein du foyer est limitée, comme le confirme la partie droite de la figure 11.12.

Signalons que, même si pour l'essentiel des richesses, la température calculée dans CEDRE ne dépasse la valeur maximale de la table que dans le calcul sans modèle d'ICT, cela ne signifie pas pour autant qu'il n'y a pas le même problème de déviation de la température dans les deux autres calculs. En effet, les températures calculées dans CEDRE peuvent être inférieures à la température maximale de la table (fonction de la valeur locale de la richesse) tout en présentant un écart important avec la température extraite localement de la table (fonction de  $Z$  et de  $c$ ), pour peu que la variable d'avancement soit inférieure à 1. Cette situation se rencontre vraisemblablement dans le cas de l'approche « flamme épaissie », pour des richesses supérieures à 1,5 étant donné que le taux de réaction est alors assez faible, comme le montre la figure 11.9.

En ce qui concerne les valeurs inférieures de la température du gaz, on constate qu'elles sont plus faibles que la température de mélange dans tous les calculs (figures 11.12, 11.13 et 11.14). La coloration en rouge dans le plan médian montre que cela se produit exclusivement à proximité des points d'injection des gouttes de carburant. Puisque la température de mélange calculée ne prend pas en compte le refroidissement dû à l'évaporation des gouttes (qui dépend de l'état local des deux phases), il est normal d'obtenir des températures du gaz inférieures à celle de mélange à cet endroit. Néanmoins, les écarts peuvent atteindre 250 K, ce qui représente des transferts thermiques très importants entre le gaz et les gouttes de carburant. Compte tenu de la valeur de la fraction volumique de gouttes près de leurs points d'injection, il est fort probable que les transferts thermiques entre les gouttes et le gaz soient mal évalués dans ces parties de l'écoulement. Comme indiqué précédemment, la validité des

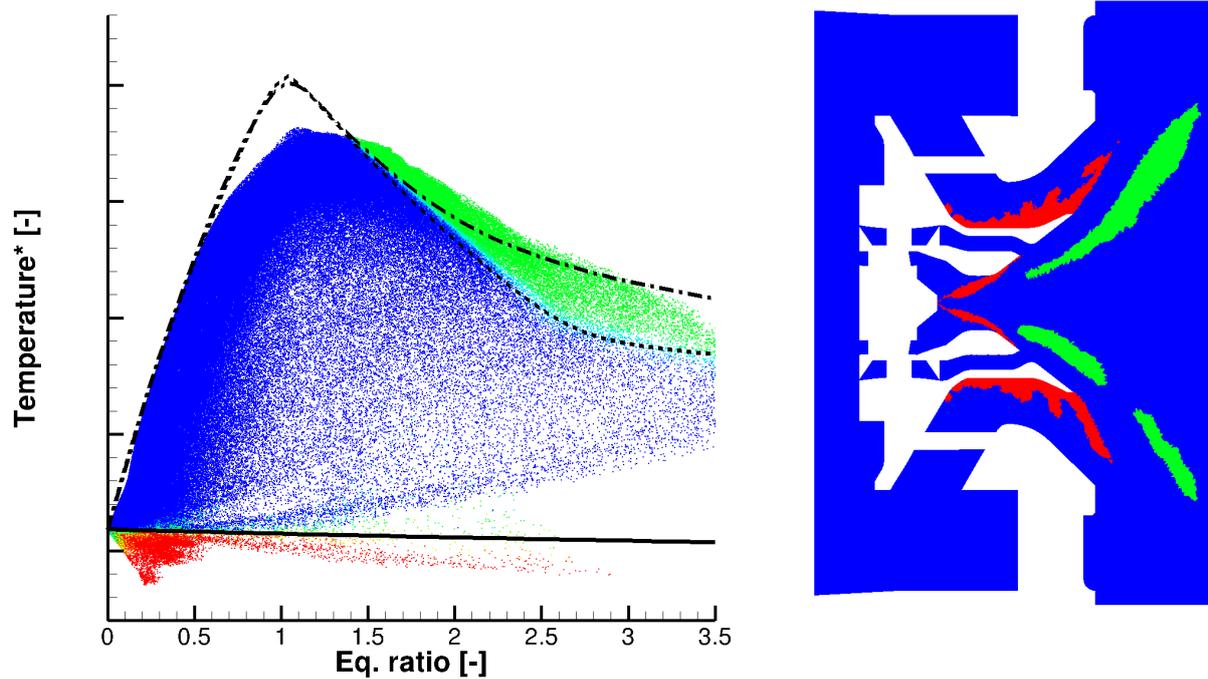


FIGURE 11.12 – Nuage de points représentant la température adimensionnée en fonction de la richesse locale pour  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{\mathcal{M}_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{\mathcal{M}_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{\mathcal{M}_{\text{NO}}}$ ,  $\kappa = 100$  et sans modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

modèles établis sur une hypothèse de phase diluée est remise en cause quand la fraction volumique est trop élevée. On peut donc douter de la validité de la température du gaz calculée dans ces zones, notamment quand elle atteint quasiment celle des gouttes (injectées à 300 K).

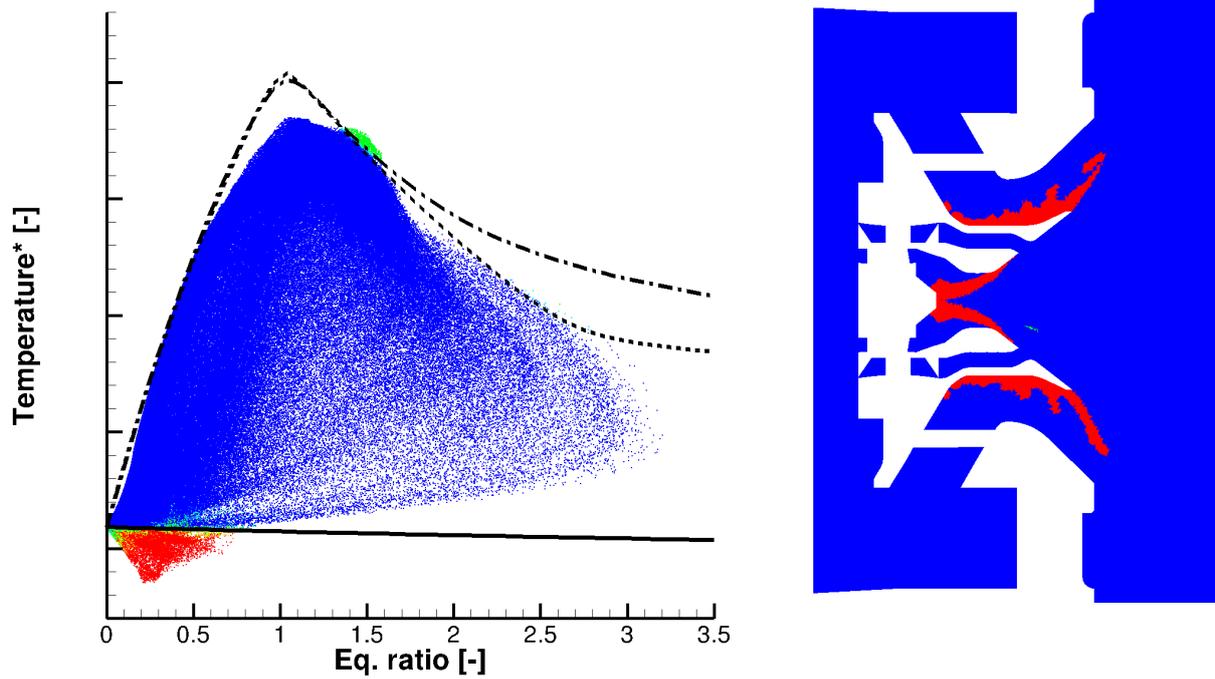


FIGURE 11.13 – Nuage de points représentant la température adimensionnée en fonction de la richesse locale pour  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$ ,  $\kappa = 100$  et une approche « flamme épaissie » pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

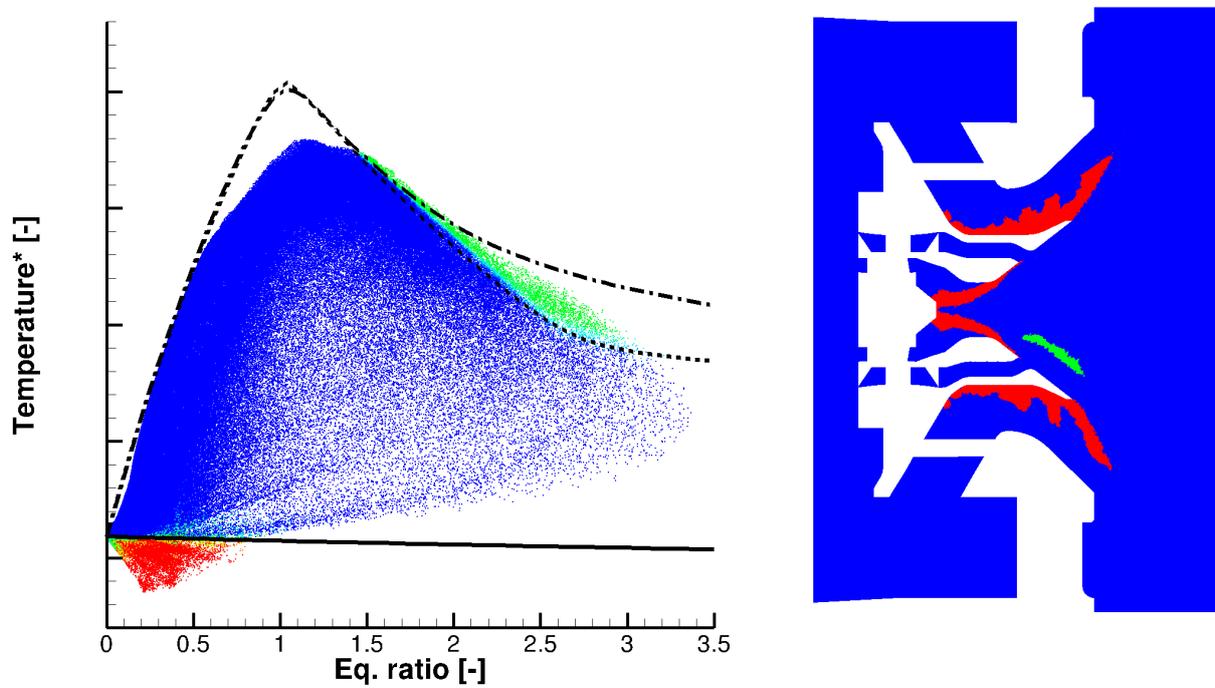


FIGURE 11.14 – Nuage de points représentant la température adimensionnée en fonction de la richesse locale pour  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$ ,  $\kappa = 100$  et les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

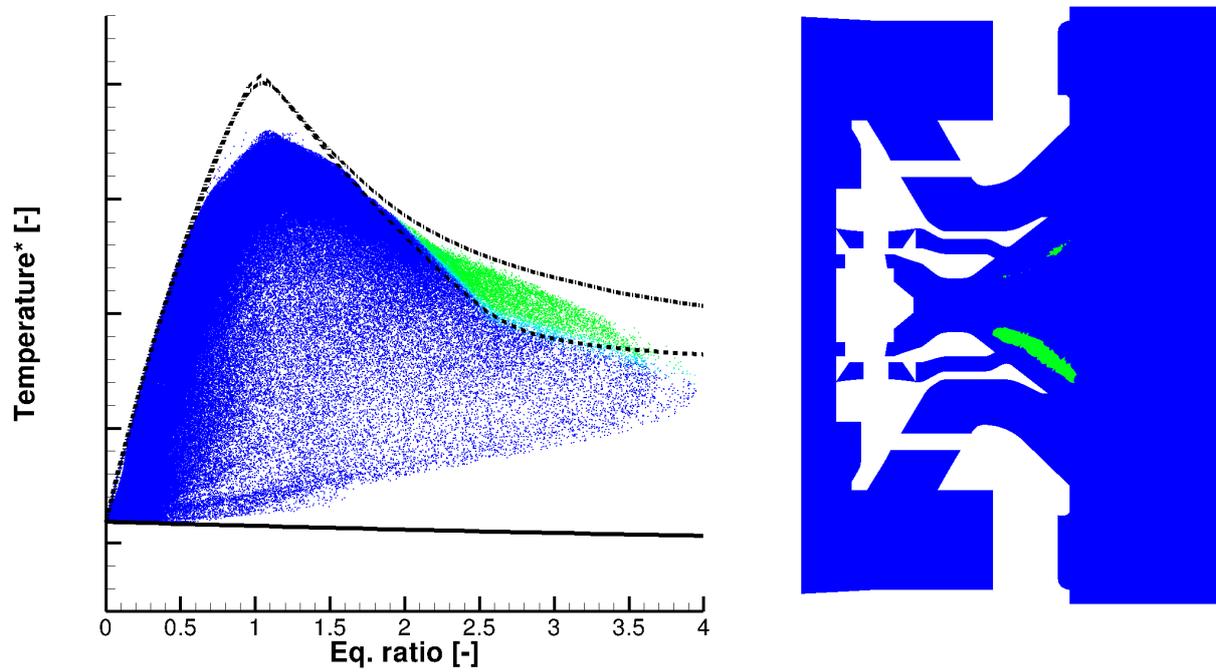


FIGURE 11.15 – Nuage de points représentant la température adimensionnée extraite directement de la table FTC en fonction de la richesse locale pour  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{\mathcal{M}_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{\mathcal{M}_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{\mathcal{M}_{\text{NO}}}$ ,  $\kappa = 100$  et sans modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

## 11.8 Comparaison avec les profils de température expérimentaux

Le modèle FTC, utilisé avec différentes modélisations de l'interaction chimie-turbulence, donne, en sortie de la chambre de combustion, un profil de température similaire pour les trois modèles d'ICT (voir figure 11.16). Le profil de température expérimental présenté sur cette figure a été obtenu à partir des prélèvements de gaz, en faisant l'hypothèse que les gaz prélevés en sortie de chambre ont atteint la température d'équilibre. Par conséquent, la température expérimentale est une fonction de la richesse, et l'on retrouve sur ce profil, la même dissymétrie que celle que l'on a évoquée précédemment concernant le profil de richesse. La température obtenue est supérieure pour la majorité des points de mesure, avec des écarts pouvant atteindre 200 K. Les profils extraits des résultats de Dorey [23] sont également présentés sur cette figure. Ceux-ci montrent des écarts de même amplitude avec les résultats expérimentaux. La surestimation de la température en sortie de foyer n'est donc pas directement imputable à la modélisation FTC. Celle-ci vient d'une erreur de modélisation commune aux calculs réalisés avec FTC et avec la cinétique réduite qui, hormis le modèle de combustion, partagent la même mise en donnée. On peut attribuer ces écarts au fait que dans le calcul, la richesse dans le plan de sortie est plus élevée au niveau du bras de mesure, ce qui n'est peut-être pas le cas dans l'expérience. La température de gaz brûlés augmentant avec la richesse lorsque celle-ci est inférieure à la stœchiométrie pourrait donc expliquer que la température soit surrestimée au niveau du bras de mesure. On peut aussi supposer qu'il y a une mauvaise évaluation des pertes thermiques dans la chambre dans les simulations réalisées. Les travaux de Dorey [23] ont déjà traité le problème des pertes radiatives, et montré qu'elles n'ont pas un effet significatif sur la température locale de l'écoulement. En revanche, il reste une grande incertitude sur les pertes convectives au niveau des parois de la chambre. En effet, ni le flux de refroidissement de ces parois, ni leur température n'ont été mesurées expérimentalement. Il est donc probable que la température uniforme de 700 K imposée dans le calcul, sur ces parois, ne soit pas représentative de la température réelle et entraîne une sous-estimation des pertes énergétiques du foyer. Pour de prochains travaux sur cette configuration, il est essentiel de comprendre l'origine de ces pertes, car obtenir une bonne estimation des niveaux de température dans la chambre est crucial pour le calcul des émissions polluantes. Dans l'état actuel des choses, la validation des prédictions de polluants par le modèle FTC paraît entachée par ce problème d'évaluation de température.

Les résultats de calcul ont également été comparés avec les profils expérimentaux mesurés dans la chambre avec la technique CARS (figure 11.17). Cette comparaison montre d'importants écarts, notamment pour les trois derniers profils. Les calculs effectués par Dorey, montrent une nette réduction des erreurs sur ces profils suite au raffinement du maillage, mais l'erreur restante est encore significative. A iso-maillage (11M de mailles), iso-modèle d'interaction chimie-turbulence (ici l'approche « flamme épaissie »), et à modélisation égale du reste des phénomènes physiques, on s'attend à ce que les prédictions de température obtenues avec FTC soient de qualité équivalente à celles obtenues avec la cinétique réduite. Or, on constate que les profils de température obtenus avec le modèle FTC sont un peu plus éloignés des résultats expérimentaux que ceux obtenus avec la cinétique réduite. Il s'avère donc que, dans le cas de simulation du foyer TLC, les erreurs induites par la modélisation FTC sont supérieures à celles induites par l'utilisation d'une cinétique simplifiée. Cela ne disqualifie pas pour autant la méthode FTC, car celle-ci est la seule capable de donner accès à la concentration des espèces minoritaires intervenant dans la formation des polluants. De plus, la modélisation FTC peut encore être améliorée, notamment par l'utilisation de tables permettant de traiter à la fois les régimes de combustion prémélangés, partiellement prémélangés, et de diffusion, ce qui pourrait réduire les écarts de température obtenus sur le foyer TLC.

Concernant la modélisation de l'interaction chimie-turbulence, il est intéressant de noter que les modèles utilisés conduisent à des répartitions différentes du dégagement de chaleur. On observe en effet que les écarts sur la température entre les calculs FTC et l'expérience, sont plus élevés (+100 K) dans le cas où l'interaction chimie-turbulence n'est pas modélisée. En revanche, les profils obtenus avec FTC et une approche « flamme épaissie » ou avec les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » couplées sont assez semblables, du moins aux ordonnées correspondant aux mesures expérimentales. Il n'est donc pas possible de déterminer, à partir de ces résultats, l'apport de l'utilisation d'une PDF de  $Z$  présumée dans le calcul CFD, par rapport à l'approche « flamme épaissie » utilisée comme seul modèle d'ICT.

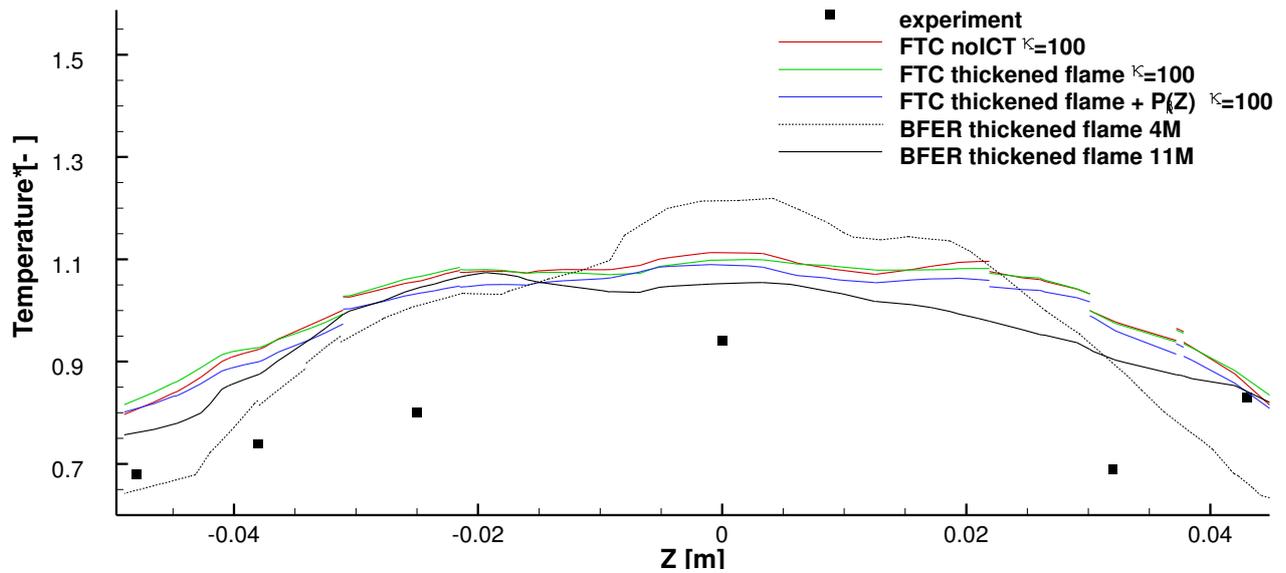


FIGURE 11.16 – Profil de température moyenne adimensionnée en sortie de la chambre de combustion, au niveau du bras de prélèvement de gaz. Les calculs utilisant FTC ont été réalisés avec  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$  et  $\kappa = 100$ . Les résultats des calculs réalisés par Dorey avec une cinétique à deux étapes (BFER) sur maillage de 4 millions de mailles (4M) [23] et 11 million de mailles (11M), sont également présentés. *Les discontinuités des profils sont dues à un problème de post-traitement lié au découpage du domaine de calcul pour la parallélisation. En aucun cas ces discontinuités n'apparaissent dans les solutions obtenues avec le code CEDRE.*

Concernant les fluctuations de température, présentées sur le bas de la figure 11.17, on constate une surestimation des niveaux RMS avec la modélisation FTC, surtout sur les deux premiers profils. En revanche, on retrouve des profils de même forme que ceux obtenus avec la cinétique réduite, sur maillage plus grossier. Les niveaux RMS de fluctuations de température n'ont pas été calculés pour la simulation avec la cinétique réduite sur maillage plus fin car le temps physique simulé est trop faible pour que la convergence statistique ait été atteinte.

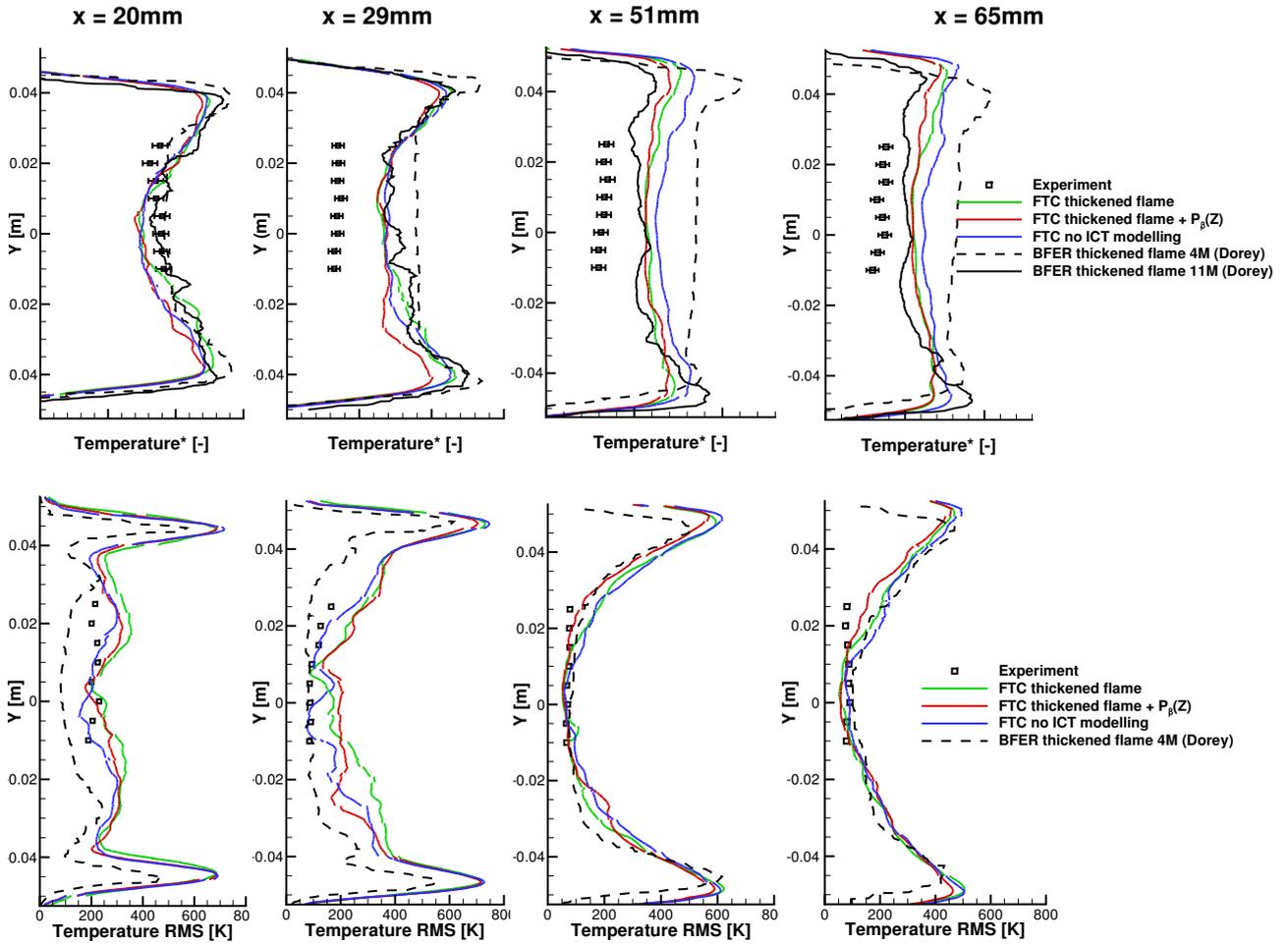


FIGURE 11.17 – Profils de température moyenne adimensionnée et RMS comparés aux profils mesuré par méthode CARS. Les calculs utilisant FTC ont été réalisés avec  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$  et  $\kappa = 100$ . Les résultats des calculs réalisés par Dorey avec une cinétique à deux étapes (BFER) sur maillage de 4 millions de mailles (4M) [23] et 11 million de mailles (11M), sont également présentés.

## 11.9 Prédiction des niveaux de suie dans la chambre

La figure 11.18 présente pour chaque calcul, et pour l'expérience, le champ de fraction volumique de suie dans le plan moyen de la chambre. Notons que les échelles utilisées pour les résultats de simulations sont différentes de celle utilisée pour l'expérience. Le choix d'échelles différentes était nécessaire pour mieux faire apparaître l'amplitude des variations de fractions volumique. Ces résultats montrent que la topologie du champ de fraction volumique de suie est assez bien reproduite, en tout cas dans la partie de la chambre accessible par les mesures optiques. En effet, on retrouve la présence de suies dans un cône creux correspondant à la zone de flamme. Le creux de ce cône correspond à la zone de recirculation de l'écoulement, dans laquelle le calcul prédit des niveaux de suie négligeables, conformément à l'expérience. Cela traduit un bon fonctionnement du couplage entre le modèle FTC et le modèle de suies de Leung et al. En revanche, on voit que le niveau maximum de fraction volumique prédit dans le calcul est largement surestimé par rapport à l'expérience. Il y a en effet entre le calcul et l'expérience, un facteur 25 sans modélisation de l'interaction chimie-turbulence, tandis qu'il y a un facteur 10 avec les approches « flamme épaisse » seule, ou « flamme épaisse » et « PDF de  $Z$  » présumée.

Si la topologie de fraction volumique semble mieux prédite que les niveaux d'après la figure 11.18, il faut toutefois prêter attention à ce qui se passe dans le reste de l'écoulement. Les figures 11.19 et 11.20 permettent de comparer le champ limité à la zone du hublot à celui du plan médian dans son

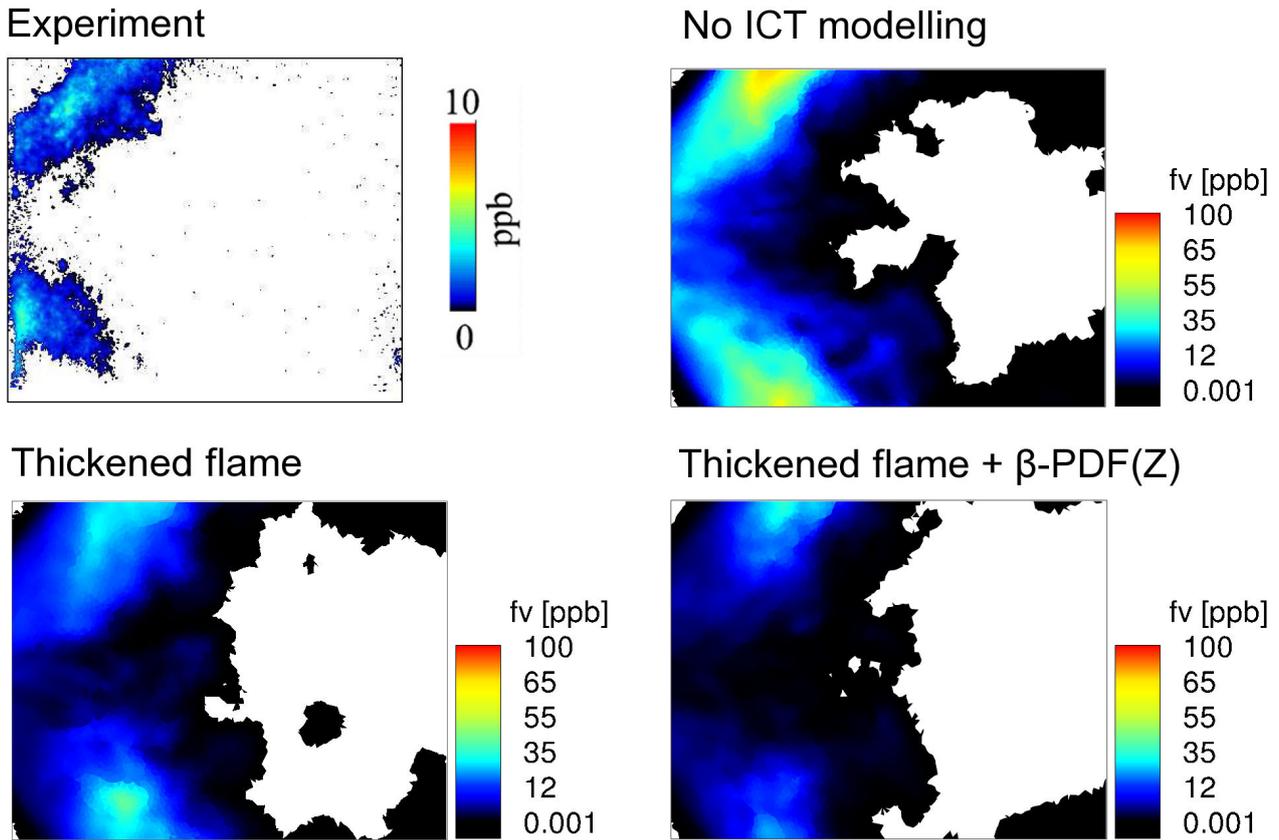


FIGURE 11.18 – Comparaison des champs moyens de fraction volumique de suie obtenus expérimentalement et par différentes simulations utilisant le modèle FTC, avec  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$ , et  $\kappa = 100$ . La représentation est limitée à la zone accessible à travers le hublot lors des mesures expérimentales.

intégralité. On remarque que la zone présentant le maximum de fraction volumique de suie s'étend, d'après le calcul, largement en dehors de la zone du hublot. Il est difficile de savoir si la position et la taille de cette zone est bien prédite dans le calcul. En effet, dans l'expérience, la partie haute du cône de présence de suie semble s'étendre au-delà de la fenêtre de visualisation mais la partie basse semble contenue à l'intérieur de la fenêtre. Cette dissymétrie pourrait s'expliquer par l'absorption de la nappe laser utilisée pour sublimer les suies par incandescence (cette nappe laser pénètre dans le foyer par un hublot de la paroi supérieure). Une dissymétrie induite par le bras de mesure ou une imperfection de l'injection swirlée n'est pas non plus à exclure.

Rappelons que dans le modèle de Leung, l'unique précurseur de suie est l'acétylène,  $C_2H_2$ . La figure 11.21 montre que la fraction massique de  $C_2H_2$  extraite de la table FTC atteint des valeurs plus élevées dans le calcul sans modèle d'interaction chimie-turbulence que dans les calculs avec modèle d'ICT. De plus, là où l'acétylène est présent, les niveaux de température donnés par les différentes approches de modélisation de l'ICT sont similaires (voir les profils de température présentés précédemment). Par conséquent, les taux de nucléation et de croissance en surface qui dépendent de la concentration de  $C_2H_2$  et de la température sont plus élevés dans le calcul sans modèle d'ICT, ce qui entraîne une production de suie plus importante dans celui-ci. Cela explique en partie l'obtention d'un maximum de fraction volumique de suie plus élevé dans ce calcul.

Les champs et profils des espèces  $O_2$  et  $OH$  qui jouent le rôle d'oxydant des suies dans le modèle de Leung et al. n'apportent pas d'information supplémentaire dans cette analyse. Ils sont toutefois présentés en annexe H, section H.2, à titre d'information.

Le tableau 11.4 permet une comparaison des fractions volumiques de suie calculées en sortie de la chambre de combustion et mesurées expérimentalement. Tous les calculs donnent un niveau de suie en sortie inférieur d'un ordre de grandeur aux mesures expérimentales, alors que le niveau maximum

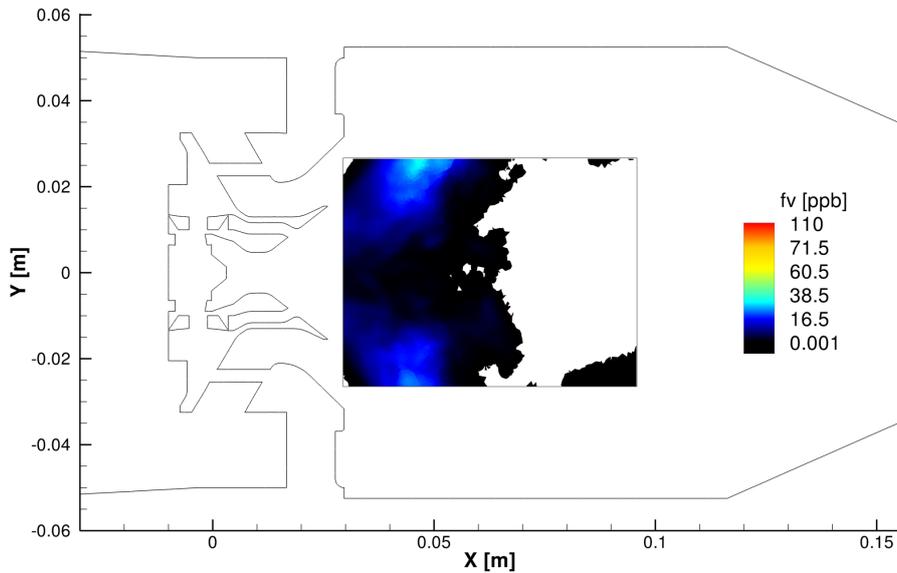


FIGURE 11.19 – Champ de fraction volumique de suie artificiellement limité à la zone accessible à travers le hublot lors des mesures expérimentales. Résultat obtenu avec  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{\mathcal{M}_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{\mathcal{M}_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{\mathcal{M}_{\text{NO}}}$ ,  $\kappa = 100$  et les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

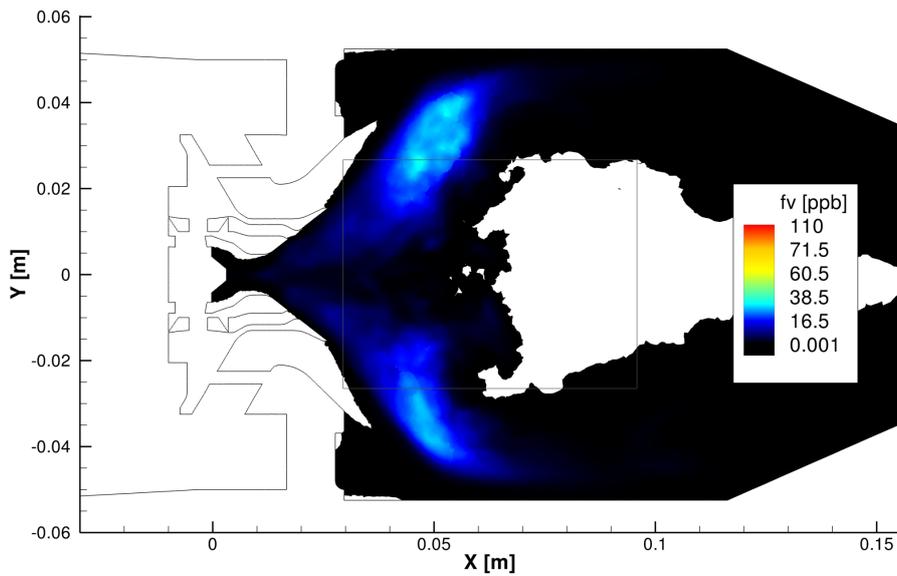


FIGURE 11.20 – Champ de fraction volumique de suie. Résultat obtenu avec  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{\mathcal{M}_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{\mathcal{M}_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{\mathcal{M}_{\text{NO}}}$ ,  $\kappa = 100$  et les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

atteint dans la chambre est surestimé par les calculs. L'oxydation des suies en aval de flamme est donc nettement surestimée par la simulation. Cela s'explique en partie par les niveaux de température trop élevés obtenus par le calcul CFD, qui conduisent à une vitesse de réaction excessive dans l'étape d'oxydation par  $\text{O}_2$ .

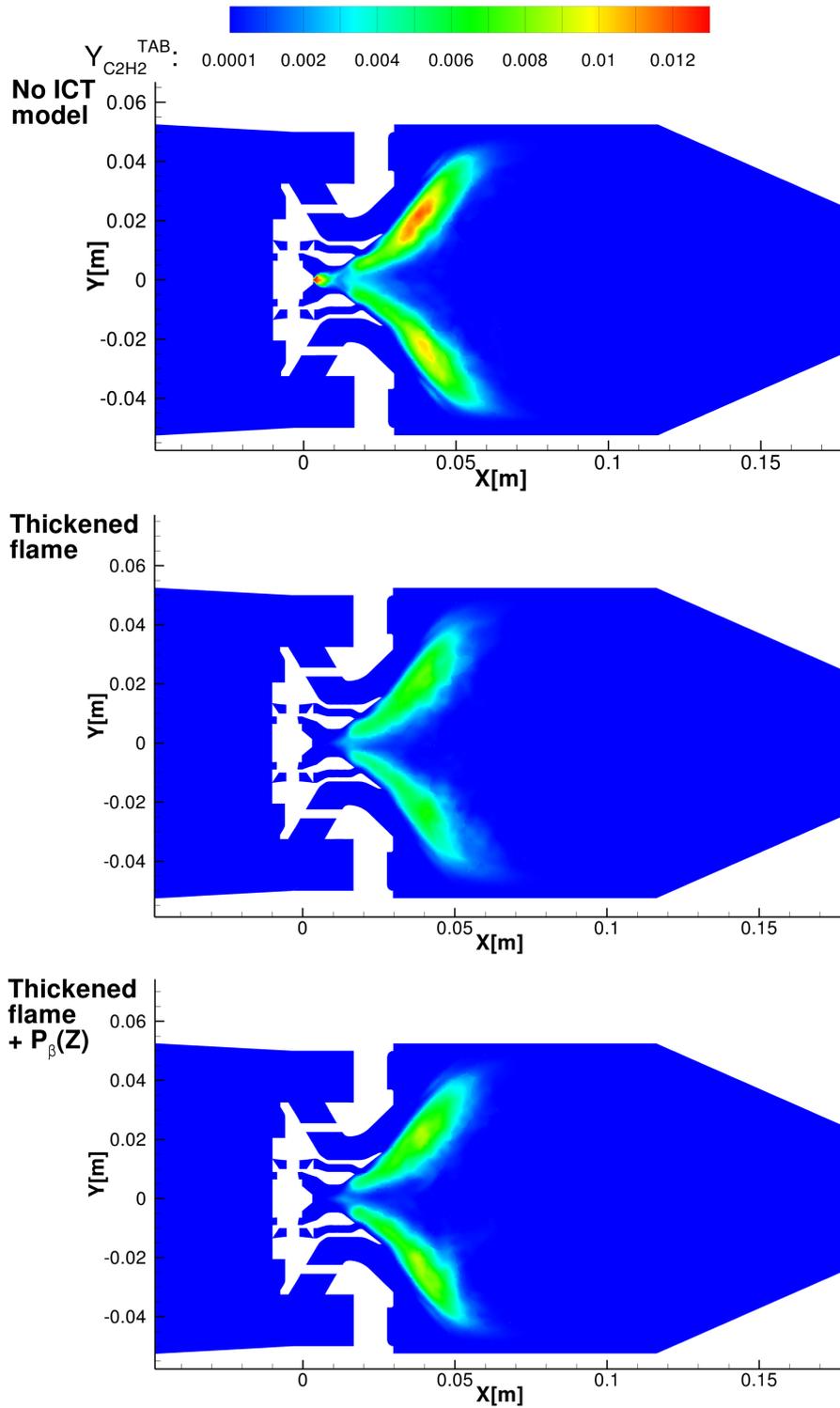


FIGURE 11.21 – Champs moyens de la fraction massique de  $C_2H_2$  extraite de la table FTC. Les résultats ont été obtenus avec différentes modélisation de l'interaction chimie-turbulence, en prenant  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$ , et  $\kappa = 100$ .

Expérience (point 13p4 [33])	Simulation, $\kappa = 100$		
	No ICT model	TFLES	TFLES + $P_\beta(Z)$
$3,19 \cdot 10^{-10}$	$5,23 \cdot 10^{-11}$	$3,02 \cdot 10^{-11}$	$2,23 \cdot 10^{-11}$

TABLE 11.4 – Fraction volumique de suie en sortie de la chambre de combustion.

## 11.10 Émissions de $\text{NO}_x$

Les champs de fraction massique de NO obtenus avec les trois approches retenues pour la modélisation de la turbulence sont comparées sur la figure 11.22. Deux lignes ont été superposées sur les différents champs : une ligne d'iso-intensité de réaction permettant de situer la flamme, et une ligne d'iso-taux de production de NO permettant de situer la zone de production de ce dernier. On constate que la production de NO se fait très près de la flamme, et non pas loin en aval de celle-ci. C'est le signe que la dilution par l'écoulement d'air provenant de l'étage principal entraîne une diminution suffisamment rapide de la température des gaz brûlés et de leur richesse pour empêcher la formation du NO thermique en aval de flamme. Dans les trois calculs, les niveaux maximums de fraction massique de NO sont atteints dans la zone de recirculation, près de la flamme. Ce phénomène peut trouver plusieurs explications. D'une part, les gaz brûlés peuvent être piégés un peu plus longtemps dans cette partie de la zone de recirculation, dont la richesse locale varie entre 0,5 et 0,8, entraînant une formation plus importante du NO à cet endroit. D'autre part, cette zone peut être alimentée par du NO prompt formé dans la flamme toute proche, au moyen d'échanges via les structures turbulentes.

La figure 11.23 présente la distribution des taux de réaction du NO dans la chambre en fonction de la richesse locale. On remarque une consommation assez importante du NO aux richesses proches de 0,3 et plus modérée aux richesses comprises entre 1,2 et 2,8. Cette consommation n'est pas due aux réactions chimiques, mais aux termes de relaxation. On peut voir en effet sur la figure 11.24 que les taux de réaction extraits de la table ne présentent pas de valeur négative aux mêmes richesses. On remarque également qu'une très faible proportion de la production du NO s'effectue dans un régime prémélangé. La production de NO a donc lieu dans une partie de l'écoulement où la structure de flamme est a priori mal décrite par la table FTC, ce qui ne favorise pas la précision de la modélisation.

La figure 11.25 permet de comparer des champs de taux de réaction du NO obtenus l'un, directement à partir de la table et l'autre incluant la relaxation. Cette figure met en évidence les zones dans lesquelles le modèle FTC impose une consommation du NO par les seuls termes de relaxation du modèle. Une première zone est située au niveau de l'injection pilote et ses limites sont relativement proches de la ligne d'iso-richesse  $\phi = 1,2$  en noir. Le terme de relaxation est négatif dans cette zone et cela implique que la fraction massique obtenue dans le calcul CFD est supérieure à celle qui est extraite de la table FTC. On explique cet écart par un apport de NO par diffusion, conduisant à une concentration de NO plus importante dans le code CFD que dans les flammes utilisées pour générer la table FTC. En effet, dans le calcul CFD, il y a de forts gradients de richesse dans la flamme (marquée par la ligne rose d'iso-intensité de réaction). Il y a donc de forts transferts de NO par diffusion, depuis les zones pauvres où celui-ci est produit, vers la zone de richesse supérieure à 1,2. À l'inverse, dans les flammes de prémélange utilisées pour générer la table, il n'y a pas de diffusion du NO selon un gradient de richesse, puisque celui-ci est nul dans chaque flamme de richesse donnée. La fraction massique de NO reste donc relativement faible dans la table pour des richesses élevées. Cela explique pourquoi l'écart entre la fraction massique de NO obtenue par le calcul CFD et celle donnée par la table est si fort près de l'injecteur pilote. On assiste ici à une limite de la modélisation utilisée, car les termes de relaxation FTC, nécessaires pour assurer une cohérence des taux de réaction vis à vis de la composition locale, s'opposent à la diffusion du NO qui est pourtant une réalité physique à cet endroit de l'écoulement. Le fait que les termes de relaxation s'opposent à la diffusion du NO révèle qu'il n'y a en aucun point de la table une composition équivalente à celle que l'on aurait au niveau du pilote si le NO était libre d'augmenter du fait de la diffusion. Si ce phénomène de diffusion était pris en compte dans la table, les termes de relaxation ne s'opposeraient pas à cette évolution du NO dans la zone pilote, et la table FTC prédirait des termes de production du NO en accord avec la composition du mélange obtenue dans cette zone. L'extension du modèle FTC au traitement des écoulements présentant une variation locale du régime de combustion (flamme de prémélange  $\leftrightarrow$  flamme de diffusion) semble nécessaire pour lever cette limitation du modèle FTC.

La seconde zone dans laquelle le NO est consommé uniquement du fait des termes de relaxation s'étend essentiellement le long des parois de la chambre. Il n'a pas été possible de mettre en évidence une correspondance du contour de cette zone avec celui d'une grandeur comme la richesse, la variable d'avancement ou l'indice de Takeno. Il est donc difficile d'interpréter la présence de cette zone.

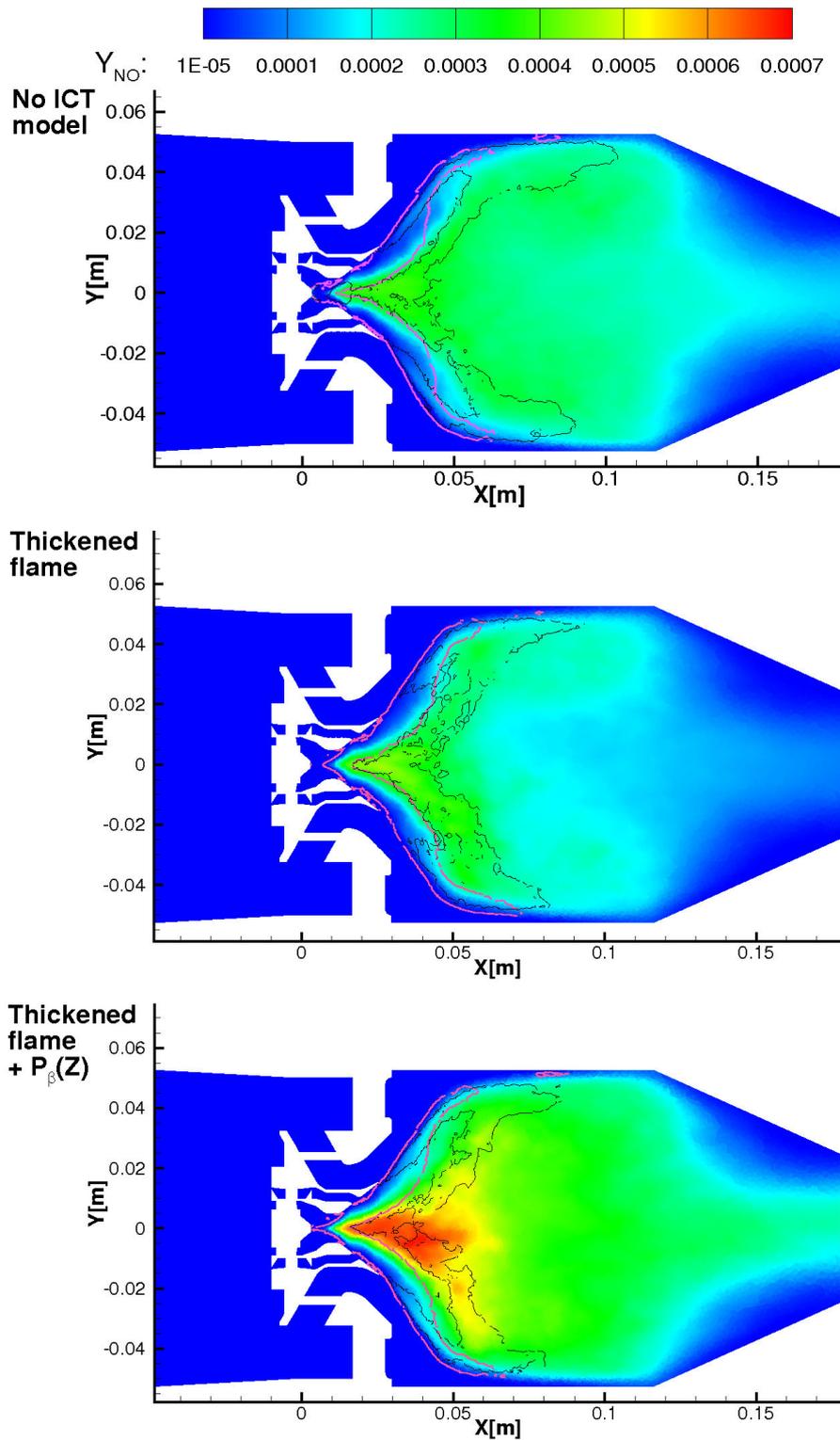


FIGURE 11.22 – Champs moyens de la fraction massique transportée de NO. Les résultats ont été obtenus avec différentes modélisation de l'interaction chimie-turbulence, en prenant  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{\mathcal{M}_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{\mathcal{M}_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{\mathcal{M}_{NO}}$  et  $\kappa = 100$ .

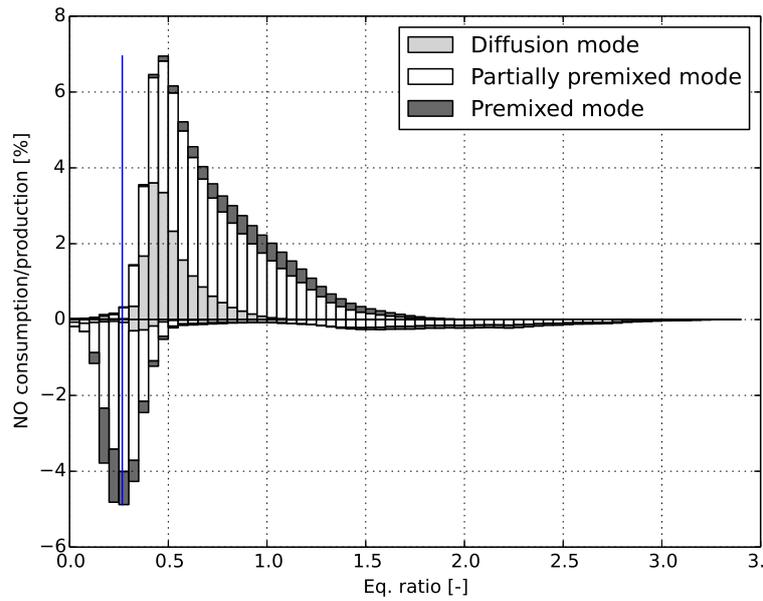


FIGURE 11.23 – Distribution des taux de réaction du NO (incluant les termes de relaxation FTC), avec distinction du régime prémélangé et de diffusion. La distribution est normalisée par  $\sum_1^{n_{cellules}} |\dot{\omega}_{NO}|$ , où  $n_{cellules}$  est le nombre de cellules du maillage. La ligne bleue indique la richesse globale du foyer.

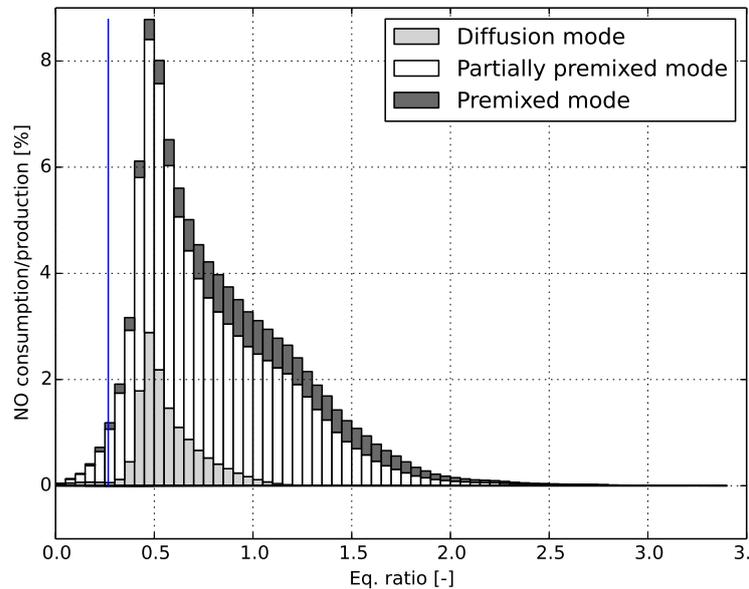


FIGURE 11.24 – Distribution des taux de réaction tabulés du NO (avant application des termes de relaxation FTC), avec distinction du régime prémélangé et de diffusion. La distribution est normalisée par  $\sum_1^{n_{cellules}} |\dot{\omega}_{NO}|$ , où  $n_{cellules}$  est le nombre de cellules du maillage. La ligne bleue indique la richesse globale du foyer.

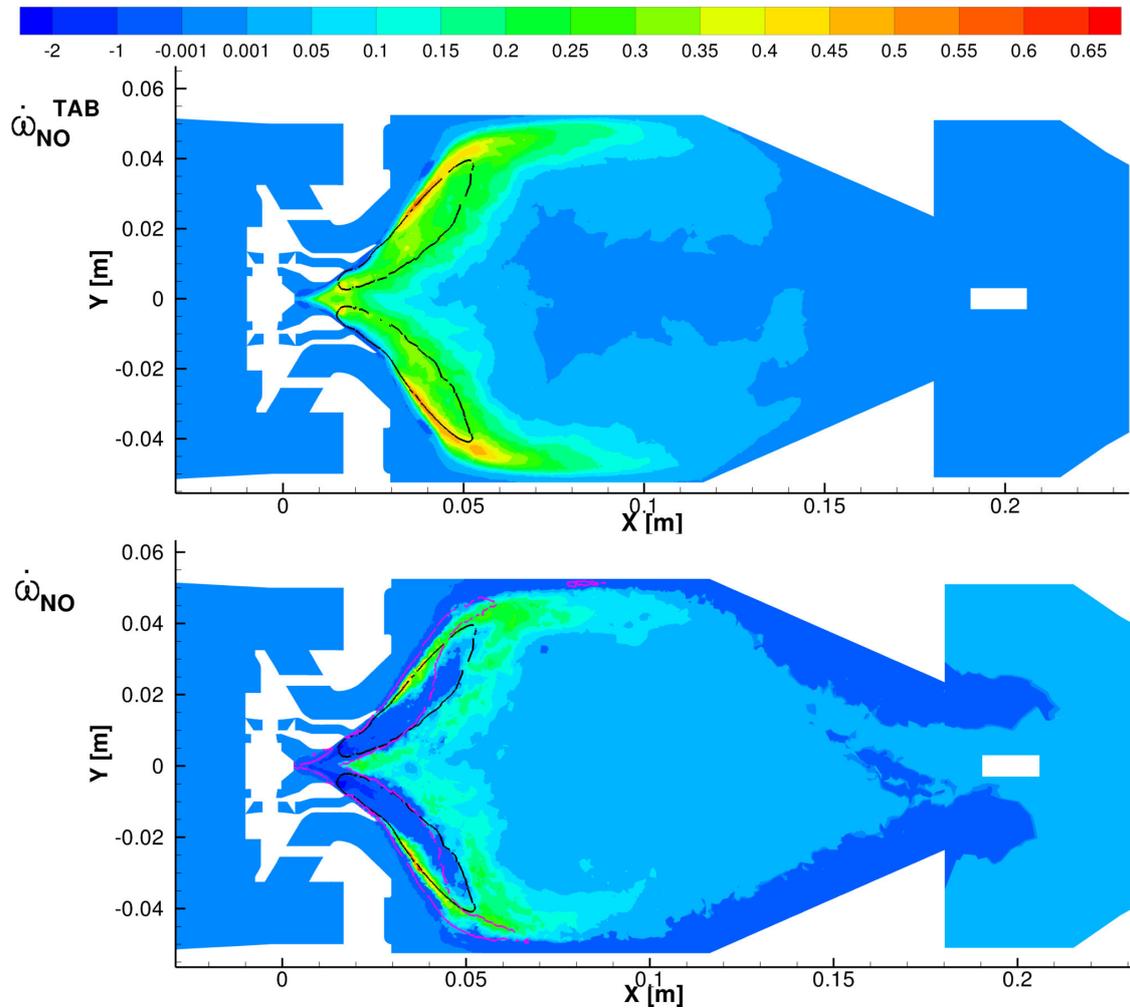


FIGURE 11.25 – Taux de réaction du NO : en haut, taux extraits de la table, donc sans prise en compte des termes de relaxation ; en bas, taux incluant les termes de relaxation. En noir : ligne d'iso-richesse  $\phi = 1,2$ , en rose : ligne d'iso-intensité des réaction  $\sum_i \max(0, \dot{\omega}_i) = 200 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ . Calcul réalisé avec  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{\mathcal{M}_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{\mathcal{M}_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{\mathcal{M}_{\text{NO}}}$ ,  $\kappa = 100$  et les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » couplées pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

Les indices d'émission obtenus expérimentalement et dans les différentes simulations sont présentés dans le tableau 11.5. Ces indices sont définis comme :

$$\text{ieNO} = \frac{1000 \int_S \overline{\rho \mathbf{v} Y_{\text{NO}}} \cdot d\mathbf{S}}{\dot{m}_{\text{carburant}}}, \quad (11.6)$$

$$\text{ieNO}_x = \frac{1000 \int_S \overline{\rho \mathbf{v} (1,533 Y_{\text{NO}} + Y_{\text{NO}_2})} \cdot d\mathbf{S}}{\dot{m}_{\text{carburant}}}, \quad (11.7)$$

où  $\rho \mathbf{v}$  est la quantité de mouvement,  $S$  est la section de sortie de la chambre et  $\dot{m}_{\text{carburant}}$  est le débit de carburant injecté dans la chambre. Les indices de NO et de NO<sub>x</sub> expérimentaux ont été calculés en faisant une moyenne arithmétique des fractions massiques obtenues aux différents points de prélèvement de gaz répartis le long du bras de mesure. Il n'est pas garanti que ces indices soient égaux à celui que l'on obtiendrait en faisant une moyenne sur la section de sortie de la chambre. C'est là une limitation importante des moyens expérimentaux pour ce type de mesure. Les indices ainsi obtenus sont tout de même pris comme référence faute de mieux.

On constate que les indices obtenus à partir des simulations utilisant le modèle FTC sont influencés par le modèle d'interaction chimie-turbulence, mais restent tous du même ordre de grandeur. Ainsi, quel que soit le modèle d'ICT utilisé, l'indice de NO est surestimé par le calcul CFD. De plus, le rapport entre l'indice de NO<sub>x</sub>, et l'indice de NO mesuré expérimentalement n'est pas retrouvé par les simulations. Cela est dû à un manque de production du NO<sub>2</sub> sur lequel on reviendra.

Indices d'émission [g.kg <sub>C<sub>10</sub>H<sub>22</sub></sub> <sup>-1</sup> ]	Expérience	Simulation, $\kappa = 100$		
		No ICT model	TFLES	TFLES + $P_\beta(Z)$
NO	0,9	4,1	2,4	5,6
NO <sub>x</sub>	2,3	6,75	4,0	9,3

TABLE 11.5 – Indices d'émission de NO et de NO<sub>x</sub> en sortie de chambre de combustion.

Les indices de NO ne donnent qu'une mesure intégrale de la quantité de NO traversant la section de sortie. Les profils de fractions molaires donnés dans la figure 11.26 permettent de compléter cette analyse. Comme précédemment pour la température et la richesse locale, l'allure générale du profil de NO est correctement reproduite, avec un pic de NO au niveau de l'axe ( $Y = 0$ ). Pour le reste, les concentrations de NO sont surestimées en tout point et les profils montrent également que la production de NO<sub>2</sub> est nettement sous-estimée par le calcul. Ceci s'explique par le fait que dans la table FTC utilisée, il n'y a aucun point ( $Z, c$ ) pour lequel le rapport  $\frac{Y_{\text{NO}_2}}{Y_{\text{NO}}}$  soit du même ordre de grandeur que celui mesuré en sortie de chambre (environ 1,5). En effet, celui-ci atteint au maximum 0,13 dans la table, y compris dans la partie étendue par calcul PFR (Plug Flow Reactor). Par conséquent, la table FTC utilisée est inapte à décrire correctement la transformation du NO en NO<sub>2</sub>. Il peut y avoir deux explications à cela. D'une part, les réactions de transformation du NO en NO<sub>2</sub> peuvent être mal modélisées dans la cinétique chimique de Luche utilisée pour générer la table. D'autre part, les expériences élémentaires de flamme prémélangée et de PFR, sur lesquelles se base la génération de la table FTC utilisée, ne donnent peut-être à aucun moment des conditions thermodynamiques favorables à la transformation du NO en NO<sub>2</sub>. Autrement dit, il se peut que la création du NO<sub>2</sub> se fasse dans un autre régime que le régime prémélangé. Sachant que l'on a montré précédemment qu'une faible part de la combustion semble se faire en régime prémélangé dans le foyer TLC, cette hypothèse peut être envisagée.

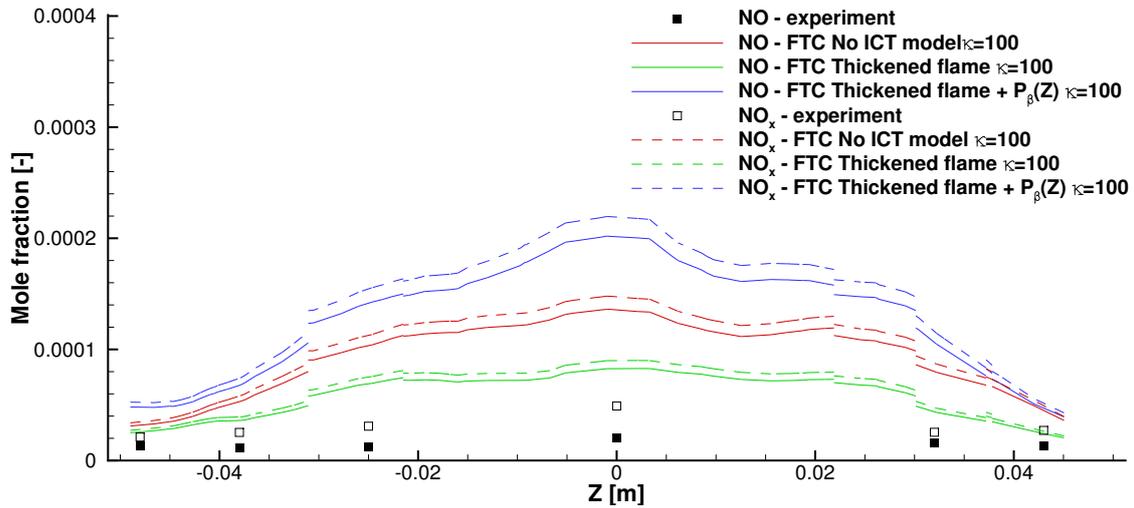


FIGURE 11.26 – Profils de fraction molaire de NO et de NO<sub>x</sub> (NO+NO<sub>2</sub>) en sortie de la chambre de combustion, pour  $\kappa = 100$  et différentes approches de modélisation de l’interaction chimie turbulence. *Les discontinuités des profils sont dues à un problème de post-traitement lié au découpage du domaine de calcul pour la parallélisation. En aucun cas ces discontinuités n’apparaissent dans les solutions obtenues avec le code CEDRE.*

### 11.11 Indices d’émission de CO et d’imbrûlés

Pour finir, on s’intéresse aux émissions de CO et d’imbrûlés ( $C_xH_y$ ). Le champ de CO est donné sur la figure 11.27. On voit que celui-ci est produit dans la flamme, puis est très rapidement dilué par l’écoulement d’air issu de l’étage principal, et enfin consommé, pour donner un niveau quasiment nul en sortie.

Le tableau 11.6 permet de comparer des indices de CO et d’imbrûlés en sortie de chambre. Ceux-ci sont largement sous-estimés par le calcul, quelle que soit la modélisation de l’interaction chimie-turbulence utilisée. Cela peut être causé par le fait que la table est de type prémélangé alors qu’une faible partie de l’écoulement se trouve dans ce régime. Par ailleurs, on retrouve le même problème que pour le NO : Il y a certaines zones de l’écoulement dans lesquelles on observe une consommation du CO due uniquement aux termes de relaxation, comme le montre la figure 11.28. La structure de flamme prise en compte dans la table FTC n’est donc pas adaptée au calcul des taux de production du CO dans ces zones. Néanmoins, compte tenu des écarts importants sur les indices d’imbrûlés et de CO par rapport à l’expérience, il est très probable qu’il y ait une autre source d’erreur. Par exemple, la sous-estimation des pertes thermiques aux parois peut avoir un impact très important sur la prédiction de la formation du CO. Un refroidissement de l’écoulement près des parois plus important dans l’expérience que dans le calcul pourrait causer un figeage des réactions d’oxydation du CO et des imbrûlés qui n’est pas capturé dans la simulation. Si tel est le cas, il est nécessaire d’introduire la prise en compte des pertes thermiques dans la table FTC, pour améliorer la prédiction du CO et des imbrûlés, une fois que l’on se sera assuré que les transferts convectifs aux parois de la chambre sont correctement calculés. En effet, sans pertes thermiques dans la table, les taux de réaction restent évalués avec la température adiabatique du mélange, quelle que soit la température locale obtenue dans CEDRE.

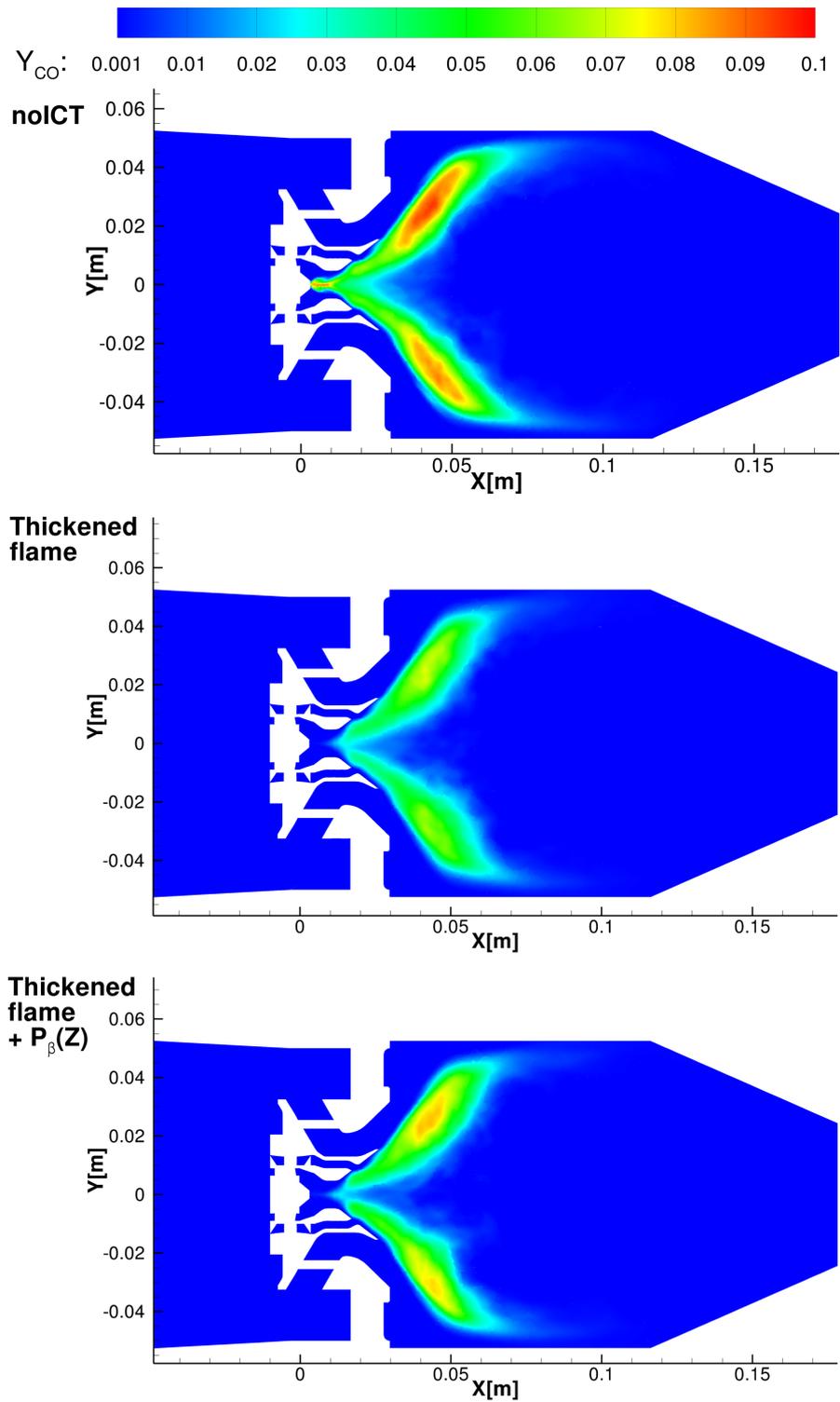


FIGURE 11.27 – Champs moyens de la fraction massique transportée de CO. Les résultats ont été obtenus avec différentes modélisation de l'interaction chimie-turbulence, en prenant  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{\mathcal{M}_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{\mathcal{M}_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{\mathcal{M}_{NO}}$  et  $\kappa = 100$ .

Indices d'émission [ $\text{g.kg}_{\text{C}_{10}\text{H}_{22}}^{-1}$ ]	Expérience	Simulation, $\kappa = 100$		
		No ICT model	TFLES	TFLES + $P_\beta(Z)$
CO	173,1	5,9	14,1	11,88
$\text{C}_x\text{H}_y$	83,3	15,1	37,0	27,2

TABLE 11.6 – Indices d'émission de CO et d'imbrûlés ( $\text{C}_x\text{H}_y$ ) en sortie de la chambre de combustion.

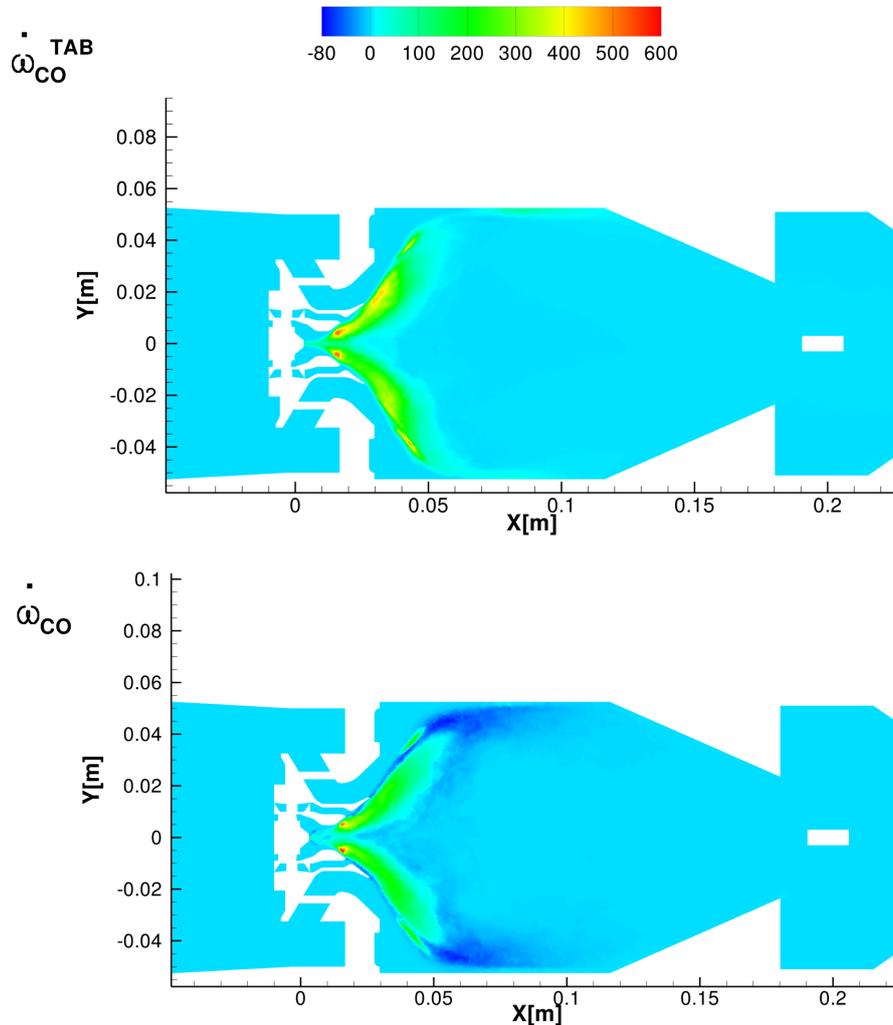


FIGURE 11.28 – Taux de réaction du CO : en haut, taux extraits de la table, donc sans prise en compte des termes de relaxation; en bas, taux incluant les termes de relaxation. Calcul réalisé avec  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{\mathcal{M}_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{\mathcal{M}_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{\mathcal{M}_{\text{NO}}}$ ,  $\kappa = 100$  et les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » couplées pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

## 11.12 Effet de la valeur de $\kappa$ sur les résultats.

On a indiqué que les calculs effectués avec une variable d'avancement définie comme  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{\mathcal{M}_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{\mathcal{M}_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{\mathcal{M}_{\text{NO}}}$  et une valeur de  $\kappa$  égale à 10 conduisaient à d'importantes erreurs numériques sur l'estimation des niveaux de NO. Ce problème est dû à un poids trop faible de l'espèce NO dans la variable d'avancement avec cette valeur de  $\kappa$ , comme montré dans ce qui suit.

La figure 11.29 permet de comparer les taux de réaction extraits directement de la table avec ceux incluant les termes de relaxation, pour  $\kappa = 10$  (comparaison effectuée précédemment pour une valeur de  $\kappa$  égale à 100). Le terme source de NO incluant le terme de relaxation ne correspond en aucun point de l'écoulement au terme source extrait directement de la table. Ainsi, l'évolution du NO n'est pas pilotée par les taux de réaction chimiques, mais par la relaxation de la concentration du NO vers la valeur donnée par la table chimique. Le NO étant une composante de la variable d'avancement, la fraction massique extraite de la table ne devrait pas être éloignée de celle qui est transportée dans le code CEDRE au point de rendre les termes de relaxation prépondérants. C'est néanmoins le cas si le poids du NO dans la variable d'avancement est insuffisant. C'est pourquoi une valeur de  $\kappa$  égale à 100 a été adoptée.

Ihme et al. [44] avaient déjà évoqué la nécessité de fixer une valeur de  $\kappa$  suffisamment élevée pour limiter les erreurs numériques sur le NO, et proposé une valeur de  $\kappa$  égale à 1000. Néanmoins, avec cette valeur, l'évolution de la variable d'avancement obtenue n'est pas monotone le long de l'axe des flammes prémélangées 1D utilisées pour générer la table FTC (du moins avec la cinétique chimique de Luche, et pour les conditions thermodynamiques du point de fonctionnement TLC étudié). C'est d'ailleurs pour cette raison que la valeur de 10 avait été retenue initialement pour  $\kappa$ . Finalement, une valeur de  $\kappa$  égale à 100 semble constituer un bon compromis entre la monotonie et la limitation des erreurs numériques pour le NO. Les résultats obtenus avec  $\kappa = 10$  ne sont pas présentés ici. Néanmoins, ceux-ci sont disponibles en annexe H à titre d'information.

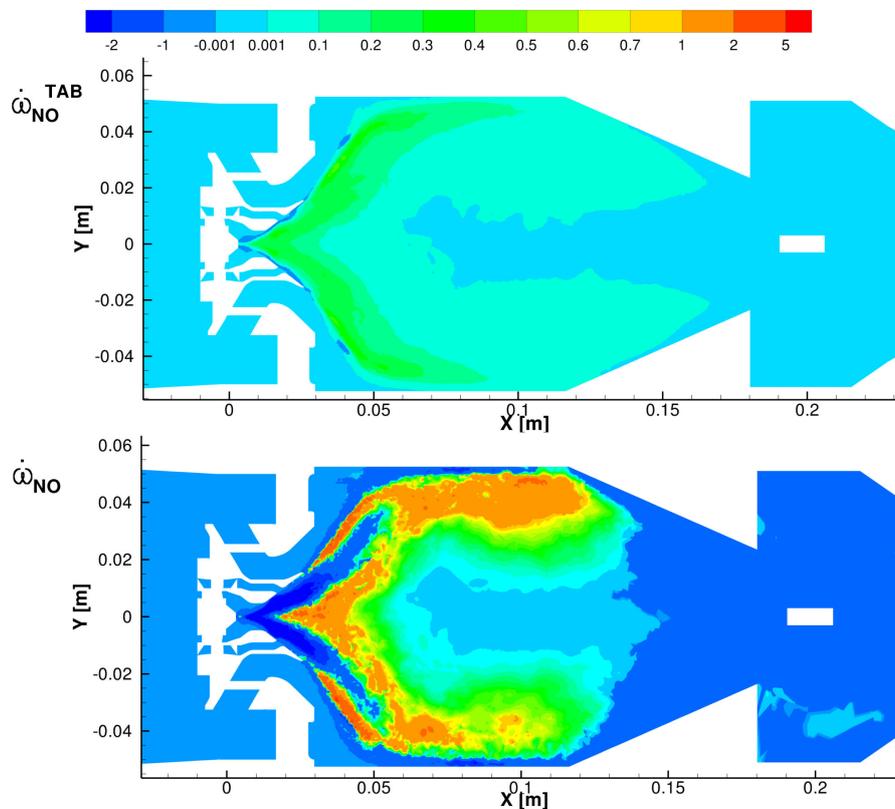
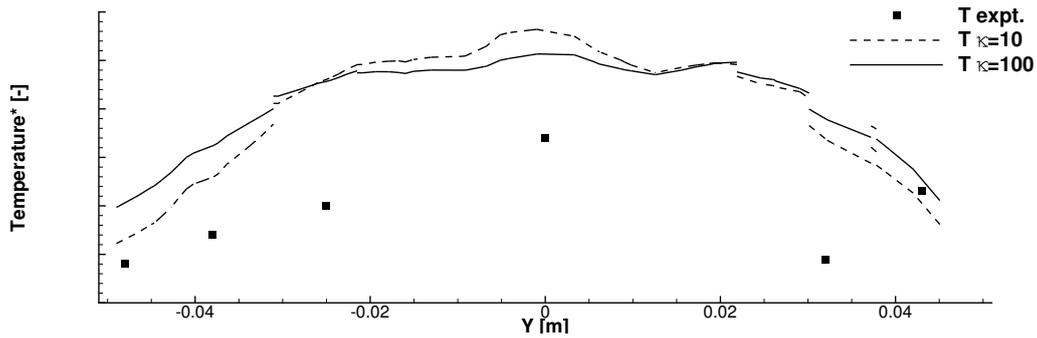


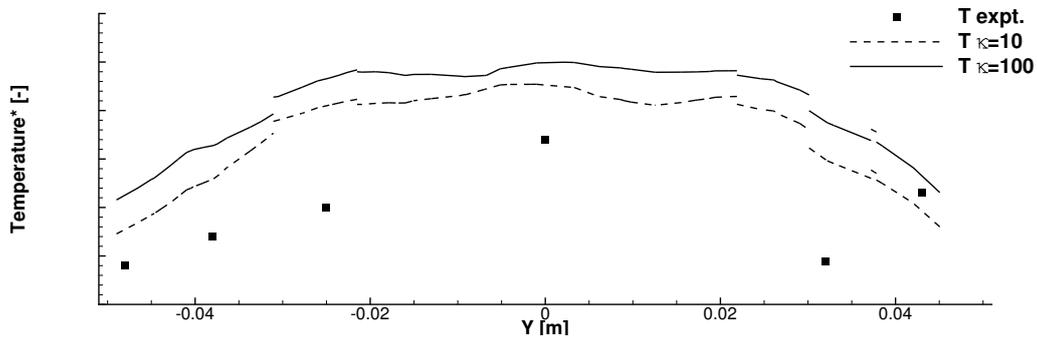
FIGURE 11.29 – Taux de réaction du CO : en haut, taux extraits de la table, donc sans prise en compte des termes de relaxation ; en bas, taux incluant les termes de relaxation. Calcul réalisé avec  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{\mathcal{M}_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{\mathcal{M}_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{\mathcal{M}_{\text{NO}}}$ ,  $\kappa = 100$  et les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » couplées pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

On a évoqué en début de ce chapitre l'hypothèse que la valeur de  $\kappa$  puisse influencer essentiellement les réactions portant sur le NO en aval de la flamme, mais n'ait pas d'influence sur les paramètres principaux de l'écoulement comme la température. En réalité, sur les calculs réalisés, on observe des écarts sur la température en sortie pouvant aller jusqu'à 100 K, sur les calculs effectués sans modèle d'interaction chimie-turbulence, ou avec une approche « flamme épaissie », comme le montre la figure 11.30. Le fait d'obtenir une dépendance si marquée de la température vis-à-vis de la formulation de la variable d'avancement est très critique pour la modélisation FTC. En effet, il devrait normalement être possible d'interchanger les définitions de  $\hat{c}$  du moment que celles-ci conduisent à des évolutions monotones et croissantes de  $\hat{c}$  dans la flamme. Le fait que cela ne soit vrai que pour le couplage des approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » n'a pas pu être expliqué. Cela est toutefois encourageant concernant la confiance que l'on peut accorder aux résultats obtenus avec cette modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

no ICT modeling



« thickened flame »



« thickened flame » +  $P_\beta(Z)$

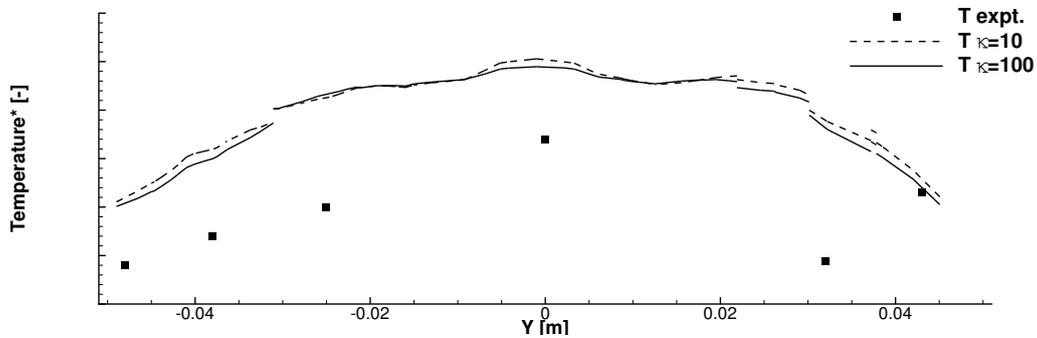


FIGURE 11.30 – Variation de température en sortie de chambre liée au changement de définition de la variable d'avancement ( $\kappa = 10$  ou  $\kappa = 100$ ), pour différentes modélisations de l'interaction chimie-turbulence (la température est adimensionnée).

### 11.13 Effet du couplage des approches « PDF de $Z$ présumée » et « flamme épaissie » sur le calcul du facteur d'épaississement.

Les champs instantanés du facteur d'épaississement ont été comparés pour les deux calculs utilisant l'approche flamme épaissie, l'un l'utilisant seule et l'autre couplée avec une PDF de  $Z$  présumée. Ceux-ci sont présentés sur la figure 11.31. On constate que le facteur d'épaississement est beaucoup moins important dans le cas où le modèle est couplé avec une PDF de  $Z$  présumée. L'origine de cette différence se trouve dans l'évaluation de l'épaisseur de flamme laminaire à partir de la table (on rappelle que le facteur d'épaississement est proportionnel à cette grandeur). En effet, l'épaisseur de flamme laminaire obtenue dans le cas de l'utilisation d'une PDF présumée pour  $Z$  est le résultat de la

convolution de la PDF de  $Z$  avec l'épaisseur de flamme extraite de la table en chaque valeur de  $Z$ . On note cette épaisseur  $\delta_l^0(Z, Z_v)$ . L'épaisseur obtenue sans PDF présumée pour  $Z$  est équivalente à celle obtenue avec une PDF présumée et une variance  $Z_v$  nulle :  $\delta_l^0(Z, Z_v = 0)$ . Pour une richesse donnée, plus la variance  $Z_v$  est grande, plus le résultat de la convolution,  $\delta_l^0(Z, Z_v)$ , est éloigné de l'épaisseur  $\delta_l^0(Z, Z_v = 0)$ . Sachant que l'épaisseur de flamme tend asymptotiquement vers l'infini en  $Z = 0$  et  $Z = 1$ , la convolution avec une PDF présumée tend généralement à augmenter l'épaisseur de flamme, comme le montre la figure 11.32 qui trace le rapport  $\frac{\delta_l^0(Z, Z_v)}{\delta_l^0(Z, Z_v=0)}$ , en un instant donné du calcul FTC avec « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée ». La conséquence de cela est que le couplage de l'approche « PDF de  $Z$  présumée » avec l'approche « flamme épaissie » tend à diminuer l'intensité de l'épaississement artificiel imposé par cette dernière.

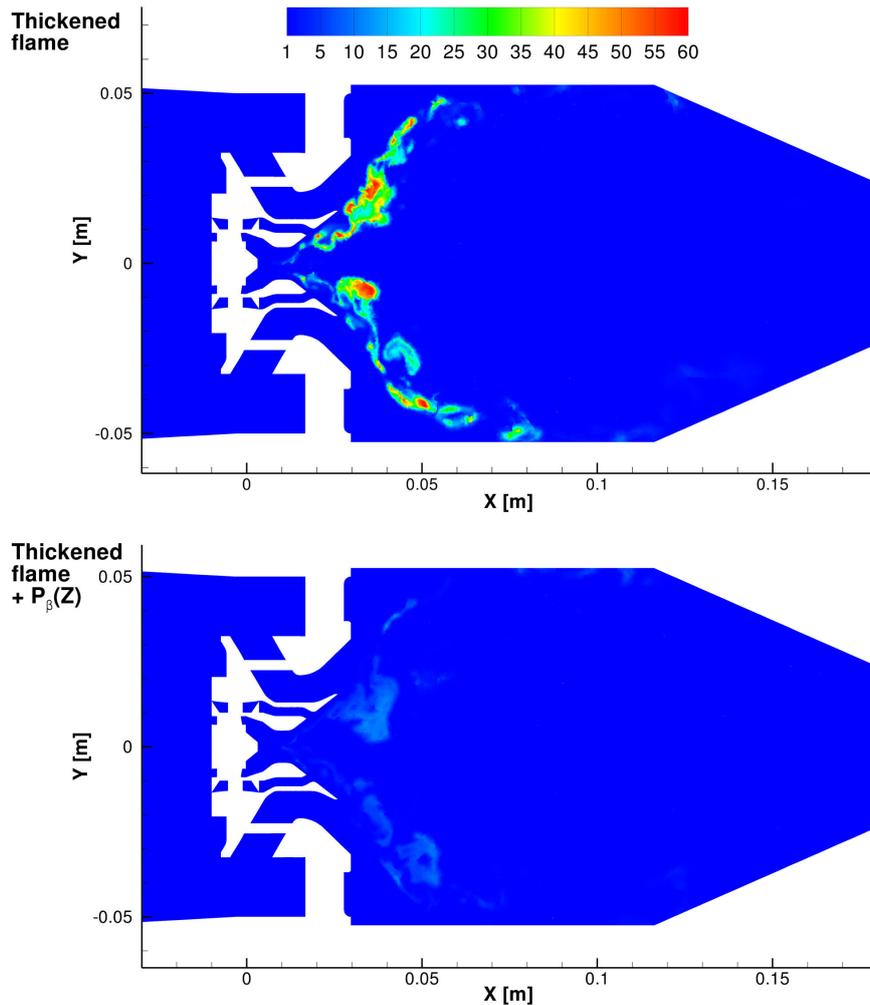


FIGURE 11.31 – Comparaison de deux champs instantanés du facteur d'épaississement obtenus dans les calculs avec l'approche « flamme épaissie » utilisée seule (en haut) ou couplée avec l'approche « PDF de  $Z$  présumée » (en bas).

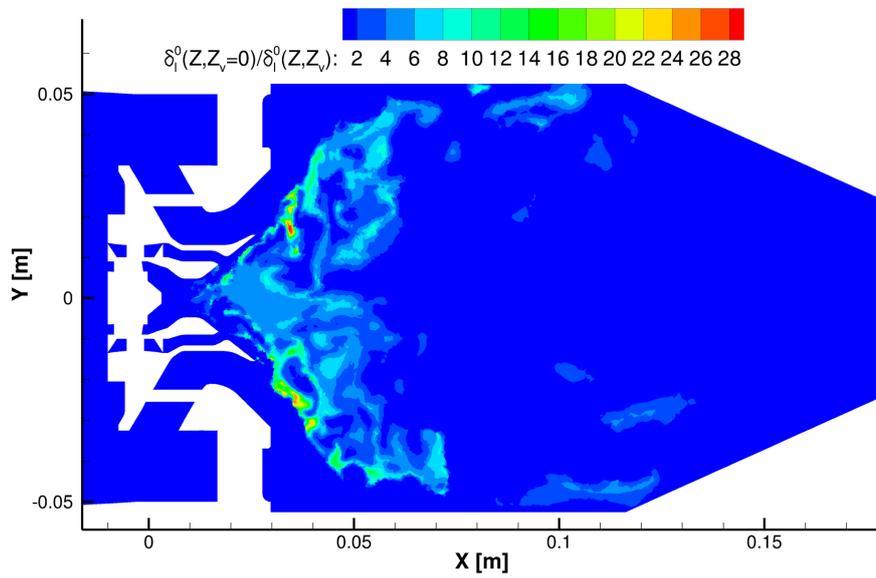


FIGURE 11.32 – Effet des fluctuations de  $Z$  en sous-maille sur l'évaluation de l'épaisseur de flamme, représenté par le rapport  $\frac{\delta_L^0(Z, Z_v)}{\delta_L^0(Z, Z_v=0)}$ .



Les calculs effectués avec le modèle FTC sur la configuration TLC ont montré que celui-ci permettait de reproduire correctement le dégagement de chaleur total au sein de la chambre, ce qui est un premier point de validation très important pour un modèle de combustion. Des écarts importants avec l'expérience concernant la température au sein du foyer ont été constatés mais ceux-ci ne sont pas imputables directement à la modélisation FTC. En effet, il a été montré que des calculs réalisés avec un modèle de combustion différent (cinétique à deux étapes), toutes choses égales par ailleurs, donnaient des écarts avec l'expérience quasiment aussi élevés qu'avec le modèle FTC. Le surplus d'erreur sur la température apporté par le modèle FTC est attribuable aux fortes variations du régime de combustion au sein du foyer. Le modèle FTC basé sur une table de type « flammes de prémélange » semble mal adapté à la modélisation des termes source chimiques dans certaines zones de l'écoulement. C'est un point qui pourra être amélioré à l'avenir en incluant dans le modèle la prise en compte des régimes de combustion multiples dans l'écoulement. Des pistes ont été données concernant ce point dans le chapitre 2.

Concernant la prédiction des émissions polluantes, la validation proprement dite des résultats n'a pas pu être effectuée puisque la température de l'écoulement n'est pas parfaitement reproduite, ce qui entraîne inévitablement un biais dans la prédiction de la formation des espèces polluantes. Néanmoins, les calculs ont tout de même apporté des enseignements concernant les modélisations spécifiques utilisées pour les polluants. La topologie du champ de fraction volumique de suie a pu être correctement reproduite au moyen du couplage des modèles FTC et de Leung, ce qui est un point très positif compte tenu de l'état de l'art sur la prédiction des suies. Les niveaux de fraction volumique de suie sont en revanche surestimés au sein du foyer, tandis qu'ils sont sous-estimés d'un ordre de grandeur en sortie de la chambre de combustion. La principale raison de ces erreurs est certainement la valeur des constantes du modèle de Leung qui ne sont pas adaptées aux caractéristiques de l'écoulement dans le foyer TLC. Il est possible d'ajuster ces constantes, mais il faudrait en premier lieu obtenir un champ de température correct sur la configuration TLC. Même s'il est nécessaire d'ajuster les constantes à la configuration de calcul étudiée, le couplage du modèle de Leung avec l'approche FTC reste une méthode intéressante car il offre un coût de calcul raisonnable par rapport à d'autres modèles de combustion dédiés à la simulation de la formation des suies. Concernant les émissions de  $\text{NO}_x$ , les simulations donnent un niveau en sortie trop élevé, mais il est difficile de savoir si la modélisation spécifique utilisée pour le NO est à l'origine de cette surestimation, puisque le modèle s'appuie sur un champ de température qui n'est pas exactement celui qui est obtenu expérimentalement (et implicitement sur des champs de fraction de mélange et de variable d'avancement mal évalués). En revanche, il est évident que la conversion du NO en  $\text{NO}_2$  est très mal prédite par le modèle FTC. Une cause possible serait que le  $\text{NO}_2$  se forme en régime partiellement prémélangé, ou de diffusion, régimes pour lesquels la table FTC utilisée n'est pas bien adaptée. Il n'est pas non plus impossible que la cinétique chimique utilisée pour générer la table décrive de façon incorrecte les réactions faisant intervenir l'espèce  $\text{NO}_2$ .

Les émissions de CO et d'imbrûlés sont largement sous-estimées par le calcul, mais là encore, il n'est pas à exclure que des problèmes d'évaluation des pertes thermiques convectives en paroi soient

à l'origine de ces écarts. En effet, ces pertes thermiques peuvent entraîner le figeage des réactions d'oxydation du CO et des imbrûlés, entraînant des émissions plus importantes de ces espèces en sortie de chambre. Si tel est le cas, l'amélioration des prévisions des niveaux de CO et d'imbrûlés passe par une modélisation plus adaptée des transferts convectifs en paroi, et par l'introduction des pertes thermiques dans la table FTC, pour tenir compte de leur effet sur les taux de réaction.

Concernant la modélisation de l'interaction chimie-turbulence, on constate qu'en l'absence de modèle, les erreurs sur les profils de température dans la chambre sont plus élevées (jusqu'à 100 K). L'utilisation d'un modèle d'ICT est donc nécessaire. Concernant le choix de ce modèle, les prévisions obtenues avec l'approche « flamme épaissie » utilisée seule, ou les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » couplées donnent sensiblement les mêmes résultats sur les niveaux de température. On note cependant que la position de la flamme de l'injection multi-points est mieux reproduite avec l'approche « flamme épaissie », ce qui semble indiquer que cette approche est plus adaptée. Cependant, les simulations ont aussi montré une influence du modèle d'ICT sur les niveaux de polluants, qu'il s'agisse des suies ou des  $\text{NO}_x$ . Il est nécessaire d'étudier cette influence dans des circonstances où l'écoulement est bien calculé en termes de température et de vitesse.

# Conclusion et perspectives

---

L'objectif de cette étude était de proposer une modélisation de la combustion turbulente capable de prédire la formation des espèces polluantes dans les foyers de moteurs aéronautiques. Deux types de polluants ont été ciblés : les  $\text{NO}_x$ , du fait du durcissement actuel et à venir, de la réglementation concernant leurs émissions ; les particules de suies, car elles vont faire prochainement l'objet de nouvelles normes. Malgré la priorité accordée à ces espèces, la modélisation retenue devait tout de même permettre de prédire la formation d'autres polluants comme le CO ou les imbrûlés, même si des optimisations des modèles sont à prévoir pour améliorer la précision de ces prédictions.

La modélisation retenue pour atteindre cet objectif repose sur le couplage de plusieurs modèles :

- Le modèle FTC (Flamelet Tabulated Chemistry) constitue le socle de cette modélisation. C'est ce modèle qui a fait l'objet de l'essentiel des développements présentés dans ce mémoire. En particulier, celui-ci a été modifié de façon à être utilisable lors de la simulation de la combustion diphasique. La génération des tables FTC a également été améliorée, afin de prendre en compte les réactions de formation des  $\text{NO}_x$  dans les gaz brûlés.
- Le modèle de Leung, couplé au modèle FTC, est utilisé pour la prédiction de la formation des suies dans les foyers aéronautiques.
- Le modèle de « flamme épaissie », éventuellement couplé à une approche de PDF présumée, permet d'ajouter la prise en compte de l'interaction chimie-turbulence dans le cadre de simulations LES.

Cette modélisation a été appliquée dans un premier temps à différents cas tests, dont une flamme de diffusion laminaire académique produisant des suies. Ces simulations ont permis de valider les développements du modèle FTC et les différents couplages de modèles mis en place, dans des conditions reproduisant certaines caractéristiques des foyers aéronautiques. Puis, la modélisation proposée a été appliquée à la simulation du foyer TLC. Celui-ci est doté d'un injecteur aéronautique nouvelle génération, équipant une chambre de combustion testée expérimentalement dans des conditions représentatives des différentes phases de vol d'un avion commercial.

D'une manière générale, les calculs utilisant le modèle FTC ont permis de reproduire correctement le dégagement de chaleur lié à la combustion, y compris dans les écoulements diphasiques, ce qui a été rendu possible par les améliorations du modèle décrites dans les chapitres 1 et 5.

Ces simulations ont également montré une bonne capacité à reproduire la topologie du champ de fraction volumique de suie. Lors de la simulation d'une flamme de diffusion académique, l'allure de ce champ a été retrouvée, bien que la position du pic de fraction volumique de suie soit située un peu en amont de celle obtenue dans l'expérience. Lors de la simulation du foyer TLC, la topologie du champ de fraction volumique de suie a été correctement reproduite sur toute la partie de l'écoulement accessible aux mesures optiques. Cependant, il est nécessaire d'ajuster les constantes du modèle de Leung selon la configuration étudiée pour obtenir les niveaux absolus de fraction volumique. Ainsi, les résultats obtenus sur TLC avec les constantes par défaut se traduisent par une surestimation du niveau de suie au sein du foyer et une sous-estimation en sortie de celui-ci. Cela ne disqualifie pas pour autant le couplage FTC-modèle de Leung, car il offre un temps de calcul tout à fait acceptable par rapport à d'autres modèles plus complexes de la littérature, tout en apportant des informations précieuses sur la topologie du champ de fraction volumique de suie.

Concernant la simulation des  $\text{NO}_x$ , une méthode d'extension de la table FTC par calcul de réacteur piston (ou Plug Flow Reactor) a été proposée. Celle-ci a permis de reproduire l'évolution de la fraction

massique de NO dans les gaz brûlés d'une flamme 1D, ce qui n'a pas pu être reproduit avec d'autres approches de la littérature reposant sur une table non-étendue. Lors de la simulation du foyer TLC, une surestimation de la prédiction des niveaux de NO<sub>x</sub> en sortie de chambre a été observée. Cependant, on ne peut pas directement attribuer cette erreur au modèle FTC utilisant la table étendue. En effet, d'autres grandeurs, comme la température ou la fraction de mélange, ne sont pas reproduites avec exactitude, ce qui introduit un biais dans la modélisation des NO<sub>x</sub>. Une mauvaise reproduction du ratio NO/NO<sub>2</sub> en sortie de chambre est également obtenue dans les simulations. Il reste à déterminer si cette erreur est due au modèle FTC ou à une mauvaise évaluation des vitesses de certaines réactions dans la cinétique chimique utilisée pour générer la table FTC.

La simulation du foyer TLC a mis en évidence une dégradation des prédictions de température avec la modélisation FTC par rapport aux résultats obtenus directement avec une cinétique chimique à deux étapes. Dans le même temps, une analyse des régimes de combustion rencontrés dans le foyer a été faite au moyen d'un critère de type Takeno. Celle-ci a montré que les réactions semblent plutôt se produire dans un régime seulement partiellement prémélangé, ce qui est dû à l'évaporation des gouttes de carburant dans la zone de réaction. Par conséquent, il semble que la table utilisée, composée uniquement des solutions de flamme de prémélange, soit mal adaptée à la modélisation de la combustion dans cette configuration. On a déjà évoqué ce problème dans le chapitre 5 et différentes solutions ont été proposées pour y remédier. La première consiste à coupler des tables de type prémélange et de type diffusion, au moyen d'un critère local de type indice de Takeno. La seconde consiste à étendre la dimension de la table FTC, de façon à permettre l'indexation de solutions de flammes de prémélange, de prémélange partiel et de diffusion, au sein d'une même table.

On a également évoqué la possibilité que les niveaux de CO soient mal prédits du fait de la non prise en compte du figeage de certaines réactions, lequel serait dû à la baisse de la température des gaz brûlés près des parois. La prise en compte de ce figeage des réactions par le modèle FTC passe par l'ajout d'une dimension à la table chimique. Cette nouvelle dimension permettrait d'incorporer dans la table des solutions de flammes obtenues pour différents niveaux de pertes thermiques.

On constate que pour lever certaines limitations de la modélisation FTC, il est nécessaire de passer par une augmentation des dimensions de la table. Néanmoins, il faut savoir qu'une telle augmentation n'est pas sans conséquences. D'une part, cela alourdirait l'occupation mémoire de la table. D'autre part, cela pourrait entraîner une augmentation significative du temps de calcul. En effet, le temps d'interpolation dans la table est directement lié au temps mis pour la parcourir en mémoire, lequel augmente avec sa taille. L'ajout d'au moins deux dimensions à la table pourrait dégrader fortement la réduction du temps de calcul qu'offre normalement la chimie tabulée. D'autres méthodes de réduction de la chimie sont peut-être alors à envisager. On peut citer la méthode proposée par Ribert et al.[87], consistant à hybrider chimie tabulée et résolution directe de la cinétique complexe. On a déjà évoqué cette méthode car elle offre aussi l'opportunité de prendre en compte la rétroaction du modèle de Leung sur la concentration des précurseurs de suies ce qui, on l'a vu, n'est pas possible avec le modèle FTC. Avec l'augmentation continue de la puissance des calculateurs on peut également envisager, à plus long terme, la possibilité de résoudre des cinétiques chimiques contenant quelques dizaines d'espèces. Ces cinétiques pourraient alors contenir une description des réactions chimiques suffisamment précise pour prédire la formation de certains précurseurs de suie ou la formation d'espèces comme les NO<sub>x</sub>. Pour cela, un important travail reste à effectuer afin de mettre au point les techniques d'obtention de telles cinétiques chimiques. En effet, il y a actuellement un espace à combler entre les cinétiques réduites contenant moins d'une dizaine d'espèces, et les cinétiques plus détaillées, contenant généralement une centaine d'espèces ou plus.

Pour conclure, les différentes perspectives envisagées pour améliorer la prédiction de la formation des polluants dans les foyers aéronautiques sont évaluées dans le tableau ci-après, en fonction du gain escompté quant à la précision des prédictions et de l'effort nécessaire à leur mise en œuvre.

	Gain escompté	Effort estimé
Prise en compte des différents régimes de combustion (prémélange, prémélange partiel, diffusion) par le couplage de tables de prémélange et de diffusion au moyen d'un indice de régime type Takeno.	2/5	1/5
Prise en compte des différents régimes de combustion (prémélange, prémélange partiel, diffusion) par l'augmentation des dimensions de la table afin d'inclure dans celle-ci des solutions pour l'ensemble de ces régimes.	3/5	3/5
Ajout d'une dimension à la table permettant d'inclure des solutions de flamme obtenues avec différents niveaux de pertes thermiques.	2/5	2/5
Développement de l'approche hybride proposée dans [87].	3,5/5	3/5
Obtention de cinétiques chimiques semi-détaillées (quelques dizaines d'espèces).	4/5	5/5

TABLE 12.1 – Perspectives d'amélioration des prédictions de formation des polluants dans les foyers aéronautiques.



# Annexes



# ANNEXE A

## Présentation du code CEDRE et des modèles pour l'énergétique.

Dans ce chapitre on donne un aperçu du code CEDRE, qui a été le support de tous les travaux effectués durant cette thèse. Le code CEDRE est une plateforme de calcul dédiée à la simulation numérique des phénomènes multi-physiques dans le domaine de l'énergétique et de la propulsion. Celui-ci est développé avec une approche multi-solveurs permettant un traitement modulaire des différents phénomènes physiques (gaz, phase dispersée, conduction, rayonnement, film, chimie complexe) tout en prenant en compte le couplage de ces phénomènes physiques par l'intermédiaire des échanges organisés entre ces solveurs. L'ensemble de la chaîne de calcul permet l'utilisation de maillages non structurés à base de polyèdres quelconques, ce qui facilite le traitement des géométries parfois complexes que l'on rencontre dans les foyers aéronautiques. On décrit ici les éléments de la chaîne CEDRE qui ont été utilisés pour réaliser les calculs présentés dans ce mémoire. Des informations complémentaires, concernant notamment les solveurs qui ne sont pas présentés dans ce mémoire, mais aussi des exemples de calcul, et des modèles pour l'énergétique, peuvent être trouvées dans le manuel théorique de la chaîne CEDRE [72] et dans le deuxième volume de *AerospaceLab Journal* [71].

### Sommaire

---

<b>A.1</b>	<b>Solveur CHARME : modélisation de la phase gazeuse réactive . . . . .</b>	<b>184</b>
A.1.1	Modélisation d'un écoulement multi-espèces réactif . . . . .	184
A.1.2	Modélisation des écoulements laminaires . . . . .	184
A.1.3	Modélisation de la turbulence . . . . .	185
<b>A.2</b>	<b>Solveur SPARTE : modélisation lagrangienne de la phase dispersée . . . . .</b>	<b>187</b>
A.2.1	Modélisation de la phase dispersée . . . . .	187
A.2.2	Solveur lagrangien et modèles physiques pour les gouttes . . . . .	188
	Equations résolues . . . . .	188
	Modèles physiques . . . . .	189
	Conditions aux limites . . . . .	190
<b>A.3</b>	<b>Solveur ASTRE : calcul des transferts radiatifs . . . . .</b>	<b>191</b>
A.3.1	Modélisation des transferts radiatifs . . . . .	191
A.3.2	Calcul des transferts radiatifs par une méthode de Monte-Carlo . . . . .	192

---

## A.1 Solvateur CHARME : modélisation de la phase gazeuse réactive

### A.1.1 Modélisation d'un écoulement multi-espèces réactif

Le solveur CHARME permet de traiter les écoulements turbulents compressibles multi-espèces réactifs par la résolution d'un système d'équations de type Navier-Stokes. C'est le solveur du code CEDRE qui est le plus fréquemment utilisé. Des équations de conservation sont résolues pour la quantité de mouvement  $\rho\mathbf{v}$ , la masse de chaque espèce du mélange  $\rho Y_k$  et l'énergie totale du mélange  $\rho e_t$ . À titre d'exemple, dans le cas d'un mélange idéal de gaz parfaits, l'énergie totale du mélange est définie ainsi :

$$e_t = \sum_{k=1}^{n_e} Y_k h_{f_k}^0 + \int_{T_0}^T c_v dT - \frac{RT_0}{\mathcal{M}} + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}, \quad (\text{A.1})$$

où  $h_{f_k}^0$  est l'enthalpie massique de formation de l'espèce  $k$  à la température de référence  $T_0$ ,  $c_v$  est la capacité calorifique massique à volume constant du mélange,  $R$  est la constante universelle des gaz parfaits, et  $\mathcal{M}$  est la masse molaire du mélange. D'autres types de mélanges que le mélange idéal de gaz parfaits peuvent être traités par CHARME. Leurs propriétés sont évaluées dans CEDRE par une bibliothèque dédiée.

### A.1.2 Modélisation des écoulements laminaires

Pour le traitement des écoulements laminaires, le système d'équations de transport résolu dans CHARME s'écrit ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) &= \nabla (\boldsymbol{\tau} - P \mathbf{I}) + \mathbf{S}_{qdm}, \\ \frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_t \mathbf{v}) &= -\nabla \cdot \mathbf{J}_{e_t} + \nabla \cdot [(\boldsymbol{\tau} - P \mathbf{I}) \mathbf{v}] + S_{e_t}, \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{v}) &= -\nabla \cdot \mathbf{J}_k + S_k, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

où  $\boldsymbol{\tau}$  est le tenseur des contraintes visqueuses,  $P$  est la pression,  $\mathbf{I}$  est la matrice identité,  $\mathbf{S}_{qdm}$  est le terme source des forces volumiques,  $\mathbf{J}_{e_t}$  est le flux de diffusion thermique,  $S_{e_t}$  est le terme source d'énergie totale,  $\mathbf{J}_k$  est le flux de diffusion de l'espèce  $k$ , et  $S_k$  est le terme source de l'espèce  $k$ . Des détails concernant ces termes sont donnés dans la suite.

La pression  $P$  est reliée aux grandeurs transportées au travers d'une loi d'état. Pour les gaz parfaits, on utilise classiquement  $\frac{P}{\rho} = \frac{R}{\mathcal{M}} T$ , où la température  $T$  est obtenue par la résolution de l'équation (A.1). Le tenseur des contraintes visqueuses est relié, dans le cas de fluides newtoniens tels que ceux traités par CHARME, au tenseur du taux de déformation :

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

où la viscosité dynamique  $\mu = \rho \nu$  est fonction de la viscosité cinématique  $\nu$  qui est une propriété du mélange calculée par la bibliothèque thermodynamique. La viscosité en volume  $\kappa$  est généralement négligée.

Le terme source de quantité de mouvement  $\mathbf{S}_{qdm}$  peut avoir plusieurs contributions : la force de gravité  $\rho \mathbf{g}$ ,  $\mathbf{g}$  étant l'accélération due à la pesanteur, ainsi que des contributions provenant d'échanges avec les autres solveurs. Par exemple, en présence de phase dispersée, une force de traînée s'exerce entre le gaz et les gouttes (voir section A.2).

Pour exprimer le flux de diffusion thermique  $\mathbf{J}_{e_t}$ , on néglige l'effet Dufour, qui représente l'effet des gradients de concentration des espèces sur la diffusion de la chaleur. Le flux d'énergie est donc fonction de la part du flux de chaleur obéissant à la loi de Fourier, ainsi que des flux d'enthalpie de formation générés par la diffusion moléculaire des espèces :

$$\mathbf{J}_{e_t} = -\lambda \nabla T + \sum_{k=1}^{n_e} h_{f_k}^0 \mathbf{J}_k. \quad (\text{A.4})$$

La conductivité thermique du mélange est évaluée ainsi :

$$\lambda = \sum_{k=1}^{n_e} Y_k \lambda_k, \quad (\text{A.5})$$

où  $\lambda_k$  est évalué au moyen d'une loi d'Eucken ( $\lambda_k = \mu_k c_{p_k} + \frac{5R}{4M_k}$ ) ou bien d'une hypothèse de nombre de Prandtl constant ( $\lambda = \frac{\mu c_p}{Pr}$ , avec  $Pr = cte$ ).

Les flux de diffusion moléculaire sont modélisés suivant une loi de Fick, modifiée par une vitesse de correction  $\mathcal{V}_c$  :

$$\mathbf{J}_k = -\rho D_k \nabla \widetilde{Y}_k + \rho Y_k \mathcal{V}_c, \quad (\text{A.6})$$

où le coefficient de diffusion de l'espèce  $k$  est défini au moyen d'une hypothèse de nombre de Schmidt constant, soit :

$$D_k = \frac{\nu}{Sc}, \text{ avec } Sc = cte, \quad (\text{A.7})$$

et la vitesse de correction est définie de façon à assurer que les flux de diffusion ne modifient pas le flux de masse total :

$$\sum_k (-D_k \nabla Y_k + \mathcal{V}_c) Y_k = 0 \quad (\text{A.8})$$

Enfin, le terme source de masse de l'espèce  $k$  a lui aussi plusieurs contributions dont la chimie. Les sources chimiques  $\dot{\omega}_k$  peuvent être estimées au moyen de différents modèles. Dans cette étude, on utilise principalement le modèle FTC, qui est présenté dans la première partie de ce mémoire. Un modèle de chimie directe est également utilisé. Celui-ci consiste à calculer directement dans CHARME les taux de réaction prescrits par une cinétique chimique. On rappelle qu'une cinétique chimique décrit un ensemble de  $n_r$  réactions élémentaires faisant intervenir  $n_e$  espèces au total. Les vitesses de réaction  $\mathcal{K}_r$  de chaque réaction élémentaire sont exprimées dans le sens direct (noté ') au moyen d'une loi d'Arrhenius-Kooij :

$$\mathcal{K}'_r = A_r T^{\beta_r} \exp\left(-\frac{Ea_r}{RT}\right), \quad (\text{A.9})$$

où la constante préexponentielle  $A_r$ , l'exposant  $\beta_r$  et l'énergie d'activation  $Ea_r$  de chaque réaction élémentaire constituent les données de la cinétique chimique. Ces données sont généralement obtenues par des mesures expérimentales, et peuvent éventuellement tenir compte d'une dépendance en pression. La vitesse de réaction dans le sens inverse (noté '') est exprimée en fonction de la vitesse dans le sens direct  $\mathcal{K}'_r$  et de la constante d'équilibre  $\mathcal{K}_r^{eq}$  de chaque réaction élémentaire :

$$\mathcal{K}''_r = \frac{\mathcal{K}'_r}{\mathcal{K}_r^{eq}} \quad (\text{A.10})$$

Les taux de réactions massiques  $\dot{\omega}_k$  calculés directement à partir de la cinétique chimique s'écrivent :

$$\dot{\omega}_k = \mathcal{M}_k \sum_{r=1}^{n_r} (\nu''_{kr} - \nu'_{kr}) \left( \mathcal{K}'_r \prod_{j=1}^{n_e} C_j^{\nu'_{jr}} - \mathcal{K}''_r \prod_{j=1}^{n_e} C_j^{\nu''_{jr}} \right), \quad (\text{A.11})$$

où  $\mathcal{M}_k$  est la masse molaire de l'espèce  $k$ ,  $\nu_{ab}$  est le coefficient stœchiométrique de l'espèce  $a$  dans la réaction élémentaire  $b$ , les exposants ' et '' font respectivement référence aux sens direct et inverse de la réaction élémentaire, et  $C_k$  est la concentration de l'espèce  $k$  dans le mélange. L'exposant  $\widetilde{\nu}_{ab}$  désigne soit le coefficient stœchiométrique  $\nu_{ab}$ , soit un coefficient dit exotique, obtenu lors de la génération d'une cinétique réduite.

### A.1.3 Modélisation de la turbulence

Dans la majorité des applications traitées par le solveur CHARME, l'écoulement est turbulent. Compte tenu des contraintes relatives au temps de calcul, les maillages utilisés ne permettent pas de résoudre toutes les échelles de la turbulence. Les grandeurs transportées sont donc des grandeurs filtrées ou moyennées, selon l'approche retenue pour modéliser la turbulence. Parmi les approches disponibles dans CHARME, on retiendra principalement l'approche RANS (Reynolds Averaged Numerical

Simulation) ou l'approche LES (Large Eddy Simulation). Ces deux approches nécessitent d'appliquer un opérateur de filtrage au système d'équations (A.2). L'opérateur est une moyenne temporelle<sup>1</sup> dans le cas du RANS :

$$\bar{\varphi} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{(t - t_0)} \int_{t_0}^t \varphi(t) dt, \quad (\text{A.12})$$

et un filtre passe-bas de noyau  $G_\Delta$  dans le cas de la LES<sup>2</sup> :

$$\bar{\varphi} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\kappa') G_\Delta(\kappa - \kappa') d\kappa'. \quad (\text{A.13})$$

Hormis pour la masse volumique, on applique aux grandeurs transportées un filtrage au sens de Favre :

$$\tilde{\varphi} = \frac{\bar{\rho}\bar{\varphi}}{\bar{\rho}}. \quad (\text{A.14})$$

Notons que l'on peut décomposer la variable  $\varphi$  en une partie moyenne (RANS) ou filtrée (LES), d'une part, et une partie fluctuante (RANS) ou de sous-maille (LES), d'autre part :

$$\varphi = \bar{\varphi} + \varphi' \quad , \quad \varphi = \tilde{\varphi} + \varphi''. \quad (\text{A.15})$$

Le filtrage des équations du système (A.2) fait apparaître des grandeurs filtrées devant être modélisées :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}} \otimes \tilde{\mathbf{v}}) &= \nabla \cdot (\overline{\boldsymbol{\tau}} - \bar{P}\mathbf{I}) + \overline{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^t} + \overline{\mathbf{S}_{qdm}}, \\ \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{e}_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{e}_t\tilde{\mathbf{v}}) &= \overline{-\nabla \cdot \mathbf{J}_{e_t}} + \nabla \cdot [(\overline{\boldsymbol{\tau}} - \bar{P}\mathbf{I})\tilde{\mathbf{v}}] + \overline{-\nabla \cdot \mathbf{J}_{e_t}^t} + \overline{S_{e_t}}, \\ \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{Y}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{Y}_k\tilde{\mathbf{v}}) &= \overline{-\nabla \cdot \mathbf{J}_k} + \overline{-\nabla \cdot \mathbf{J}_k^t} + \overline{S_k}. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

La modélisation de ces termes est nécessaire pour que le système d'équations soit fermé.

L'action de la turbulence sous l'échelle de la maille sur les échelles résolues apparaît sous la forme du tenseur des contraintes turbulentes ( $\boldsymbol{\tau}^t = -\bar{\rho}\widetilde{\mathbf{v}'' \otimes \mathbf{v}''}$ ). Ce tenseur est modélisé au moyen d'une hypothèse de Boussinesq, consistant à relier linéairement le tenseur des contraintes turbulentes  $\boldsymbol{\tau}^t$  aux gradients de vitesse, via une viscosité de sous-maille  $\mu_t$  :

$$\boldsymbol{\tau}^t \approx \mu_t \left[ \nabla \tilde{\mathbf{V}} + (\nabla \tilde{\mathbf{V}})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{V}}) \mathbf{I} \right]. \quad (\text{A.17})$$

Dans le cadre d'une approche LES, plusieurs modèles de viscosité de sous-maille sont disponibles dans CHARME, parmi lesquels on trouve le modèle de Smagorinsky :

$$\mu_t = \bar{\rho} (C_s \Delta)^2 (2\tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{S}})^{0.5}, \quad (\text{A.18})$$

où  $\mathbf{S}$  est le tenseur des gradients de vitesse et  $C_s$  une constante dont l'utilisateur fixe la valeur.

Les flux moyens (ou filtrés) sont évalués par analogie avec les flux laminaires :

$$\overline{\boldsymbol{\tau}} = \mu \left[ \nabla \tilde{\mathbf{v}} + (\nabla \tilde{\mathbf{v}})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}) \mathbf{I} \right], \quad (\text{A.19})$$

$$\overline{\mathbf{J}_{e_t}} = -\lambda \nabla \tilde{T} + \sum_{k=1}^{n_e} h_{fk}^0 \overline{\mathbf{J}_k}, \quad (\text{A.20})$$

$$\overline{\mathbf{J}_k} = -\bar{\rho} D_k \nabla \tilde{Y}_k, \quad (\text{A.21})$$

où les propriétés de transport du fluide sont évaluées à partir des grandeurs résolues (moyennes ou filtrées). On néglige donc l'effet des fluctuations temporelles, ou de sous-maille sur les coefficients de transport.

1. Le formalisme RANS repose à la base sur une moyenne statistique qui, en pratique, peut être remplacée au moyen d'une hypothèse d'ergodicité par une moyenne temporelle.

2. En pratique dans CHARME, un filtrage implicite est imposé par le maillage et par le schéma numérique.

La diffusion des espèces par la turbulence intervient au travers du flux de diffusion turbulent ( $\mathbf{J}_k^t = \overline{\rho \mathbf{v}'' Y_k''}$ ) qui est modélisé de façon analogue à la diffusion moléculaire, en introduisant un nombre de Schmidt turbulent  $Sc^t$  :

$$\mathbf{J}_k^t \approx -\frac{\mu_t}{Sc^t} \nabla \widetilde{Y}_k. \quad (\text{A.22})$$

On procède de même, pour la diffusion de la chaleur par la turbulence, que l'on retrouve sous forme d'un flux de diffusion turbulente ( $\mathbf{J}_{e_t}^t = \overline{\rho \mathbf{v}'' e_t''} + (\boldsymbol{\tau}'' - p'' \mathbf{I}) \mathbf{v}''$ ), qui est modélisé en introduisant un nombre de Prandtl turbulent  $Pr^t$  :

$$\mathbf{J}_{e_t}^t \approx -\frac{\mu_t c_p}{Pr^t} \nabla \widetilde{T} + \sum_{k=1}^{n_e} h_{f_k}^0 \mathbf{J}_k^t + \boldsymbol{\tau}^t \widetilde{\mathbf{v}}. \quad (\text{A.23})$$

Enfin, signalons que l'une des difficultés de la modélisation des écoulements turbulents réside dans la fermeture du terme source chimique filtré ou moyen  $\overline{\widetilde{\omega}_k}$ , qui contribue au terme  $\overline{S_k}$ . De nombreux modèles de combustion turbulente sont disponibles dans CHARME et sont décrits dans [72]. La fermeture de ce terme, dans le cas du modèle de chimie tabulée développé dans cette étude, constitue l'objet du chapitre 6.

## A.2 Solveur SPARTE : modélisation lagrangienne de la phase dispersée

### A.2.1 Modélisation de la phase dispersée

L'injection du kérosène sous forme liquide dans les foyers aéronautiques donne naissance à des écoulements diphasiques dont la phase liquide présente différentes structures au cours de son évolution. On peut établir une classification de l'écoulement selon cette structure. Dans un premier temps, une nappe ou un dard liquide se forme en sortie de l'injecteur. A cet instant, l'interface entre les phases gazeuse et liquide est clairement identifiable, et continue dans l'espace. Puis, sous l'effet du cisaillement par le gaz, le liquide subit les effets d'atomisation primaire puis secondaire, qui vont donner naissance aux gouttes de carburant. On observe ainsi une zone, dite mixte, où coexistent la nappe liquide, dont l'interface est beaucoup plus découpée du fait de la formation de ligaments liquides, des ligaments, qui ont été arrachés à la nappe, des gouttes nées de l'atomisation des ligaments. Enfin, en aval de la zone à phase séparée et de la zone mixte, on trouve une zone dans laquelle sont dispersées des gouttes de différentes tailles, qui continuent éventuellement à subir des phénomènes d'atomisation secondaire. Il n'est plus possible, dans cette zone, de distinguer à l'échelle macroscopique l'interface entre la phase liquide et la phase gazeuse. On parle alors de zone à phase dispersée. Les tailles de mailles utilisées dans les applications industrielles ne permettent pas, dans la zone à phase dispersée, de discrétiser les gouttes ni de décrire leur interface avec le gaz, ce qui est pourtant nécessaire pour appliquer une description de type Navier-Stokes à la phase liquide. Il est donc nécessaire d'avoir recours à une modélisation statistique de la phase liquide dispersée. Principalement, deux formalismes ont été développés pour cela. L'un est lagrangien, et consiste à suivre des gouttes numériques, qui représentent statistiquement plusieurs gouttes physiques, car le suivi de l'ensemble des gouttes réelles est à l'heure actuelle trop coûteux pour nos applications. Le solveur SPARTE de la chaîne CEDRE a été développé suivant ce formalisme. L'autre approche pour traiter la phase dispersée est de forme eulérienne, et consiste à assimiler la phase dispersée à un milieu continu, en réalisant une moyenne statistique sur les caractéristiques des gouttes (composition, diamètre, vitesse, température) dans un volume de contrôle (généralement la maille). On résout alors des équations de transport pour ces caractéristiques moyennes. Cette approche est disponible dans le code CEDRE via le solveur SPIREE. Pour les travaux réalisés durant cette thèse, c'est le solveur lagrangien SPARTE qui a été utilisé pour traiter la phase dispersée. Ce choix est essentiellement dû au fait que c'est le solveur qu'a utilisé Dorey [23] pour calculer une configuration semi-industrielle durant sa thèse, et que c'est cette même configuration qui a été reprise comme cas d'application en seconde partie de ce mémoire. C'est pourquoi le solveur SPARTE est présenté plus en détail dans ce qui suit. Signalons cependant que les développements du modèle de chimie tabulée de CHARME réalisés pendant cette thèse sont tout à fait compatibles avec l'utilisation du solveur SPIREE pour le traitement de la phase dispersée.

## A.2.2 Solvateur lagrangien et modèles physiques pour les gouttes

Le principe de fonctionnement du solveur lagrangien SPARTE est de suivre un grand nombre de particules numériques, représentant chacune un groupe de particules physiques dont les caractéristiques sont très proches (position, température, vitesse, etc...). Le nombre de particules physiques représentées par une particule numérique à un instant  $t$  est appelé poids numérique. La phase gazeuse portant les gouttes est traitée par le solveur CHARME. Le couplage entre les solveurs SPARTE et CHARME s'effectue au travers de termes sources décrivant les échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre les gouttes et le gaz environnant. Par exemple, la masse de vapeur provenant de l'évaporation des gouttes est calculée par SPARTE et transmise sous forme d'un terme source de masse au solveur CHARME. Ces termes d'échanges sont évalués au terme d'un cycle de couplage dont la durée est spécifiée par l'utilisateur. La durée de ce cycle peut être supérieure ou égale au pas de temps utilisé dans chacun des solveurs. Néanmoins, durant le cycle, le champ gazeux est figé du point de vue de SPARTE tandis que le champ de gouttes est figé du point de vue de CHARME (les termes source d'échange calculés à l'issue du cycle précédent sont figés pendant toute la durée du cycle); on dit que le couplage est explicite. L'intervalle de temps définissant un cycle doit donc être choisi en tenant compte des temps caractéristiques physiques de chacune des deux phases.

### Equations résolues

Chaque particule numérique est caractérisée au cours du temps par les paramètres suivants : sa position  $\mathbf{x}_i(t)$ , sa vitesse  $\mathbf{v}_i(t)$ , son rayon  $r_i(t)$ , sa température  $T_i(t)$ , et la quantité  $\dot{n}_i(t)$ , qui représente son poids numérique divisé par le temps mis par la goutte pour traverser la cellule qu'elle occupe à l'instant  $t$ . L'évolution de ces particules numériques est modélisée dans SPARTE à l'aide du système d'équations suivant :

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} &= \mathbf{v}_i, \\ \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= \frac{\mathbf{u}_g(\mathbf{x}_i) - \mathbf{v}_i}{\tau_p} + g, \\ \frac{dr_i^2}{dt} &= -K^{ev}, \\ \frac{dT_i}{dt} &= \frac{T_s - T_i}{\tau_c}, \end{aligned} \tag{A.24}$$

où :

- $\tau_p$  est le temps de relaxation dynamique de la particule, lui-même fonction du coefficient de traînée que le gaz exerce sur la particule ;
- $K^{ev}$  est la vitesse de régression de la goutte due à l'évaporation, dont le calcul est essentiellement basé sur la loi du  $d^2$ , corrigée par des lois empiriques ;
- $T_s$  est la température de surface de la goutte, calculée d'après différents modèles de conduction dans la goutte ;
- $\tau_c$  est le temps caractéristique de chauffage de la goutte, dont la valeur dépend également du modèle de conduction dans la goutte utilisé.

Ce système ne prend pas en compte les éventuelles collisions entre particules, ni la dispersion turbulente. La modélisation de la dispersion turbulente est néanmoins possible dans SPARTE. Elle se traduit notamment par l'ajout d'une équation de transport pour la vitesse fluctuante du gaz, qui n'est pas présentée ici afin de ne pas surcharger l'exposé. Les différents modèles de chauffage, évaporation, etc... qui interviennent dans l'estimation des grandeurs  $\tau_p$ ,  $\tau_c$ ,  $T_s$  et  $K^{evap}$  sont détaillés dans [66, 72].

Pour stabiliser la résolution du système d'équations couplées de CHARME et de SPARTE lorsque la phase dispersée est dense, une relaxation des termes d'échanges a été introduite dans SPARTE. Celle-ci vise à lisser l'évolution des termes source d'échanges imposés au solveur CHARME pour prévenir l'apparition de fortes oscillations. Le terme source d'échange d'une grandeur quelconque imposé au cycle  $n$  est donc formulé de la manière suivante :

$$\dot{\omega}_{CHARME}^n = \xi \dot{\omega}_{SPARTE}^{n-1} + (1 - \xi) \dot{\omega}_{CHARME}^{n-1} \tag{A.25}$$

où  $\dot{\omega}_{\text{CHARME}}^n$  est le terme source d'échange imposé à CHARME au cycle de couplage  $n$  et  $\dot{\omega}_{\text{SPARTE}}^n$  est le terme d'échange calculé par SPARTE à l'issue du cycle  $n$ . Pour que le couplage respecte les temps caractéristiques du problème étudié, le coefficient de relaxation  $\xi$  doit respecter la condition :

$$\xi \gg \frac{t_{\text{cycle}}}{t_{\text{carac}}} \quad (\text{A.26})$$

où  $t_{\text{cycle}}$  est la durée du cycle de couplage des deux solveurs et  $t_{\text{carac}}$  est la plus petite échelle de temps caractéristique des phénomènes physiques mis en jeu dans l'écoulement.

## Modèles physiques

La force de traînée, exercée par le gaz sur une goutte, s'écrit :

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2} \pi \rho_g r_i^2 C_d \|\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_i\| (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_i), \quad (\text{A.27})$$

où  $\rho_g$  est la masse volumique du gaz,  $\mathbf{v}_g$  est sa vitesse,  $r_i$  est le rayon de la particule,  $\mathbf{v}_i$  est sa vitesse, et  $C_d$  est le coefficient de traînée. Différentes lois sont disponibles dans SPARTE pour ce coefficient, dont celle de Schiller et Naumann :

$$C_d = \begin{cases} 24 Re_i^{-1} (1 + 0,15 Re_i^{0,687}) & \text{si } Re_i \leq 1000, \\ 0,445 & \text{si } Re_i > 1000, \end{cases} \quad (\text{A.28})$$

où  $Re_i$  est le nombre de Reynolds particulaire défini par :

$$\frac{2 \rho_g r_i \|\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_i\|}{\mu_g}, \quad (\text{A.29})$$

où  $\mu_g$  est la viscosité du gaz entourant la goutte  $i$ .

Pour calculer les transferts thermiques entre une goutte et le gaz environnant, on résout le bilan énergétique suivant :

$$m_i C_{p_i} \frac{dT_i}{dt} = 2 \pi N u_i \lambda_g (T_g - T_i) + \frac{dm_i}{dt} L_v, \quad (\text{A.30})$$

où  $m_i$  est la masse de la goutte  $i$ ,  $T_i$  sa température moyenne,  $C_{p_i}$  et  $L_v$  sont respectivement la capacité calorifique massique à pression constante et la chaleur latente de vaporisation du liquide constituant cette goutte,  $\lambda_g$  est la conductivité du gaz, et  $N u_i$  est le nombre de Nusselt caractérisant les transferts thermiques convectifs entre le gaz et cette goutte. Celui-ci s'écrit :

$$N u_i = (2 + N u^*) \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T}, \quad (\text{A.31})$$

où  $N u^*$  désigne un nombre sans dimension explicité dans la suite, et  $B_T$  le nombre de Spalding thermique. Celui s'exprime comme :

$$B_T = (1 + B_M)^\Phi - 1, \quad \Phi = \frac{C_{p_v}}{c_{p_g}} \frac{Sh^*}{N u^*} Le_g, \quad (\text{A.32})$$

où  $C_{p_v}$  est la capacité calorifique massique à pression constante de la vapeur,  $c_{p_g}$  est celle du gaz environnant,  $Le_g = \frac{\lambda_g}{\rho_g c_{p_g} D_g}$  est le nombre de Lewis du gaz, et  $B_M$  est le nombre de Spalding massique donné par :

$$B_M = \frac{Y_{v_s} - Y_{v_g}}{1 - Y_{v_s}}, \quad (\text{A.33})$$

où  $Y_{v_s}$  est la fraction massique de vapeur à la surface de la goutte, et  $Y_{v_g}$  celle dans le gaz porteur. Les nombres  $N u^*$  et  $Sh^*$  s'écrivent :

$$N u^* = 2 + f(Re_i, Pr_g), \quad Sh^* = 2 + f(Re_i, Sc_g), \quad (\text{A.34})$$

où  $Pr_g = \frac{\mu_g c_{p_g}}{\lambda_g}$  et  $Sc_g = \frac{\nu_g}{D_g}$  désignent respectivement les nombres de Prandtl et de Schmidt dans le gaz. Plusieurs corrélations sont disponibles pour  $f(Re_i, Pr_g)$ , et  $f(Re_i, Sc_g)$  dont celles de Ranz-Marshall :

$$f(Re_i, Pr_g) = 0,57 Re_i^{\frac{1}{2}} Pr_g^{\frac{1}{3}}, \quad (\text{A.35})$$

$$Sh^* = 0,57 Re_i^{\frac{1}{2}} Sc_g^{\frac{1}{3}} \quad (\text{A.36})$$

Pour le calcul de la température de surface de la goutte  $T_s$ , qui intervient dans le bilan énergétique, SPARTE propose le choix entre deux modèles de conduction dans la goutte. Le modèle de conduction infinie suppose que la température est uniforme dans la goutte, soit  $T_s = T_i$ , alors que le modèle de conduction effective suppose un profil de température parabolique dans la goutte, dans la direction radiale.

L'évaporation d'une gouttelette est caractérisée par la vitesse de régression de la goutte donnée par :

$$K^{ev} = \frac{\mu_g}{\rho_i} \frac{Sh}{Sc_j} \ln(1 + B_M). \quad (\text{A.37})$$

où  $Sc_j$  est le nombre de Schmidt de l'espèce évaporée, et  $Sh$  est le nombre de Sherwood qui est évalué de la façon suivante :

$$Sh = (2 + Sh^*) \frac{\ln(1 + B_M)}{B_M}. \quad (\text{A.38})$$

## Conditions aux limites

Plusieurs types de conditions aux limites sont disponibles dans SPARTE. Les conditions aux limites utilisées dans ce travail sont présentées ci-dessous.

**punctuel** : ce type de condition aux limites nécessite d'imposer un débit, une vitesse, une température d'injection, un diamètre de goutte et un temps caractéristique d'injection. Ce dernier contrôle l'intervalle de temps séparant l'injection de chaque goutte. Le poids numérique de chaque goutte injectée est donc fonction du débit, de la masse de la goutte numérique et du temps caractéristique d'injection.

**Surface débitante** : ce type de condition aux limites nécessite d'imposer un nombre de classes de gouttes, puis pour chaque classe, un débit, une vitesse, une température d'injection, un diamètre de goutte (diamètre moyen si on choisit une loi log normale) et un temps caractéristique d'injection. Plusieurs gouttes sont émises simultanément au niveau de la surface limite. Le nombre de ces gouttes est fixé par l'utilisateur. La position des points d'injection des gouttes sur la surface est déterminée de manière aléatoire, de façon à produire une injection homogène en moyenne. Le poids numérique de chaque goutte injectée est donc fonction du débit, de la masse de la goutte numérique, du temps caractéristique d'injection et du nombre de gouttes injectées.

**Paroi avec interaction complexe** : cette condition aux limites permet de modéliser l'interaction des gouttes avec une paroi selon différents régimes. Le régime s'appliquant à chaque goutte est déterminé par les caractéristiques de la paroi, qui sont imposées par l'utilisateur et par le nombre de Mundo-Sommerfeld-Tropea,  $K$ , qui est une fonction des nombres de Weber, et d'Onhesorge :

$$K = We Oh^{-0.4} \quad , \quad We = \frac{2\rho r_i \|\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_g\|}{\sigma_p} \quad , \quad Oh = \mu_i (2\rho_i \sigma_i r_i)^{-0.5}, \quad (\text{A.39})$$

où  $\rho$  est la masse volumique du gaz environnant,  $\mathbf{v}_g$  sa vitesse,  $r_i$  est le diamètre de la goutte,  $\mu_i$  la viscosité du liquide qui la compose et  $\sigma_i$  est la tension superficielle. Si la valeur de  $K$  est supérieure au seuil  $K_d$ , la goutte se situe dans un régime d'éclaboussement dans lequel une partie de la masse est déposée sur la paroi. La proportion de masse déposée est alors fonction de la valeur de  $K$ . La valeur du seuil  $K_d$  dépend de l'état de la paroi avec laquelle la goutte interagit. Sous ce seuil, le régime d'interaction est également différent selon l'état de la paroi : pour une paroi chaude, la goutte rebondit si  $K < K_d$ , avec  $K_d = 450$ . Pour les autres états de paroi, la goutte est entièrement déposée si  $K < K_d$ . Le seuil  $K_d$  vaut, dans ce cas, 3000 pour une paroi froide, sèche et lisse, 12 000 pour une paroi recouverte d'un film épais, et 650 pour une paroi froide sèche et rugueuse.

**Paroi avec rebond** : ce modèle permet de déterminer l'angle de rebond d'une goutte impactant une paroi, ainsi que la vitesse de cette goutte après rebond. L'angle de rebond  $\Theta$  est déterminé de façon aléatoire entre les deux bornes  $\Theta_{\min}$  et  $\Theta_{\max}$  que doit renseigner l'utilisateur. Celui-ci doit aussi choisir un coefficient de restitution énergétique  $\xi$  qui détermine la vitesse de rebond  $\mathbf{v}'_i$  de la goutte  $i$  en fonction de sa vitesse  $\mathbf{v}_i$  avant l'impact :

$$\|\mathbf{v}'_i\| = \xi^{0,5} \|\mathbf{v}_i\| \quad (\text{A.40})$$

## A.3 Solveur ASTRE : calcul des transferts radiatifs

### A.3.1 Modélisation des transferts radiatifs

Pour prendre en compte l'impact du rayonnement sur l'écoulement dans CEDRE, on utilise un solveur dédié au calcul du champ de puissance radiative. De ce champ est déduit le terme source lié aux pertes (ou gains) thermiques par rayonnement, qui intervient dans l'équation de transport de l'énergie d'autres solveurs, notamment dans CHARME pour la phase gazeuse. Le rayonnement est traité dans un solveur dédié car les méthodes numériques adaptées à la résolution de ce problème sont très différentes des méthodes numériques de résolution des équations de Navier-Stokes. En effet le rayonnement, dont la vitesse caractéristique est celle de la lumière, est un phénomène instantané (relativement au temps caractéristiques des autres phénomènes physiques) et non local (l'échange d'information ne se fait pas qu'entre cellules voisines, mais entre toutes les cellules du maillage).

Pour déterminer les relations intervenant dans la modélisation des transferts thermiques au sein des foyers aéronautiques, on se place dans un milieu semi-transparent, entouré de parois opaques, représentatif des chambres de combustion généralement étudiées à l'Onera. On fait l'hypothèse que le milieu est à l'équilibre thermodynamique local, et les effets de polarisation électromagnétique sont négligés. On fait également l'hypothèse que la partie imaginaire de l'indice optique du milieu est négligeable devant la partie réelle, ce qui donne un indice optique égal à l'indice de réfraction. Ce dernier est considéré constant et pris égal à 1, ce qui est vrai à  $10^{-4}$  près dans les gaz [97]. Avec ces hypothèses, la luminance monochromatique du milieu est isotrope et égale à celle du vide :

$$L_\nu^0(T) = \frac{2hc_0^2\nu^3}{\exp\left(\frac{hc_0\nu}{kT}\right) - 1}, \quad (\text{A.41})$$

$\nu$  étant la longueur d'onde considérée,  $h$  la constante de Planck,  $k$  la constante de Boltzmann et  $C_0$  la célérité de la lumière dans le vide. Selon ces hypothèses, la puissance radiative volumique en tout point  $M$  du milieu s'exprime ainsi [98] :

$$P^R(M) = \int_0^\infty \kappa_\nu(M) \int_{4\pi} L_\nu(M, \mathbf{u}) d\Omega d\nu - 4\pi \int_0^\infty \eta_\nu(M) d\nu, \quad (\text{A.42})$$

où  $\kappa_\nu(M)$  est le coefficient monochromatique d'absorption au point  $M$  déterminé par un modèle de propriétés radiatives,  $L_\nu(M, \mathbf{u})$  la luminance directionnelle monochromatique dans la direction  $\mathbf{u}$  et  $\eta_\nu(M)$  le coefficient monochromatique d'émission au point  $M$  qui s'exprime, dans le cas d'un mélange purement gazeux, sous la forme :

$$\eta_\nu(M) = \kappa_\nu(M) L_\nu^0(T(M)). \quad (\text{A.43})$$

Pour déterminer le champ de puissance radiative, on peut déterminer explicitement le champ de luminance directionnelle monochromatique  $L_\nu(M, \mathbf{u})$ , c'est à dire résoudre l'équation de transfert radiatif (ETR), comme cela est fait dans le solveur REA de la chaîne CEDRE. Une autre approche consiste à déterminer de manière statistique le champ de puissance radiative, au moyen d'une méthode de Monte-Carlo. C'est l'approche utilisée dans le solveur ASTRE.

### A.3.2 Calcul des transferts radiatifs par une méthode de Monte-Carlo

Les transferts radiatifs peuvent être vus comme un échange où l'énergie est émise en certains points du milieu et dans différentes directions sous forme de photons, qui voyagent ensuite le long de chemins optiques qui leur sont propres et sont éventuellement absorbés en d'autres points du milieu. Les chemins optiques de chaque photon sont dépendants des propriétés des milieux traversés, ces derniers pouvant modifier la direction de propagation des photons (diffusion, diffraction, rebond sur des parois, etc...), ou mettre fin à leur propagation (absorption). La puissance radiative dans une cellule peut donc être exprimée comme l'énergie contenue dans la somme des photons absorbés par unité de temps dans cette cellule moins l'énergie contenue dans la somme des photons émis depuis cette cellule par unité de temps. Les photons traversant une cellule n'entrent pas dans le bilan de sa puissance radiative.

Le principe des méthodes de Monte-Carlo appliquées aux transferts radiatifs est de générer de manière stochastique un grand nombre de trajets optiques, de façon à reconstruire à partir de ces trajets le champ moyen (statistiquement) de puissance radiative. Ces trajets optiques, construits de manière aléatoire vont tout de même suivre des directions préférentielles, dépendantes des propriétés du milieu aux points traversés. Ils permettent d'évaluer des champs probables de puissance radiative (une fois effectuées les sommations sur les entrées-sorties des paquets d'énergie dans chaque cellule). Ainsi, plus le nombre de trajets optiques générés est grand, plus l'erreur statistique dans l'évaluation de la puissance radiative est faible. Notons que, pour des raisons évidentes de temps de calcul, ce ne sont pas les trajectoires de chaque photon qui sont générées, mais celles de paquets de photons (ou paquets d'énergie) ayant des propriétés communes (point et direction d'émission). L'énergie d'un paquet de photons décroît le long de la trajectoire au fur et à mesure de l'absorption des photons le long du chemin optique.

Le calcul de la puissance radiative à partir des trajectoires des paquets de photons peut être réalisé de différentes manières. Dans l'approche *Forward Method* (FM), la puissance radiative dans la cellule  $q$  est estimée comme

$$\tilde{P}_q^{FM} = \sum_{i=1}^{N_V+N_S} \tilde{P}_{iq}^{ea} - P_q^e, \quad (\text{A.44})$$

où  $P_q^e$ , la puissance émise depuis une cellule  $q$  est explicitement déterminée par

$$P_q^e = 4\pi V_q \int_0^\infty \eta_{qv} d\nu, \quad (\text{A.45})$$

où  $V_q$  est le volume de la cellule  $q$  et  $\eta_{qv}$  le coefficient monochromatique du mélange dans cette cellule.  $\tilde{P}_{iq}^{ea}$  est la moyenne statistique de la puissance émise par la cellule  $i$  et absorbée par la cellule  $q$ . Elle s'écrit

$$\tilde{P}_{iq}^{ea} = \frac{P_i^e}{N_i} \sum_{n=1}^{N_{iq}} \sum_{c=1}^{N_{pn}} \delta_{icqn}, \quad (\text{A.46})$$

où  $N_i$  est le nombre de tirs émis depuis la cellule  $q$ , chaque tir contenant initialement une énergie  $\frac{P_i^e}{N_i}$ ,  $P_i^e$  étant la puissance émise depuis la cellule  $i$ .  $N_{iq}$  est le nombre de tirs émis depuis la cellule  $i$  passant par la cellule  $q$   $N_{pn}$  fois et cédant à chaque passage  $c$  une proportion  $\delta_{icqn}$  d'énergie. Cette proportion dépend des propriétés physiques du milieu car elle est fonction de la transmittivité entre le point de sortie de la cellule  $i$  du  $n^{\text{ième}}$  tir et le point d'entrée dans la cellule  $q$  au  $c^{\text{ième}}$  passage de ce tir, ainsi que de l'absorptivité dans la cellule  $q$  [98].

Autrement dit, dans l'approche FM, la génération aléatoire de chemins optiques permet d'estimer la moyenne statistique de l'énergie absorbée dans une cellule au passage des paquets de photons émis depuis l'ensemble du domaine. En lui soustrayant la puissance émise dans la cellule, on obtient la puissance radiative dans cette dernière.

Dans l'approche *Emission Reciprocity Method* (ERM), la génération aléatoire de chemins optiques permet d'estimer la moyenne statistique de l'énergie échangée entre une cellule  $q$  et l'ensemble des cellules  $i$  traversées par les paquets d'énergie émis depuis celle-ci, ce qui donne directement la puissance

radiative dans cette cellule :

$$\tilde{P}_q^{ERM} = \sum_{i=1}^{N_V+N_S} \tilde{P}_{qi}^{exch} \quad (\text{A.47})$$

avec la puissance  $\tilde{P}_{qi}^{exch}$  échangée entre les cellules  $q$  et  $i$  que l'on écrit

$$\tilde{P}_{qi}^{exch} = \frac{P_i^e}{N_i} \sum_{n=1}^{N_{iq}} \left( \frac{L_{\nu_n}^0(T_q)}{L_{\nu_n}^0(T_i)} - 1 \right) \sum_{c=1}^{N_{pn}} \delta_{icqn}, \quad (\text{A.48})$$

où  $L_{\nu_n}^0(T_q)$  est la luminance monochromatique du rayonnement de longueur d'onde  $\nu_n$  dans la cellule  $q$  à la température  $T_q$  [98] et  $\delta_{icqn}$  est la proportion d'énergie absorbée que l'on a définie ci-dessus.

L'approche *Absorption Reciprocity Method*(ARM) est une autre formulation réciproque basée sur l'échange d'énergie entre une cellule  $q$  et l'ensemble des cellules  $i$  ayant émis un paquet d'énergie qui traverse  $q$ .

$$\tilde{P}_q^{ARM} = - \sum_{i=1}^{N_V+N_S} \tilde{P}_{iq}^{exch} \quad (\text{A.49})$$

La figure A.1 extraite de [97] schématise les trois méthodes de calcul de la puissance radiative que l'on vient d'évoquer.

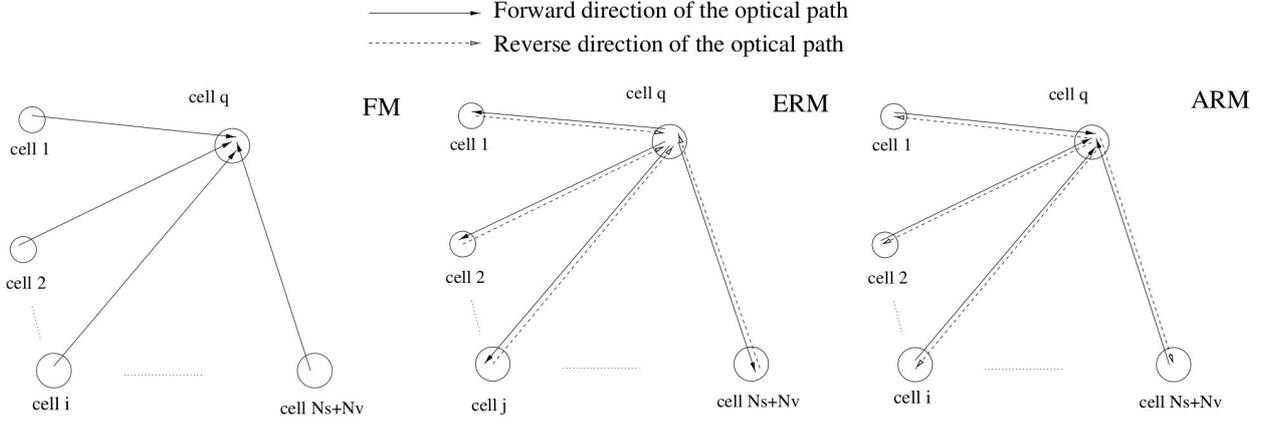


FIGURE A.1 – Schématisation de trois méthodes de calcul des puissances radiatives dans une cellule  $q$  à partir d'un ensemble aléatoire de chemins optiques. Extrait de [97].

La méthode FM présente l'avantage de respecter le principe de conservation de l'énergie, qui n'est vérifié que de manière statistique avec les approches ERM et ARM. En revanche, seules ces deux méthodes imposent un transfert radiatif rigoureusement nul entre deux cellules de même température.



Pour les besoins de cette thèse, il a été nécessaire d'écrire un nouvel outil de génération de tables pour plusieurs raisons :

- l'outil développé J. Savre n'était plus maintenu,
- des difficultés avaient été rencontrées concernant cet outil lors de la simulation de flammes laminaires prémélangées sur un domaine de richesse étendu,
- l'outil ne permettait la génération de tables qu'à partir de flammes de prémélange, limite que l'on souhaitait lever au cours de cette thèse.

Pour cela, il a été décidé d'utiliser le code libre Cantera, et de le doter d'une surcouche de routines permettant, d'une part d'assurer le calcul de flammes 1D avec Cantera sur une plage de richesse la plus étendue possible, et de façon automatisée, d'autre part d'assurer l'écriture de la table dans le format FTC du code CEDRE.

Dans ce qui suit, on présente d'abord les routines dédiées à la génération de table à partir de flammes prémélangées, qui sont les plus abouties en terme d'automatisation. On présente ensuite les routines développées pour la génération de tables à partir de flammes de diffusion.

## B.1 Table FTC basée sur des flammes de prémélange

Le code Cantera qui reprend notamment les méthodes du code PREMIX de la suite Chemkin est un outil relativement bien adapté à la résolution de flammes prémélangées non-étirées, pour des richesses assez proches de la stœchiométrie. Néanmoins, il a été constaté au cours de ce travail qu'établir une solution pour des richesses plus éloignées de la stœchiométrie était très difficile, que ce soit en partant d'une initialisation de type discontinuité de contact sur maillage grossier, ou que ce soit par continuation, c'est à dire en partant d'une solution obtenue à la stœchiométrie. Dans le cas de calculs par continuation, il a été constaté qu'en diminuant ou en augmentant la richesse, on obtient rapidement une flamme occupant tout le domaine de calcul, ce qui correspond aussi au moment où le calcul Cantera ne converge plus. L'augmentation de l'épaisseur de flamme lorsqu'on s'éloigne de la stœchiométrie est certes attendue, mais quand cette épaisseur devient de l'ordre de grandeur du maillage (dont la largeur initiale est liée à l'épaisseur de flamme à la stœchiométrie), on aboutit à de trop forts gradients au niveau des limites. Or, les conditions aux limites pour la flamme prémélangée sont précisément un gradient nul puisqu'aux limites, on se trouve soit dans les gaz frais soit dans les gaz brûlés (le problème est résolu dans le repère associé à la flamme). Un problème similaire a été rencontré par Giovangigli [35] qui montre que les limites d'extinction de la flamme prémélangée obtenues avec son algorithme adaptatif dépendent de la taille du domaine de calcul. Plus le domaine est grand, plus les limites sont éloignées de la stœchiométrie. Giovangigli explique d'ailleurs qu'il semble ne pas y avoir de limite théorique dans le cas d'une flamme adiabatique. Si le domaine est suffisamment large, la non-convergence du problème (qui correspond à une limite d'extinction numérique) serait seulement due à un mauvais conditionnement de la matrice du fait des faibles valeurs de la vitesse de l'écoulement. Par conséquent, pour obtenir des solutions de flammes de prémélange par méthode de

continuation, sur un intervalle de richesse étendu, il semble nécessaire de résoudre le problème sur un domaine de calcul de taille suffisamment grande pour ne pas entraîner l’extinction de la flamme avant d’avoir atteint les limites de cet intervalle de richesse.

Néanmoins, des difficultés ont été rencontrées pour obtenir la solution initiale sur un domaine dont la taille est trop grande devant celle de la flamme, y compris à la stœchiométrie. Un algorithme d’adaptation de la taille du domaine a donc été introduit dans la surcouche ajoutée à Cantera. Celui-ci permet de calculer la solution initiale à la stœchiométrie, sur un maillage dont la taille n’est pas trop grande devant l’épaisseur de flamme obtenue à cette richesse, puis d’élargir le domaine au cours du calcul de façon à conserver des gradients proches de zéro aux limites.

Il a également été constaté à l’utilisation que le maillage obtenu à une richesse donnée par les méthodes de raffinement automatique de Cantera pouvaient conduire à la non-convergence du problème au point de richesse suivant lors du calcul par continuation. Une méthode de remaillage a donc été introduite dans la surcouche ajoutée à Cantera permettant de générer un maillage en distribuant les points de façon à obtenir, pour les différentes grandeurs résolues, une courbure et une pente ayant des valeurs proches sur l’ensemble des points du maillage. L’utilisation de cette méthode de remaillage a ainsi facilité la génération des tables par continuation pour les cas testés pendant cette thèse.

L’algorithme du sous-programme dédié au calcul de flammes prémélangées comportant les aménagements décrits ci-dessus est présenté sur la figure B.1.

## B.2 Table FTC basée sur des flammes de diffusion

Les travaux réalisés au chapitre 2 ont nécessité la modification de l’outil de génération de tables FTC afin que ce dernier permette de créer des tables basées sur des flammes de diffusion. Celui-ci reste basé sur le code Cantera. Les solutions de flamme de diffusion 1D étirée stationnaire sont obtenues pour différentes valeur d’étirement de la flamme, imposées en faisant varier le taux de contrainte  $a$  aux limites ( $a = \frac{|U_F|+|U_O|}{L}$ , où  $U_F$  et  $U_O$  sont respectivement les vitesses d’injection côté carburant, et côté oxydant, et  $L$  la largeur séparent les deux injections). Le rapport entre  $|U_F|$  et  $|U_O|$  est fixé de manière à égaliser le débit carburant et le débit oxydant.

Compte tenu des contraintes de temps liées à la thèse, le sous-programme dédié à la création de ces tables n’a pas bénéficié d’un niveau d’automatisation équivalent à celui utilisé pour générer les tables de type prémélange. Par conséquent, la procédure utilisée pour générer les tables de type diffusion est la suivante :

- Obtention d’une solution initiale à des valeurs de  $a$  et  $L$  fixées. Le choix de ce couple de valeurs peut nécessiter plusieurs essais avant d’obtenir une solution initiale permettant la convergence du problème.
- Une fois la solution obtenue, une routine permet d’incrémenter automatiquement la valeur de  $a$  et de calculer la solution de la flamme de diffusion pour chaque valeur de cette variable, jusqu’à atteindre l’extinction de la flamme (se caractérisant par l’arrêt de la convergence du problème). La valeur de  $L$  est inchangée durant cette phase.
- La même routine permet de repartir de la solution obtenue avec les valeurs initiales de  $a$  et  $L$ , pour calculer les solutions à des valeurs de  $a$  inférieures. Durant cette phase, un ajustement de la taille du domaine  $L$  est effectué quand la largeur de la flamme augmente de façon à créer un gradient significatif de température ou de concentration à l’une des limites du domaine. En effet, si la valeur des gradients est trop élevée aux limites, les hypothèses utilisées pour établir les équations de la flamme de diffusion 1D ne sont plus respectées. Sans adaptation de la taille du domaine de calcul, la solution est altérée. On observe par exemple une modification de la température maximale obtenue dans la flamme pour une valeur de  $a$  donnée.

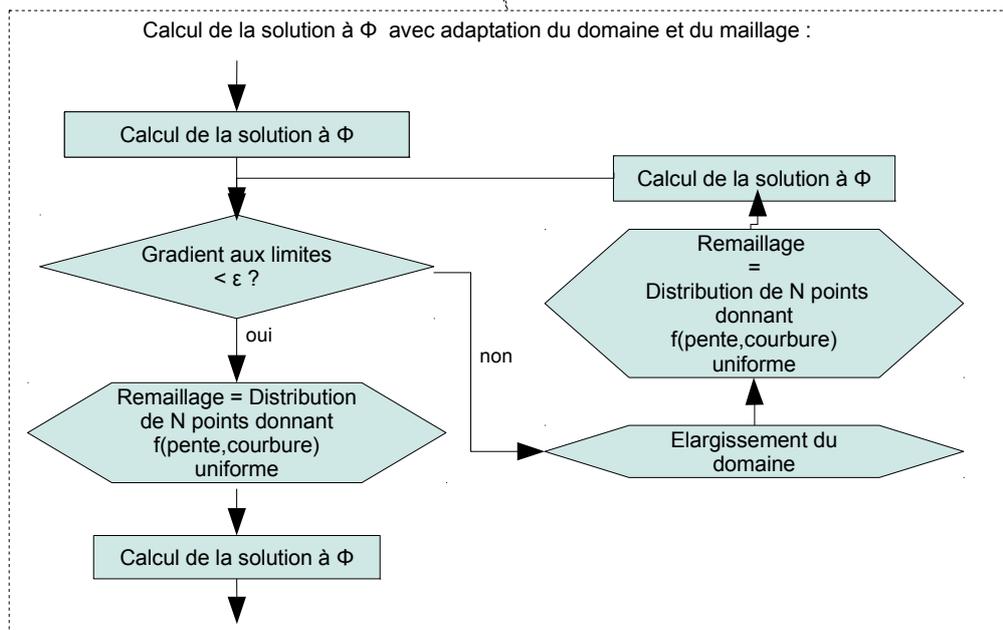
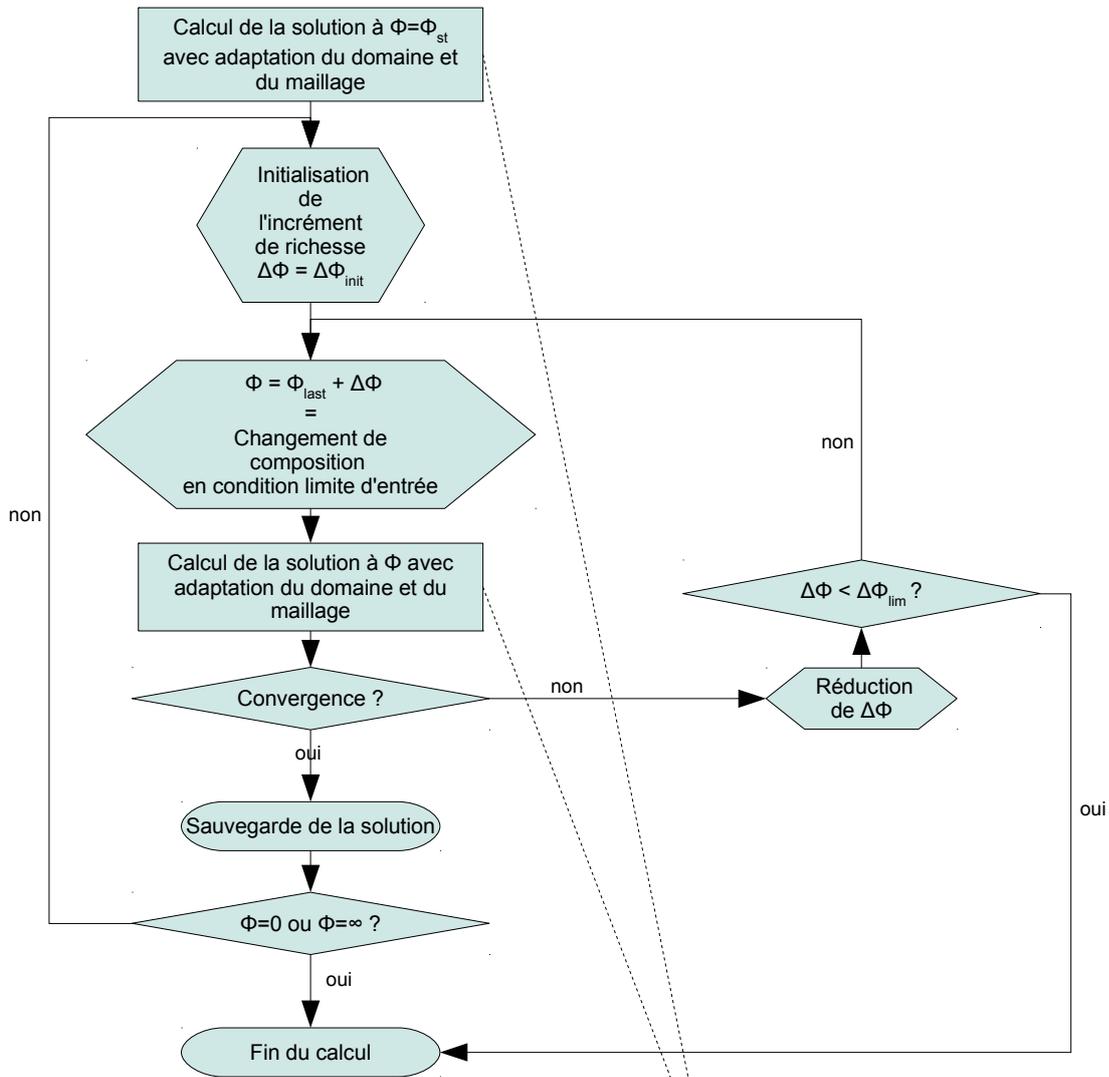


FIGURE B.1 – Algorithme de la routine venant en surcouverte de Cantera pour le calcul de solutions de flammes prémélangées sur une plage de richesse la plus large possible.



## ANNEXE C

### Modification des propriétés thermodynamiques du mélange induite par le couplage indirect du modèle FTC

La formulation des termes source proposée par Colin et al. [18] conduit à reporter la masse de chaque espèce non transportée de la table sur quatre espèces transportées choisies pour conserver les atomes composant les espèces. Afin de simplifier l'écriture des équations dans ce qui suit, on choisit, comme proposé par Colin et al., les espèces  $C_xH_y$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$  et  $N_2$  pour assurer la conservation des atomes respectifs C, O, H et N.

Ainsi, la fraction massique de chaque espèce  $i$  non transportée est remplacée par une fraction massique  $Y_{C_xH_y,i}$  de  $C_xH_y$ , une fraction  $Y_{O_2,i}$  de  $O_2$ , une fraction  $Y_{H_2O,i}$  de  $H_2O$  et une fraction  $Y_{N_2,i}$  de  $N_2$ . Ainsi, la fraction massique des quatre espèces transportées servant à assurer la conservation des atomes est égale à :

$$\begin{aligned}
 Y_{C_xH_y} &= Y_{C_xH_y}^{TAB} + \sum_{i=M+1}^N Y_{C_xH_y,i}, \\
 Y_{O_2} &= Y_{O_2}^{TAB} + \sum_{i=M+1}^N Y_{O_2,i}, \\
 Y_{H_2O} &= Y_{H_2O}^{TAB} + \sum_{i=M+1}^N Y_{H_2O,i}, \\
 Y_{N_2} &= Y_{N_2}^{TAB} + \sum_{i=M+1}^N Y_{N_2,i},
 \end{aligned} \tag{C.1}$$

où  $N$  est le nombre d'espèces de la table,  $M$  le nombre d'espèces transportées et  $Y_k^{TAB}$  est la fraction massique de l'espèce  $k$  dans la table.

Les fractions massiques  $Y_{C_xH_y,i}$ ,  $Y_{O_2,i}$ ,  $Y_{H_2O,i}$  et  $Y_{N_2,i}$  peuvent être exprimées à partir d'un bilan atomique pour chaque espèce  $i$  non transportée :

$$\begin{aligned}
 \text{conservation de l'atome C : } & a_i \frac{Y_i^{TAB}}{\mathcal{M}_i} = x \frac{Y_{C_xH_y,i}}{\mathcal{M}_{C_xH_y}}, \\
 \text{conservation de l'atome H : } & b_i \frac{Y_i^{TAB}}{\mathcal{M}_i} = 2 \frac{Y_{H_2O,i}}{\mathcal{M}_{H_2O}} + y \frac{Y_{C_xH_y,i}}{\mathcal{M}_{C_xH_y}}, \\
 \text{conservation de l'atome O : } & c_i \frac{Y_i^{TAB}}{\mathcal{M}_i} = 2 \frac{Y_{O_2,i}}{\mathcal{M}_{O_2}} + \frac{Y_{H_2O,i}}{\mathcal{M}_{H_2O}}, \\
 \text{conservation de l'atome N : } & d_i \frac{Y_i^{TAB}}{\mathcal{M}_i} = 2 \frac{Y_{N_2,i}}{\mathcal{M}_{N_2}},
 \end{aligned} \tag{C.2}$$

où  $a_i$ ,  $b_i$ ,  $c_i$ ,  $d_i$  sont les nombres d'atomes C, O, H et N dans l'espèce  $i$  de formule  $C_{a_i}H_{b_i}O_{c_i}N_{d_i}$ . Ce

système peut être réécrit ainsi :

$$\begin{aligned}
Y_{C_xH_y,i} &= \frac{a_i}{x} \frac{\mathcal{M}_{C_xH_y}}{\mathcal{M}_i} Y_i^{TAB}, \\
Y_{H_2O,i} &= \left( \frac{b_i}{2} - \frac{y a_i}{2x} \right) \frac{\mathcal{M}_{H_2O}}{\mathcal{M}_i} Y_i^{TAB}, \\
Y_{O_2,i} &= \left( \frac{c_i}{2} - \frac{b_i}{4} + \frac{y a_i}{4x} \right) \frac{\mathcal{M}_{O_2}}{\mathcal{M}_i} Y_i^{TAB}, \\
Y_{N_2,i} &= \frac{d_i}{2} \frac{\mathcal{M}_{N_2}}{\mathcal{M}_i} Y_i^{TAB}.
\end{aligned} \tag{C.3}$$

## C.1 Modification de l'enthalpie de formation du mélange suite à la sélection d'un jeu d'espèces chimiques

Lorsqu'on reporte la masse des espèces non transportées sur des espèces différentes, on opère un changement artificiel des propriétés thermodynamiques du mélange, en particulier, de l'enthalpie de formation et de la capacité calorifique. Par exemple, l'enthalpie de formation  $Y_i^{TAB} h_{f_i}^0$  de l'espèce non transportée  $i$  est remplacée par l'enthalpie  $Y_i^{TAB} h_{f_{CHON,i}}^0$  définie ainsi :

$$Y_i^{TAB} h_{f_{CHON,i}}^0 = Y_{C_xH_y,i} h_{f_{C_xH_y}}^0 + Y_{H_2O,i} h_{f_{H_2O}}^0 + Y_{O_2,i} h_{f_{O_2}}^0 + Y_{N_2,i} h_{f_{N_2}}^0. \tag{C.4}$$

L'enthalpie de formation  $h_{f_{CHON,i}}^0$  peut être réécrite en faisant appel aux équations (C.3) :

$$\begin{aligned}
h_{f_{CHON,i}}^0 &= \frac{a_i}{x} \frac{\mathcal{M}_{C_xH_y}}{\mathcal{M}_i} h_{f_{C_xH_y}}^0 + \left( \frac{b_i}{2} - \frac{y a_i}{2x} \right) \frac{\mathcal{M}_{H_2O}}{\mathcal{M}_i} h_{f_{H_2O}}^0 + \\
&\quad \left( \frac{c_i}{2} - \frac{b_i}{4} + \frac{y a_i}{4x} \right) \frac{\mathcal{M}_{O_2}}{\mathcal{M}_i} h_{f_{O_2}}^0 + \frac{d_i}{2} \frac{\mathcal{M}_{N_2}}{\mathcal{M}_i} h_{f_{N_2}}^0.
\end{aligned} \tag{C.5}$$

On peut dériver une relation similaire pour la capacité calorifique à pression constante. Quelques exemples de valeurs d'enthalpie obtenues à l'aide de cette expression sont données dans le tableau C.1. On voit que les écarts peuvent être très importants, surtout concernant l'enthalpie de formation.

Du fait que l'on ne transporte pas toutes les espèces et que l'on assure seulement la conservation des atomes suivant (C.1), l'enthalpie de formation du mélange est calculée dans le code CFD de la façon suivante :

$$h_f^{CFD} = \sum_{i=1}^M Y_i h_{f_i}^0 = \sum_{i=1}^M Y_i^{TAB} h_{f_i}^0 + \sum_{i=M+1}^N \left( Y_{C_xH_y,i} h_{f_{C_xH_y}}^0 + Y_{O_2,i} h_{f_{O_2}}^0 + Y_{H_2O,i} h_{f_{H_2O}}^0 + Y_{N_2,i} h_{f_{N_2}}^0 \right), \tag{C.6}$$

soit :

$$h_f^{CFD} = h_f^{TAB} + \sum_{i=M+1}^N \left( Y_{C_xH_y,i} h_{f_{C_xH_y}}^0 + Y_{O_2,i} h_{f_{O_2}}^0 + Y_{H_2O,i} h_{f_{H_2O}}^0 + Y_{N_2,i} h_{f_{N_2}}^0 - Y_i^{TAB} h_{f_i}^0 \right), \tag{C.7}$$

où  $M$  est le nombre d'espèces transportées et  $N$  le nombre d'espèces dans la table.

En faisant la différence entre  $h_f^{CFD}$  et  $h_f^{TAB}$ , on constate que l'on a introduit une erreur  $\Delta h_f^0$  valant :

$$\Delta h_f^0 = \sum_{i=M+1}^N \left( Y_{C_xH_y,i} h_{f_{C_xH_y}}^0 + Y_{O_2,i} h_{f_{O_2}}^0 + Y_{H_2O,i} h_{f_{H_2O}}^0 + Y_{N_2,i} h_{f_{N_2}}^0 - Y_i^{TAB} h_{f_i}^0 \right). \tag{C.8}$$

L'enthalpie de formation du mélange obtenue dans le code CFD peut également être exprimée en sommant les enthalpies de formation de l'ensemble des espèces de la table, en prenant soin de considérer

Espèce	Enthalpie de formation à 298 K		Enthalpie sensible à 1000 K	
	de l'espèce	du substitut	de l'espèce	du substitut
H2	$-8,578.10^2$	$-1,200.10^8$	$1,025.10^7$	$7,261.10^6$
CH4	$-4,669.10^6$	$-1,513.10^7$	$2,383.10^6$	$2,551.10^6$
C2H6	$-2,789.10^6$	$-8,100.10^6$	$2,145.10^6$	$2,235.10^6$
CH2O	$-3,861.10^6$	$-2,849.10^4$	$1,161.10^6$	$1,254.10^6$
C2H2	$8,709.10^6$	$9,223.10^6$	$1,584.10^6$	$1,457.10^6$
C2H4	$1,870.10^6$	$-6,083.10^4$	$1,809.10^6$	$1,874.10^6$
C3H6	$4,849.10^5$	$-6,083.10^4$	$1,843.10^6$	$1,874.10^6$
C6H6	$1,061.10^6$	$9,223.10^6$	$1,457.10^6$	$1,457.10^6$
H	$2,163.10^8$	$-1,200.10^8$	$1,448.10^7$	$7,261.10^6$
O	$1,558.10^7$	$-1,413.10^2$	$9,290.10^5$	$7,102.10^5$
OH	$2,292.10^6$	$-7,110.10^6$	$1,231.10^6$	$1,098.10^6$

TABLE C.1 – Exemples de valeurs d'enthalpie avant et après substitution d'espèces fermant le bilan atomique.

les enthalpies modifiées  $h_{fCHON,i}^0$  pour les espèces  $i$  non transportées, données par l'équation (C.5). On obtient alors la formulation suivante :

$$h_f^{0CFD} = \sum_{i=1}^M Y_i^{TAB} h_{f_i}^0 + \sum_{i=M+1}^N Y_i^{TAB} h_{fCHON,i}^0, \quad (C.9)$$

ce qui permet d'exprimer l'erreur  $\Delta h_f^0$  sous une autre forme :

$$\Delta h_f^0 = \sum_{i=M+1}^N Y_i^{TAB} (h_{fCHON,i}^0 - h_{f_i}^0). \quad (C.10)$$

Cette forme montre que l'erreur d'estimation de l'enthalpie de formation est fonction de l'écart entre l'enthalpie de formation  $h_{f_i}^0$  de l'espèce  $i$  non transportée et l'enthalpie  $h_{fCHON,i}^0$ .

## C.2 Impact sur la température

La température est obtenue à partir du code CFD en résolvant l'équation implicite suivante :

$$h = h_f^{0CFD} + h_s^{CFD} = h_f^{0CFD} + \int_{T_{ref}}^T c_p^{CFD} dT, \quad (C.11)$$

où  $h$  est l'enthalpie physico-chimique calculée par le code CFD. Dans le seul souci de simplifier la présentation de la méthode, on néglige dans ce qui suit la dépendance en température de  $c_p$ . Cette hypothèse simplificatrice qui n'a pas été adoptée dans la programmation du calcul de la température ne remet pas en cause le principe de la méthode. Avec cette hypothèse, on a :

$$T^{CFD} = \frac{h - h_f^{0CFD}}{c_p^{CFD}} + T_{ref}. \quad (C.12)$$

En fixant en un point donné de l'écoulement les variables d'entrée  $(Z, c)$  de la table chimique, on obtient à partir de cette table une température  $T^{TAB}$  du mélange qui peut différer de  $T^{CFD}$ . Une différence la plus faible possible entre les deux évaluations de la température du mélange  $T^{CFD}$  et  $T^{TAB}$  est un gage du bon fonctionnement de la méthode FTC et est donc fortement souhaitable. La température  $T^{TAB}$  est solution d'une équation similaire à l'équation (C.12) :

$$T^{TAB} = \frac{h - h_f^{0TAB}}{c_p^{TAB}} + T_{ref}. \quad (C.13)$$

L'enthalpie  $h$  de la flamme sélectionnée dans la table chimique pour calculer  $T^{TAB}$  est en effet fixée par l'intermédiaire de  $Z$  à une valeur identique à celle obtenue par le code CFD s'il n'y a pas de perte thermique.

A partir de (C.12) et (C.13) on obtiendrait  $T^{CFD} = T^{TAB}$  si on respectait les égalités  $h_f^{0CFD} = h_f^{0TAB}$  et  $c_p^{CFD} = c_p^{TAB}$ . Or, en établissant une équation du même type que l'équation (C.7) pour la capacité calorifique, on montre que le report de la masse des espèces non transportées sur certaines espèces transportées entraîne la modification des propriétés thermodynamiques du mélange :

$$c_p^{CFD} = c_p^{TAB} + \Delta c_p, \quad (C.14)$$

$$h_f^{0CFD} = h_f^{0TAB} + \Delta h_f^0. \quad (C.15)$$

En reportant (C.14) et (C.15) dans (C.12) on obtient l'expression suivante pour la température calculée à partir du code CFD :

$$T^{CFD} = \frac{h - h_f^{0TAB} - \Delta h_f^0}{c_p^{TAB} + \Delta c_p} + T_{ref}. \quad (C.16)$$

En soustrayant (C.13) à (C.16) on obtient alors une estimation de l'erreur sur la température :

$$\Delta T = T^{CFD} - T^{TAB} = -\frac{\Delta c_p(T^{TAB} - T_{ref}) + \Delta h_f^0}{c_p^{TAB} + \Delta c_p}, \quad (C.17)$$

soit en relatif :

$$\frac{|\Delta T|}{T^{TAB}} = \frac{1}{T^{TAB}} \left| \frac{\Delta c_p(T^{TAB} - T_{ref}) + \Delta h_f^0}{c_p^{TAB} + \Delta c_p} \right|. \quad (C.18)$$

D'après (C.10) cette erreur peut s'écrire :

$$\frac{|\Delta T|}{T^{TAB}} = \frac{1}{T^{TAB}} \frac{\left| \sum_{i=1}^N Y_i (c_{pCHON,i} - c_{p_i})(T^{TAB} - T_{ref}) + \sum_{i=1}^N Y_i (h_{fCHON,i}^0 - h_{f_i}^0) \right|}{\sum_{i=1}^M Y_i c_{p_i}^{TAB} + \sum_{i=M+1}^N Y_i c_{pCHON,i}^{TAB}} \quad (C.19)$$

Par conséquent, une condition suffisante pour minimiser la déviation de température dans le calcul CFD est de transporter les espèces dont les écarts  $(c_{pCHON,i} - c_{p_i})$  et  $(h_{fCHON,i}^0 - h_{f_i}^0)$  sont considérés comme importants. On transportera alors une espèce si :

$$\frac{1}{T^{TAB}} \frac{|c_{pCHON,i} - c_{p_i}| |T^{TAB} - T_{ref}| + |h_{fCHON,i}^0 - h_{f_i}^0|}{\sum_{i=1}^N Y_i c_{p_i}^{TAB}} > \alpha \quad (C.20)$$

où  $\alpha$  est un critère choisi par l'utilisateur. Plus la valeur de  $\alpha$  est faible, moindre sera l'écart entre la température calculée dans le code CFD et la température déduite de la table, mais plus grand sera le nombre d'espèces à transporter. Signalons que le dénominateur  $\sum_{i=1}^M Y_i c_{p_i}^{TAB} + \sum_{i=M+1}^N Y_i c_{pCHON,i}^{TAB}$  apparaissant dans (C.19) a été remplacé dans (C.20) par  $\sum_{i=1}^N Y_i c_{p_i}^{TAB}$  de façon à obtenir un critère explicite.

## ANNEXE D

### Discrétisation de la table dans la direction $c$ (variable d'avancement) : distribution des points en fonction de la courbure des taux de réaction

Le modèle de chimie tabulée implémenté dans CEDRE s'appuie sur une interpolation des termes source chimiques issus d'une table indexée selon deux variables (au minimum), ici  $Z$  et  $c$ . Pour générer une telle table, les calculs sont faits dans le cadre de cette thèse avec l'outil Cantera, qui résout un problème de flamme laminaire 1D dans l'espace physique. Une procédure de raffinement automatique est utilisée pour adapter la grille utilisée pour résoudre le problème discret. Cette procédure conduit à l'obtention d'un nombre de points assez important pour discrétiser la flamme 1D. La solution de chaque flamme 1D doit ensuite être projetée sur le maillage à deux dimensions de l'espace ( $Z, c$ ) pour être stockée dans la table. Le maillage de l'espace ( $Z, c$ ) est généralement raffiné autour de la valeur de  $Z$  correspondant à la stœchiométrie dans la direction  $Z$ , et uniforme dans la direction  $c$ . Dans le cadre d'un couplage du modèle FTC avec le code CFD via les termes sources chimiques, l'utilisation d'une répartition des points uniforme dans la direction  $c$  n'est pas adaptée pour le calcul des termes sources par interpolation linéaire dans la table. On lui préfère pour ce travail de thèse, une répartition basée sur la courbure des profils de taux de réaction dans la direction  $c$ , présentée ci-dessous. Notons que la prise en compte de la courbure uniquement, peut conduire à une distribution générant de fortes erreurs d'interpolation dans les zones de faible courbure où la pente est infinie. Cependant, les termes sources chimiques ne présentent généralement en aucun point du maillage une pente infinie. C'est pourquoi on s'affranchit de la prise en compte de la pente pour effectuer la répartition des points.

Les résultats de deux calculs CEDRE utilisant la chimie tabulée ont été comparés. Ceux-ci ne diffèrent que par la méthode de projection en  $c$  utilisée lors de la génération de la table chimique. Le cas simulé est la flamme laminaire diphasique présentée au chapitre 5. Les deux méthodes de projection comparées sont les suivantes :

- projection sur un maillage uniforme de la variable d'avancement
- projection sur un maillage de  $c$  dont les points sont répartis selon la courbure des profils des taux de réaction dans la direction  $c$ .

Les deux tables comportent 200 points, mais on peut voir sur la figure D.1 qu'avec la première méthode, les termes sources interpolés montrent des écarts importants par rapport aux termes sources issus de la simulation Cantera ayant servi à générer la table. En effet, si l'on compare les deux agrandissements effectués sur la partie droite de la figure D.1, on voit que l'espacement des points dans les zones de forte courbure des taux de réaction peuvent être suffisamment importants pour que le profil obtenu par interpolation linéaire (représenté en traits pointillés) s'écarte nettement du profil de référence issu de la simulation Cantera (en traits pleins).

Ces erreurs d'interpolation se retrouvent sur le résultat de calcul CEDRE, comme le montre la figure D.2. En effet, le profil de CO calculé avec FTC en utilisant la table maillée uniformément s'éloigne du profil obtenu avec la résolution directe de la chimie dans CEDRE. On voit que le CO est produit en excès dans la flamme et n'est pas re-consommé ensuite comme cela devrait être le cas. Parallèlement, l'espèce  $O_2$  est consommée en excès dans les gaz brûlés. Sur le résultat obtenu avec

FTC en utilisant la table maillée selon la courbure des profils des taux de réaction, on voit que ce problème a disparu et que les résultats de la simulation FTC sont en parfait accord avec ceux de la simulation avec résolution directe de la chimie, au point que les profils en pointillés sont confondus avec ceux en trait pleins.

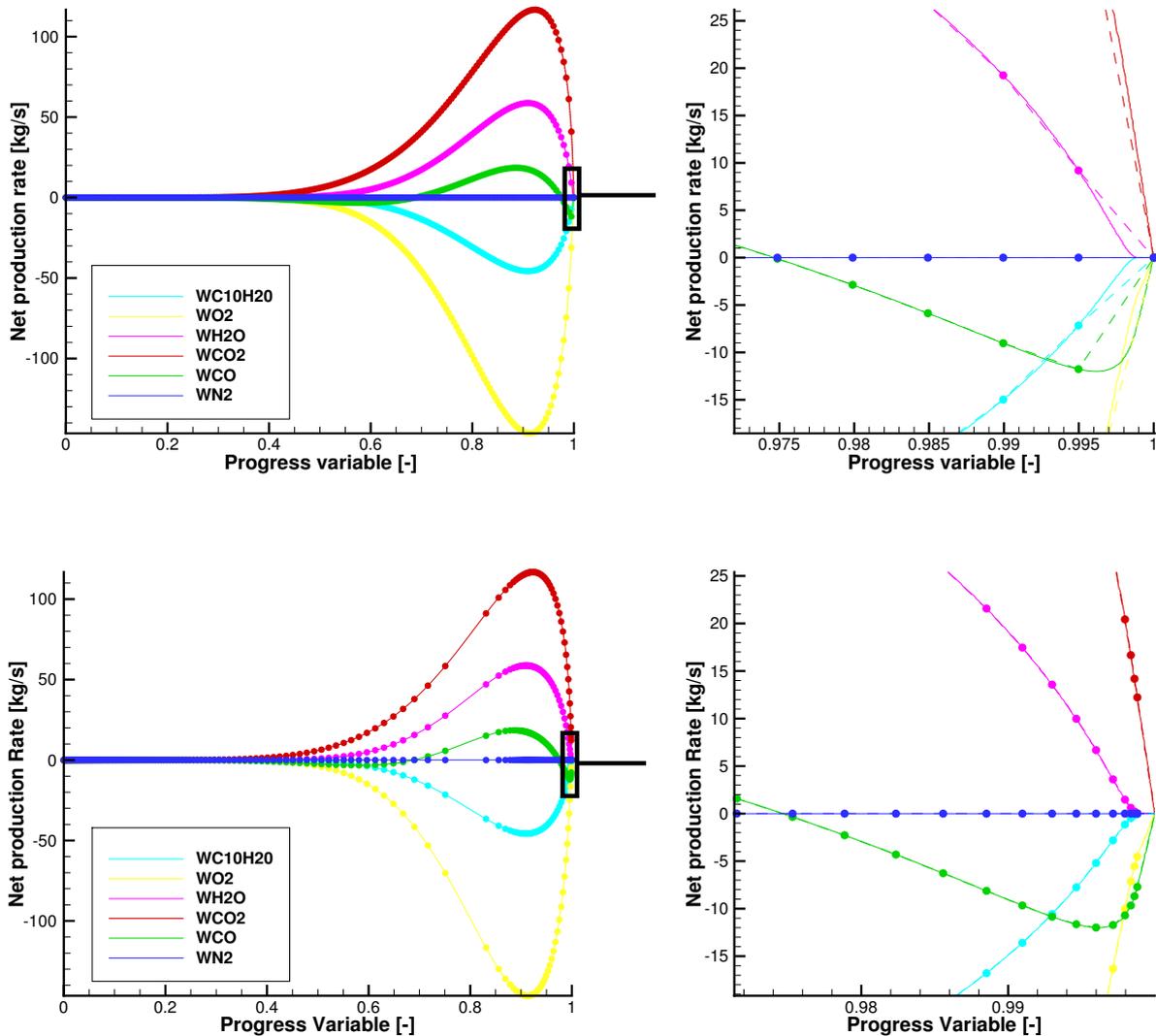


FIGURE D.1 – Comparaison de deux méthodes de répartition des points selon  $C$ . En haut, répartition uniforme. En bas, répartition selon la courbure des taux de réaction. En trait pleins, les profils issus du calcul Cantera (sur environ 1500 points de maillage). En cercles, les profils aux points de la table FTC comportant 200 points. En pointillés, les profils linéairement dans la table. A droite, zoom sur la partie encadrée sur les vues de gauche. Les profils en traits pointillés et en traits pleins sont confondus sur la partie inférieure de la figure.

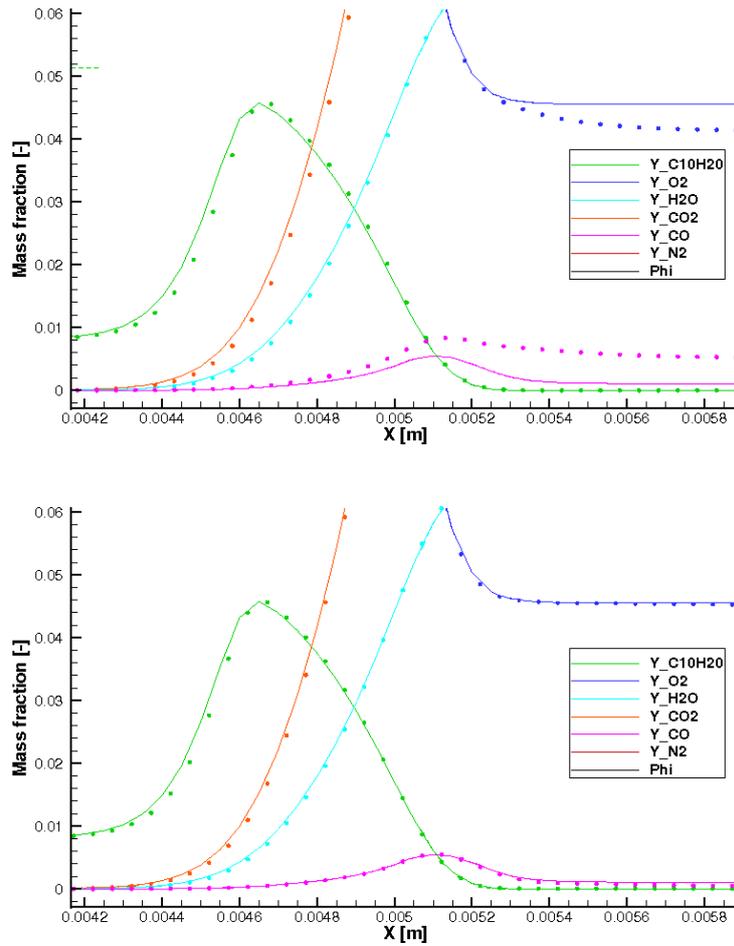


FIGURE D.2 – Simulation d’une flamme diphasique  $C_{10}H_{20}$  liquide / air avec Cedre. En haut, utilisation d’une table FPI avec répartition uniforme en  $c$ . En bas, utilisation d’une table FTC avec distribution des points en  $c$  selon la courbure des termes sources chimiques. Traits pleins : modèle type Arrhenius dans CEDRE ; cercles pleins : modèle FTC dans CEDRE.



## ANNEXE E

Flamme de Santoro : profils supplémentaires pour la validation de FTC en régime de diffusion

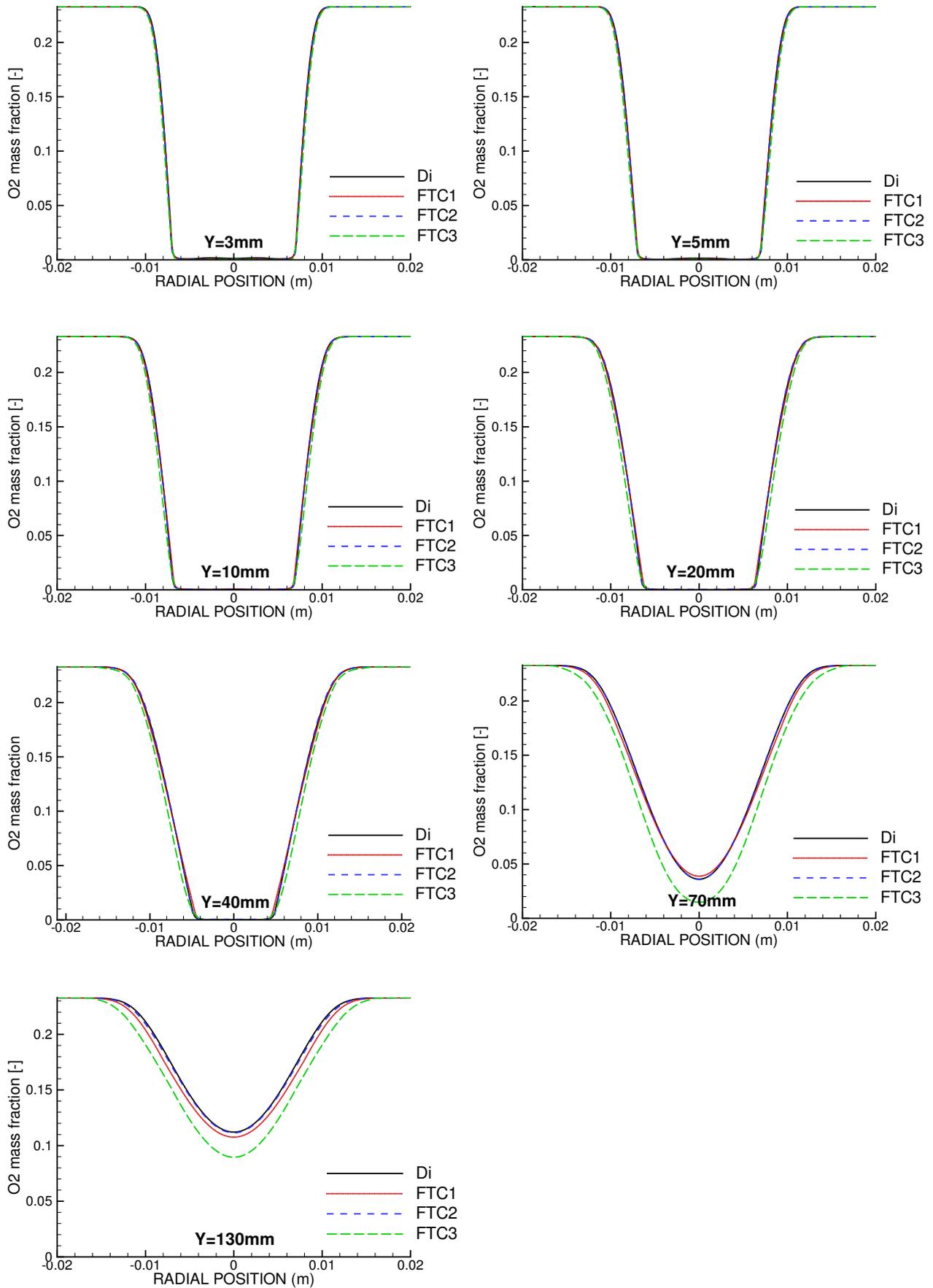


FIGURE E.1 – Profils de fraction massique de O<sub>2</sub> obtenus avec différentes variantes FTC et avec un calcul direct de la cinétique chimique (Di).

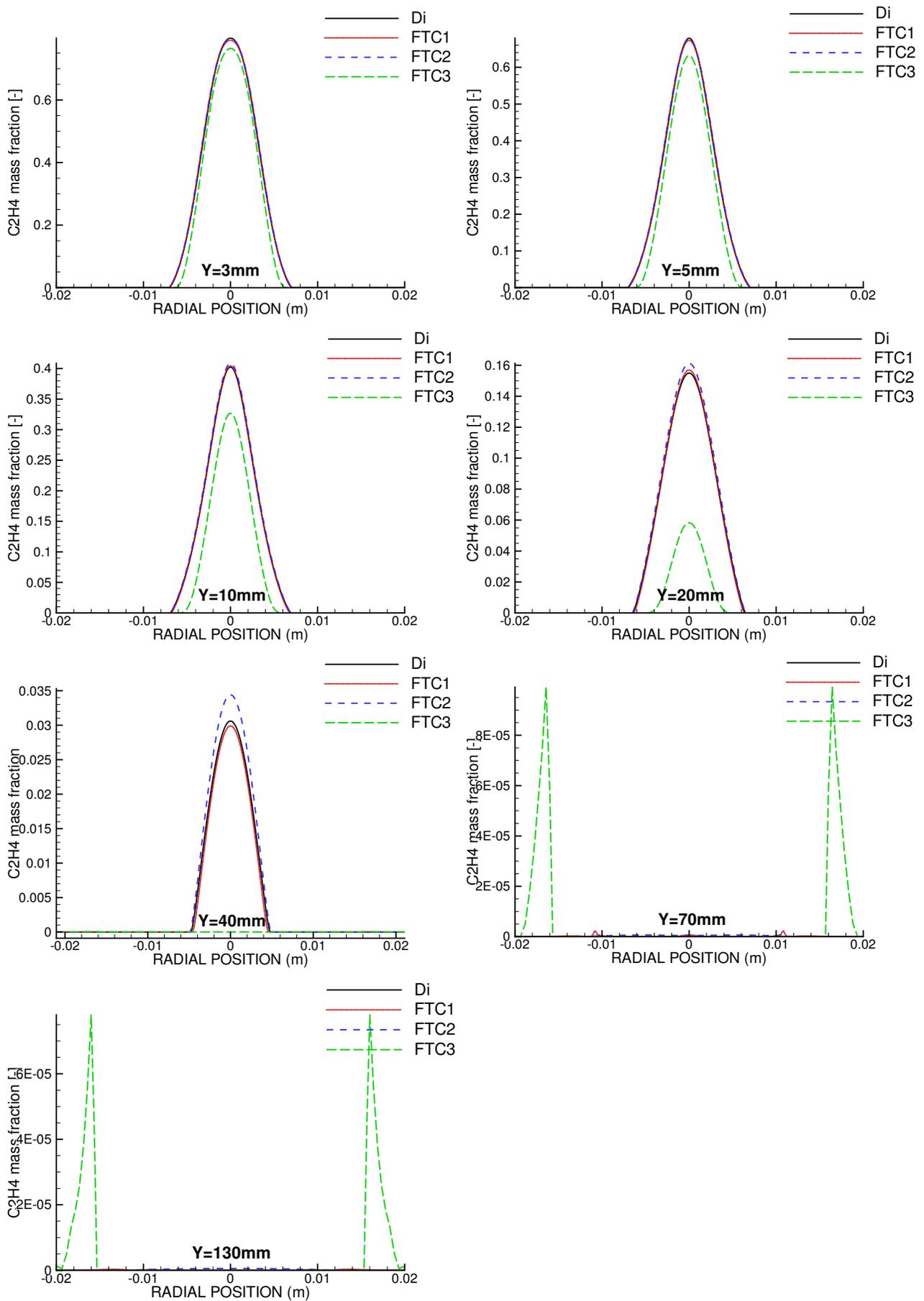


FIGURE E.2 – Profils de fraction massique de  $C_2H_4$  obtenus avec différentes variantes FTC et avec un calcul direct de la cinétique chimique (Di).

Ci-dessous, l'écart entre le profil FTC3 et le profil Di est lié au fait que la masse des espèces de la table FTC non transportées dans le code CFD est reportée sur l'azote. Cet écart n'est pas visible sur le profil FTC3\_N2TAB car celui-ci correspond à la fraction massique extraite de la table FTC.

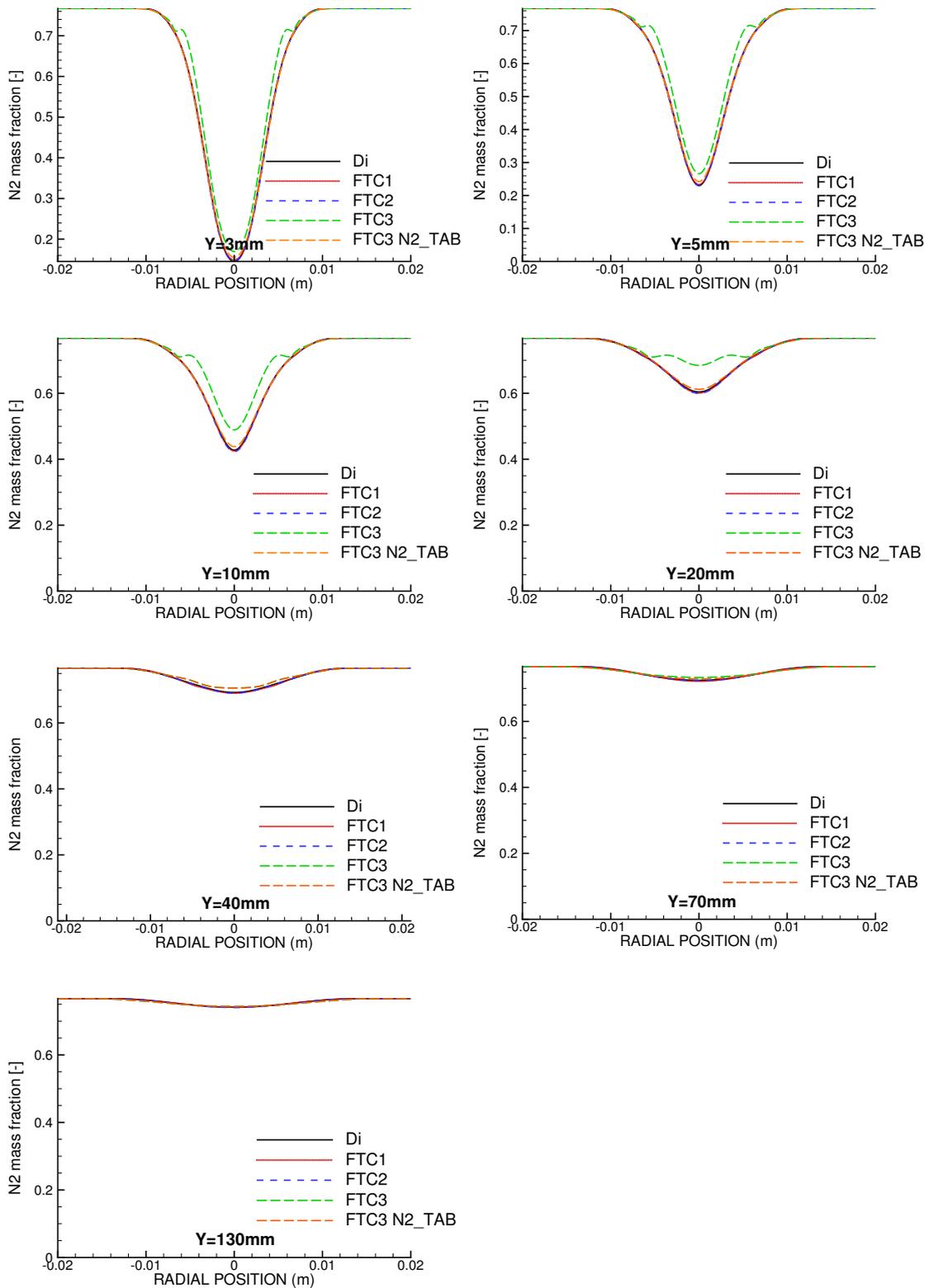


FIGURE E.3 – Profils de fraction massique de N<sub>2</sub> obtenus avec différentes variantes FTC et avec un calcul direct de la cinétique chimique (Di).

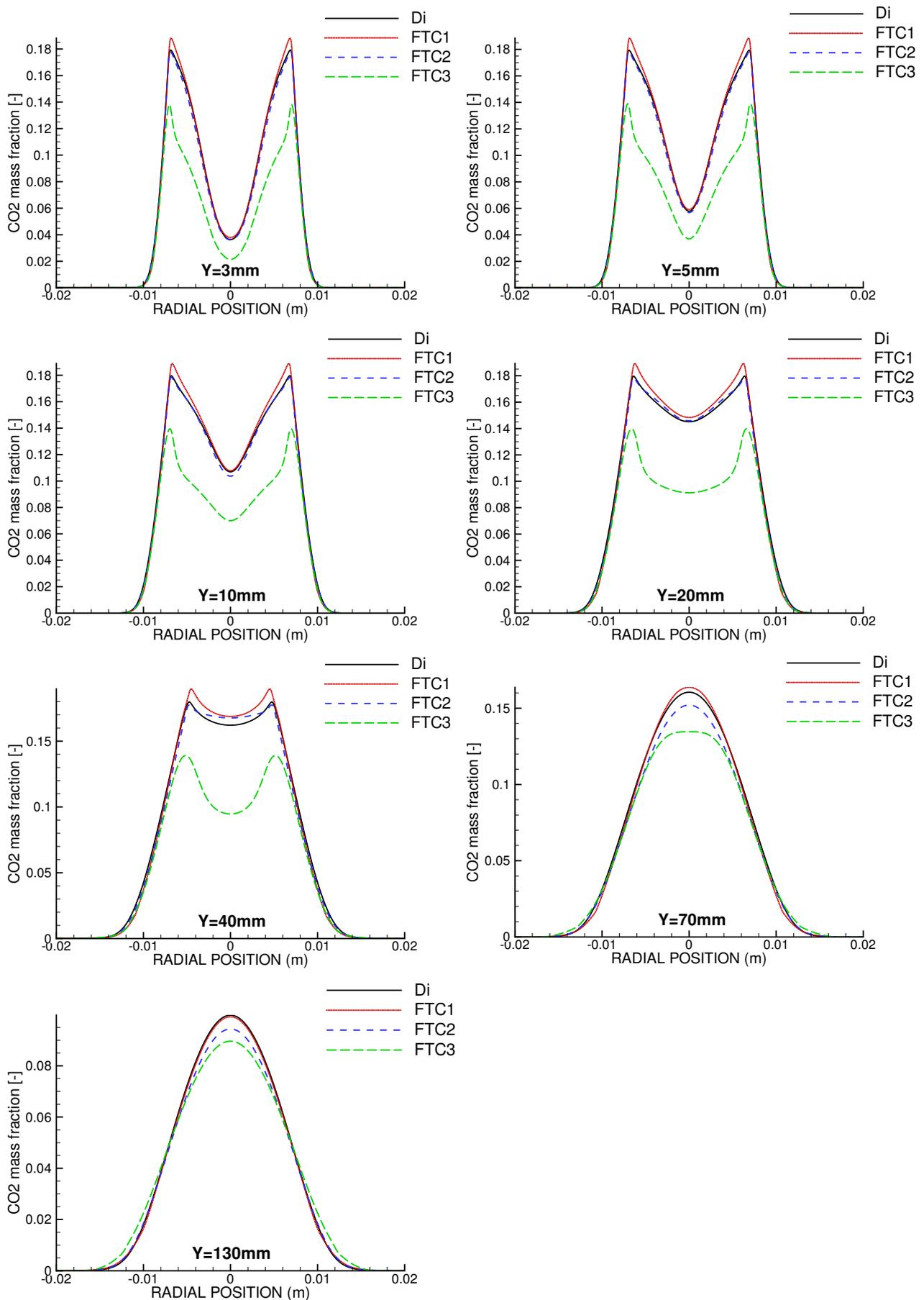


FIGURE E.4 – Profils de fraction massique de CO<sub>2</sub> obtenus avec différentes variantes FTC et avec un calcul direct de la cinétique chimique (Di).



## ANNEXE F

### Remarques à propos de l'influence du modèle de diffusion moléculaire sur la prédiction des suies

Dans le code CEDRE, le terme de diffusion moléculaire apparaissant dans l'équation de transport de la fraction massique d'une espèce est modélisé par défaut suivant une loi de la forme :

$$J_k = -\rho D_k \nabla Y_k + \rho Y_k \mathcal{V}_c, \quad (\text{F.1})$$

où  $J_k$  est le flux de diffusion moléculaire de l'espèce  $k$ ,  $D_k$  est le coefficient de diffusion de l'espèce  $k$ , et  $\mathcal{V}_c$  est une vitesse de correction permettant d'assurer que la somme des flux de diffusion moléculaire soit nulle. Cette loi de diffusion s'applique donc par défaut à la fraction massique de suie, et le calcul de la flamme de Santoro donne dans ce cas le champ de fraction volumique de suie représenté sur la figure F.1. On constate que la topologie du champ de fraction volumique ne reproduit pas du tout celle

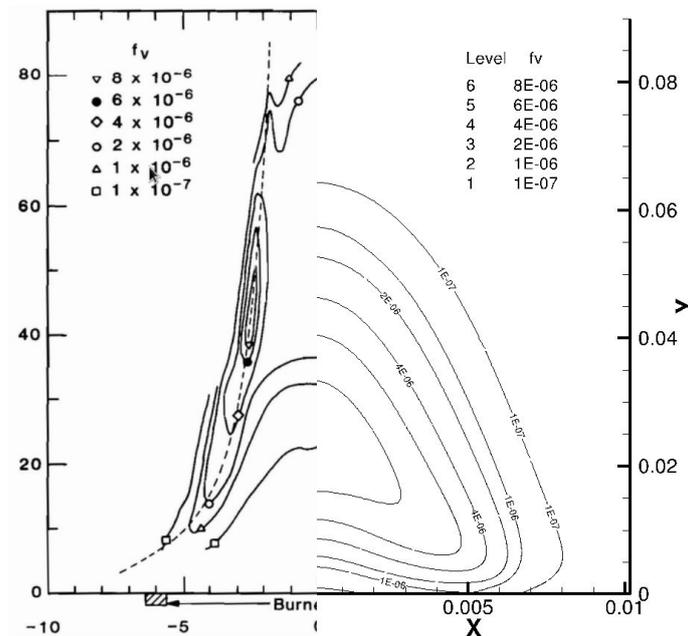


FIGURE F.1 – Iso-contours du champ de fraction volumique de suies du cas 2 de la configuration de Santoro et al. [90], avec une diffusion moléculaire donnée par F.1. A gauche les mesures expérimentales, à droite le résultat CEDRE avec couplage de FTC avec le modèle de suies.

qui a été obtenue expérimentalement. Pour obtenir le champ de fraction volumique de suie présenté au chapitre 3 sur la figure 3.1, le terme de diffusion donné par (F.1) a été annulé dans l'équation de transport de la fraction volumique de suie, et un terme de diffusion par thermophorèse, préconisé dans

[47], a été ajouté :

$$J_{soot} = -c_{th} \frac{\mu}{T} \nabla T Y_{C_s}, \quad (\text{F.2})$$

où  $c_{th}$  est une constante valant 0,55, et  $\mu$  est la viscosité dynamique du mélange.

Enfin, pour obtenir le résultat de la figure 3.1, le terme de diffusion moléculaire a également été annulé dans l'équation de transport de la densité de particules de suies.

## ANNEXE G

### Tests additionnels sur un senseur de flamme basé sur les taux de réaction

La détection de la flamme basée sur le taux de réaction de carburant n'est pas adaptée pour épaissir l'ensemble de la zone de réaction de la flamme. On peut essayer d'augmenter la sensibilité du senseur de flamme aux très faibles valeurs de  $\dot{\omega}_F(c, \mathcal{Z})$ . On prend pour cela un senseur qui vaut 1 si  $\frac{\omega_F(c, \mathcal{Z})}{\omega_F^{max}(\mathcal{Z})}$  est supérieur à  $\epsilon = 1.10^{-9}$ , et 0 partout ailleurs. On voit sur la figure G.1 (en haut) que le senseur est actif sur une zone assez épaisse en amont de la flamme, mais ne couvre pas l'ensemble de la zone de réaction. La vitesse de flamme obtenue est ainsi différente de la vitesse obtenue avec un facteur d'épaississement  $\mathcal{F}$  constant.

Puisque l'utilisation d'une seule espèce (le carburant) pour détecter la flamme ne semble pas convenir, on propose d'utiliser le taux de réaction de toutes les espèces transportées. On choisit donc un senseur qui vaut 1 si  $\frac{\omega(c, \mathcal{Z})}{\omega^{max}(\mathcal{Z})}$  est supérieur à  $\epsilon$ , mais cette fois  $\omega$  est défini par rapport à l'ensemble des espèces transportées :

$$\omega = \sum_{i=1}^{n_{esp}} |\omega_i| \quad (\text{G.1})$$

En procédant ainsi, la vitesse de flamme devient identique à celle obtenue avec un facteur d'épaississement constant. Cela s'explique par l'évolution du senseur le long de la flamme : certaines espèces ayant des temps chimiques relativement grands (notamment CO en zone sur-stœchiométrique et NO dans des zones pauvres) vont continuer d'évoluer loin en aval de la flamme. Cela a pour effet d'activer l'épaississement dans une zone très large autours de la flamme, au point que le senseur de flamme n'assure plus le rôle qui lui est attribué. Les flux de diffusion seront en effet impactés par le modèle de « flamme épaissie » dans une zone qui s'étend bien au delà de la zone de réaction. Compte tenu des résultats obtenus, aucune des deux formulations proposées ici pour le senseur de flamme n'a été retenue.

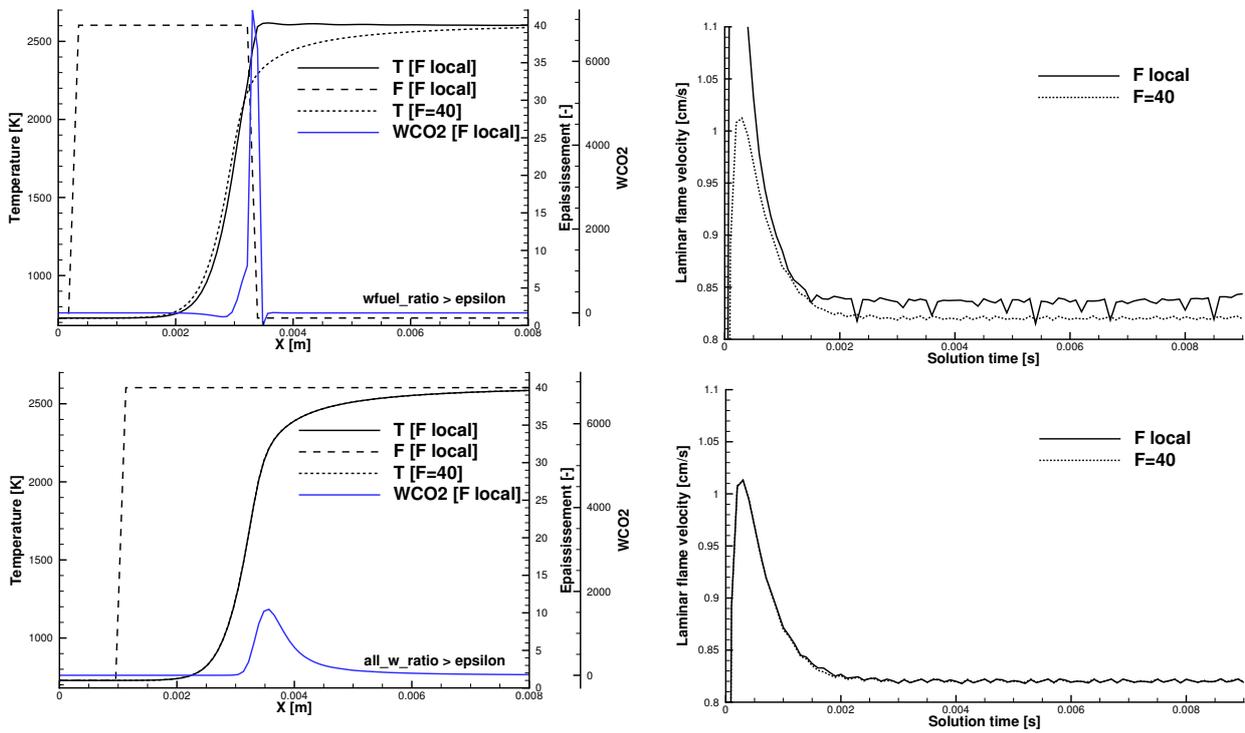


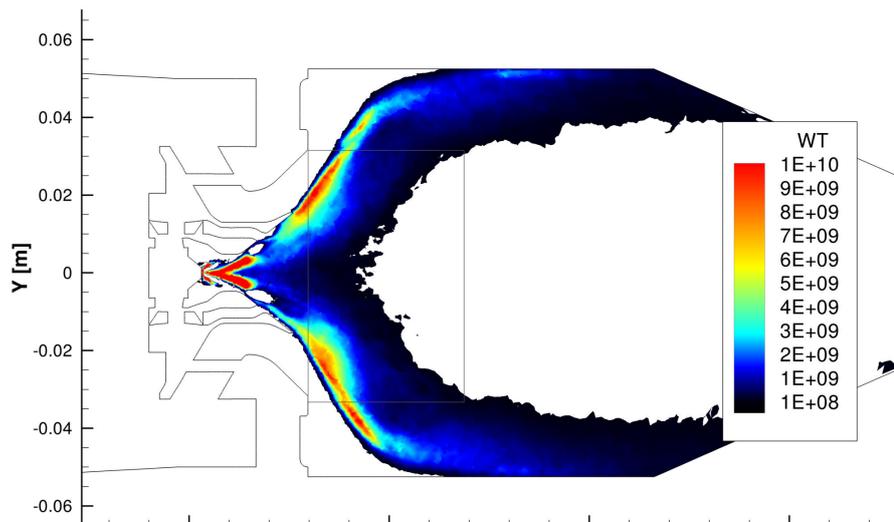
FIGURE G.1 – Comparaison entre épaisseur local et épaisseur constant sur une flamme laminaire prémélangée 1D. En haut :  $\alpha = 1$ , si  $\frac{\omega_F(c, Z)}{\omega_F^{max}(Z)} > \epsilon$ . En bas :  $\alpha = 1$ , si  $\frac{\omega(c, Z)}{\omega^{max}(Z)} > \epsilon$ .

## ANNEXE H

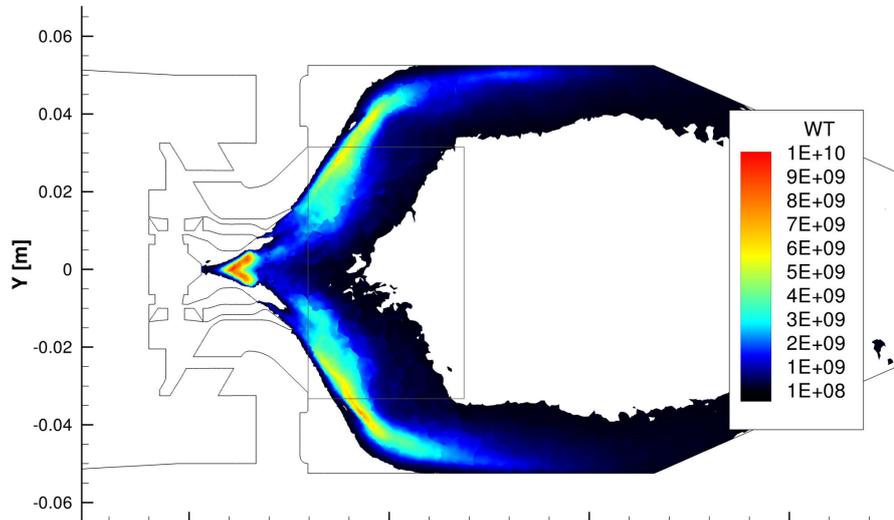
Résultats supplémentaires pour la configuration TLC

### H.1 Champs de dégagement de chaleur dans le plan médian de la chambre, obtenus avec une valeur de $\kappa$ égale à 100

No ICT model



« Thickened flame »



« Thickened flame »  
+  $P_\beta(Z)$

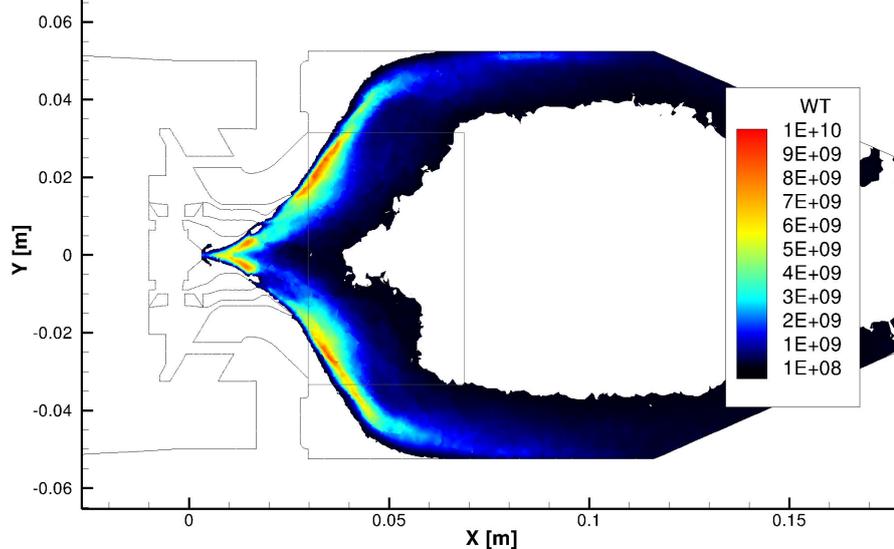


FIGURE H.1 – Champs de dégagement de chaleur dans le plan médian de la chambre TLC, obtenus avec différentes modélisation de l'interaction chimie-turbulence, en prenant  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$  et  $\kappa = 100$ .

## H.2 Champs et profils des espèces jouant le rôle d'oxydant des suies, obtenus avec une valeur de $\kappa$ égale à 100

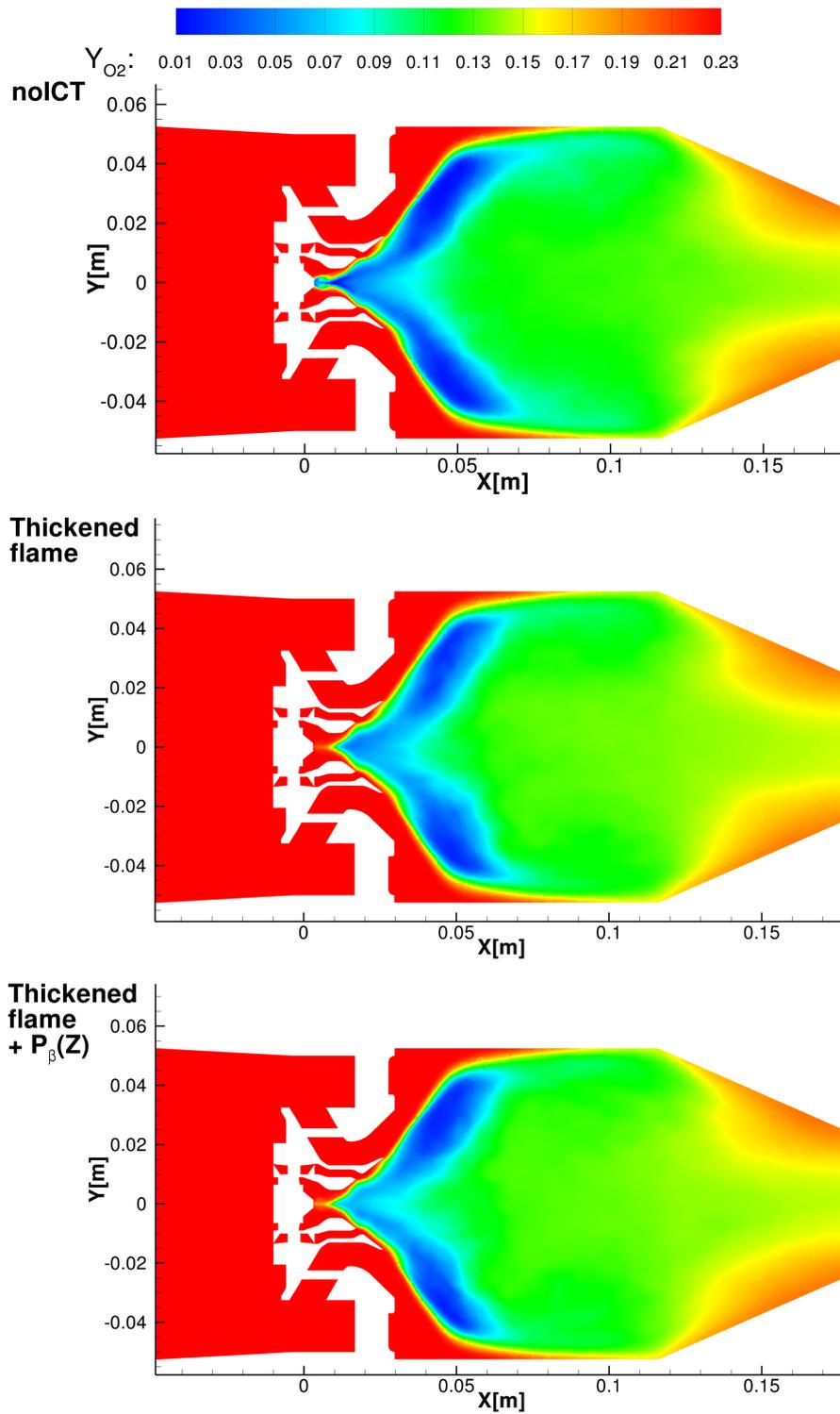


FIGURE H.2 – Champs moyens de la fraction massique transportée de  $O_2$ . Les résultats ont été obtenus avec différentes modélisation de l'interaction chimie-turbulence, en prenant  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{\mathcal{M}_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{\mathcal{M}_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{\mathcal{M}_{NO}}$  et  $\kappa = 100$ .

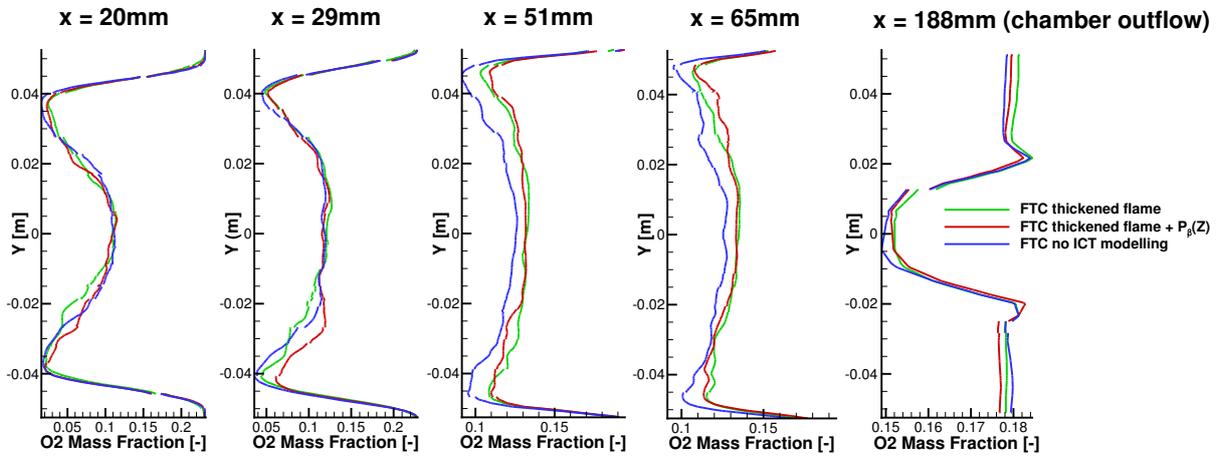


FIGURE H.3 – Profils de fraction massique d'O<sub>2</sub>. Les résultats ont été obtenus avec différentes modélisations de l'interaction chimie-turbulence, en prenant  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{\mathcal{M}_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{\mathcal{M}_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{\mathcal{M}_{NO}}$  et  $\kappa = 100$ .

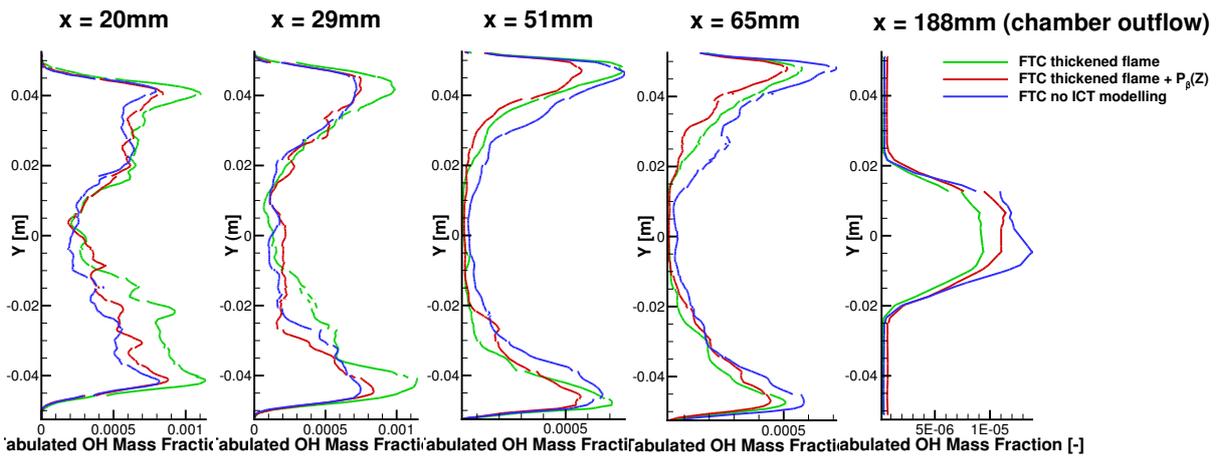


FIGURE H.4 – Profils de fraction massique tabulée d'OH. Les résultats ont été obtenus avec différentes modélisations de l'interaction chimie-turbulence, en prenant  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{\mathcal{M}_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{\mathcal{M}_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{\mathcal{M}_{NO}}$  et  $\kappa = 100$ .

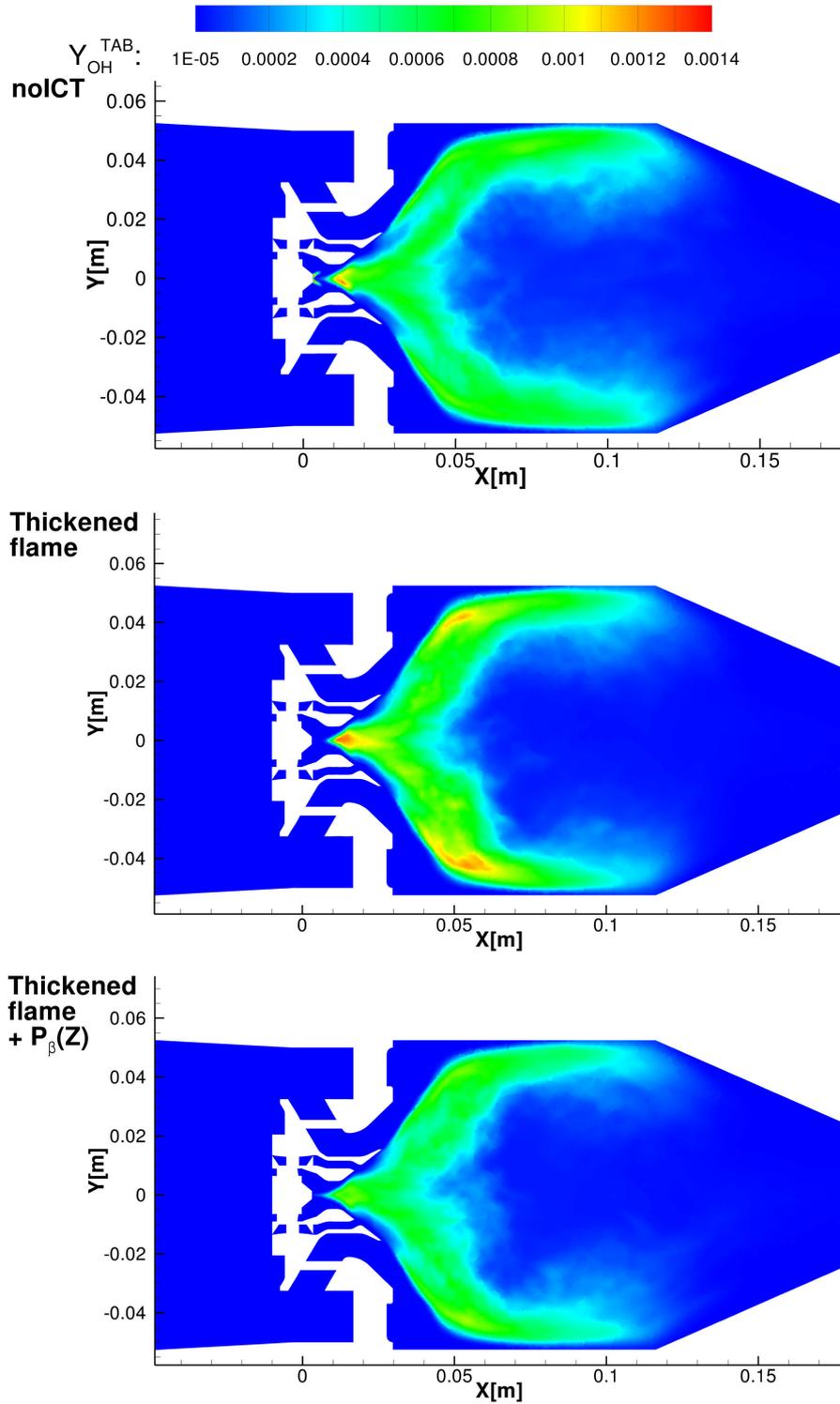


FIGURE H.5 – Champs moyens de la fraction massique de OH extraite de la table FTC. Les résultats ont été obtenus avec différentes modélisation de l'interaction chimie-turbulence, en prenant  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{\mathcal{M}_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{\mathcal{M}_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{\mathcal{M}_{NO}}$  et  $\kappa = 100$ .

### H.3 Résultats obtenus avec une valeur de $\kappa$ égale à 10

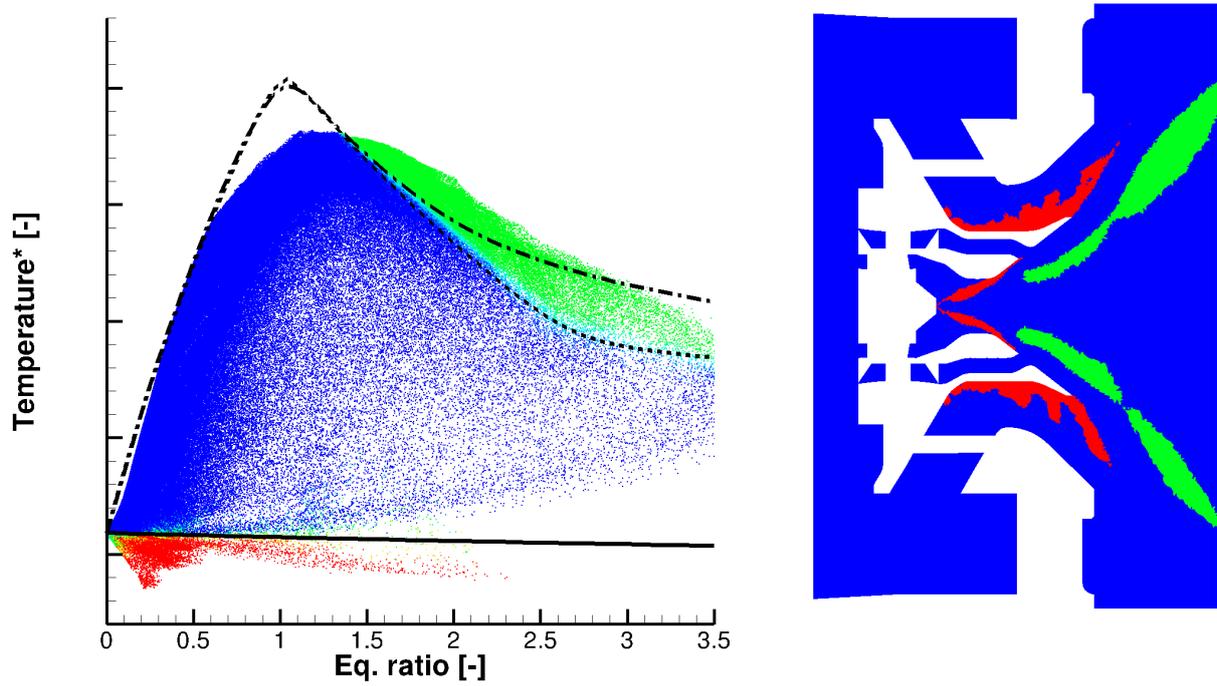


FIGURE H.6 – Nuage de points représentant la température adimensionnée en fonction de la richesse locale obtenu avec  $\hat{c} = \frac{Y_{\text{CO}_2}}{\mathcal{M}_{\text{CO}_2}} + \frac{Y_{\text{CO}}}{\mathcal{M}_{\text{CO}}} + \kappa \frac{Y_{\text{NO}}}{\mathcal{M}_{\text{NO}}}$ ,  $\kappa = 10$  et sans modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

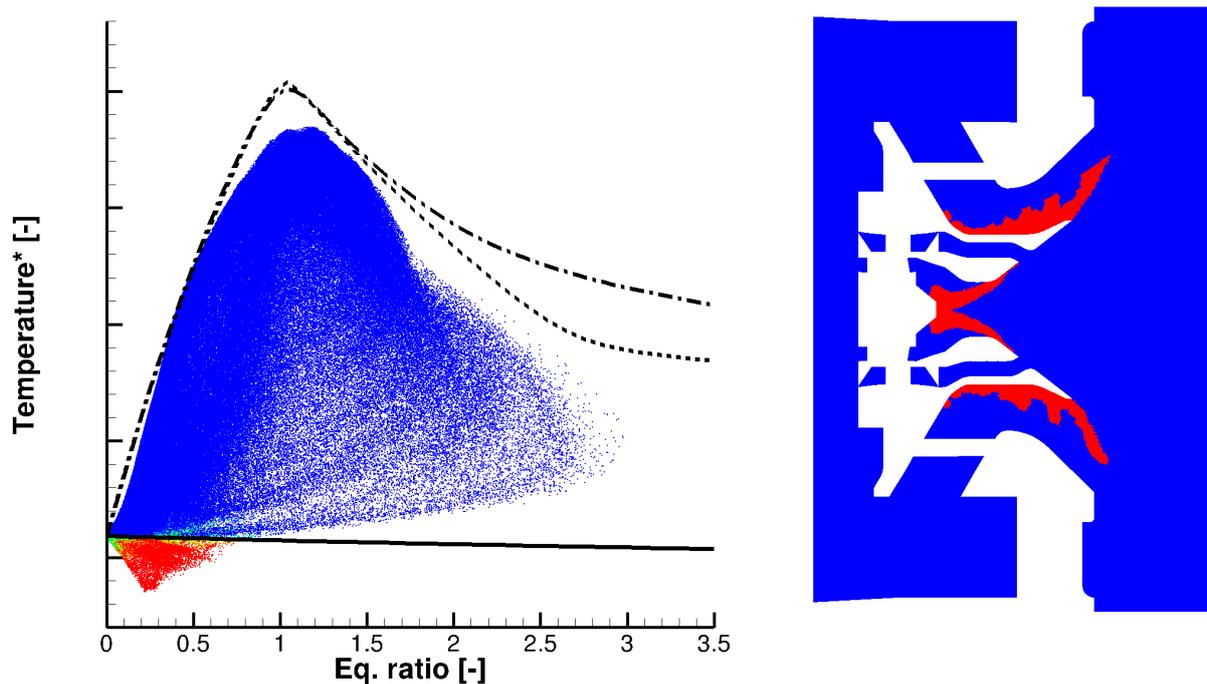


FIGURE H.7 – Nuage de points représentant la température adimensionnée en fonction de la richesse locale obtenu avec  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$ ,  $\kappa = 10$  et une approche « flamme épaissie » pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

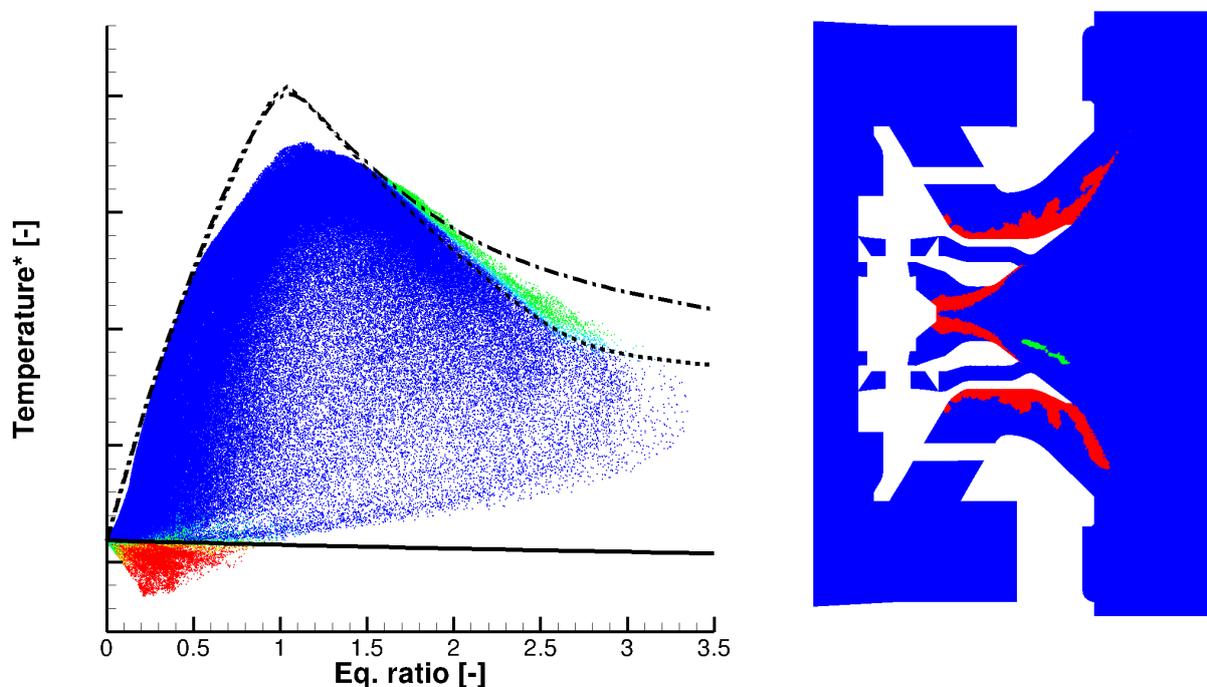


FIGURE H.8 – Nuage de points représentant la température adimensionnée en fonction de la richesse locale obtenu avec  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$ ,  $\kappa = 10$  et les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

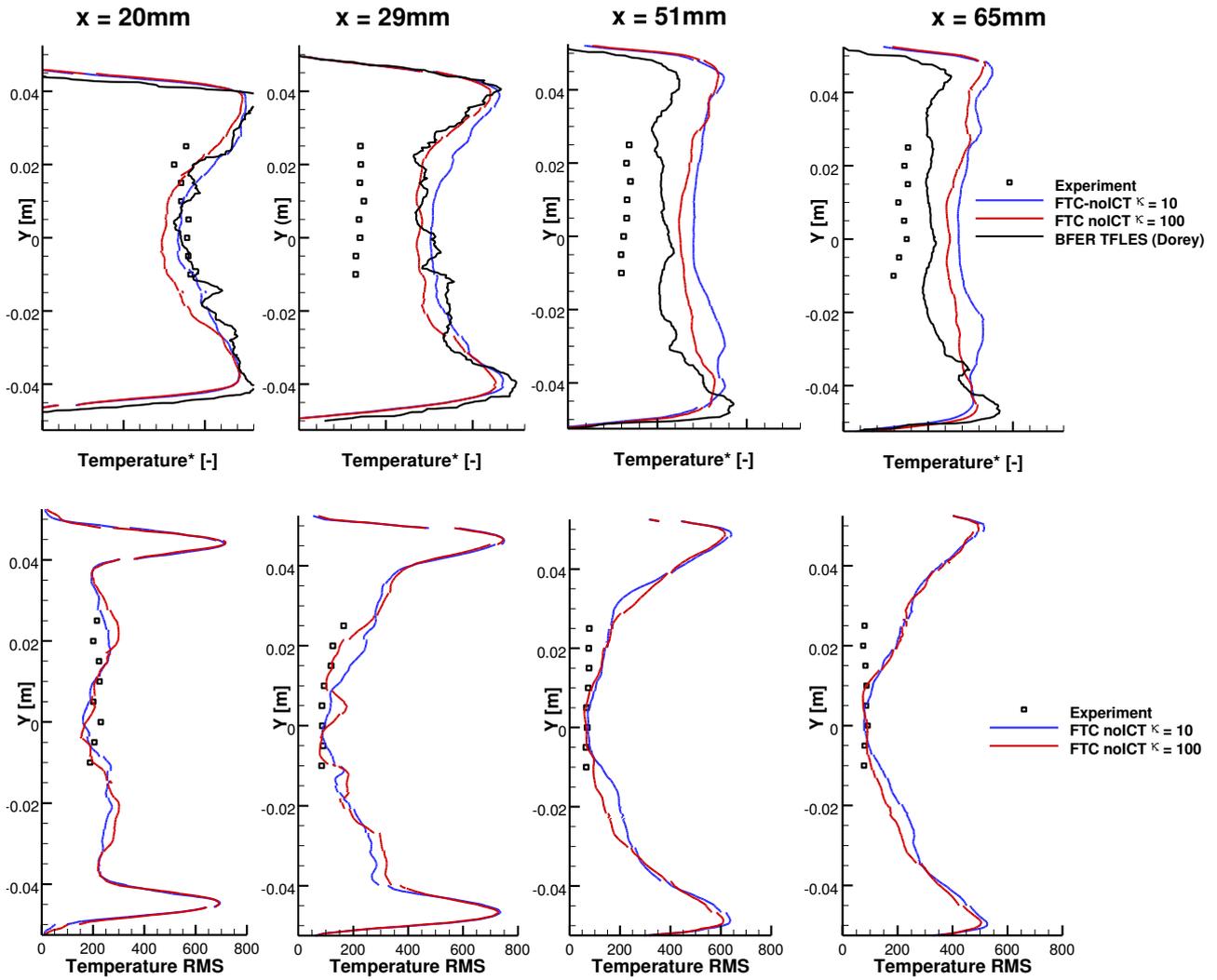


FIGURE H.9 – Effet de la valeur de  $\kappa$  (intervenant dans le calcul de  $\hat{c}$ ) sur les profils de température moyenne adimensionnée et RMS obtenus sans modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

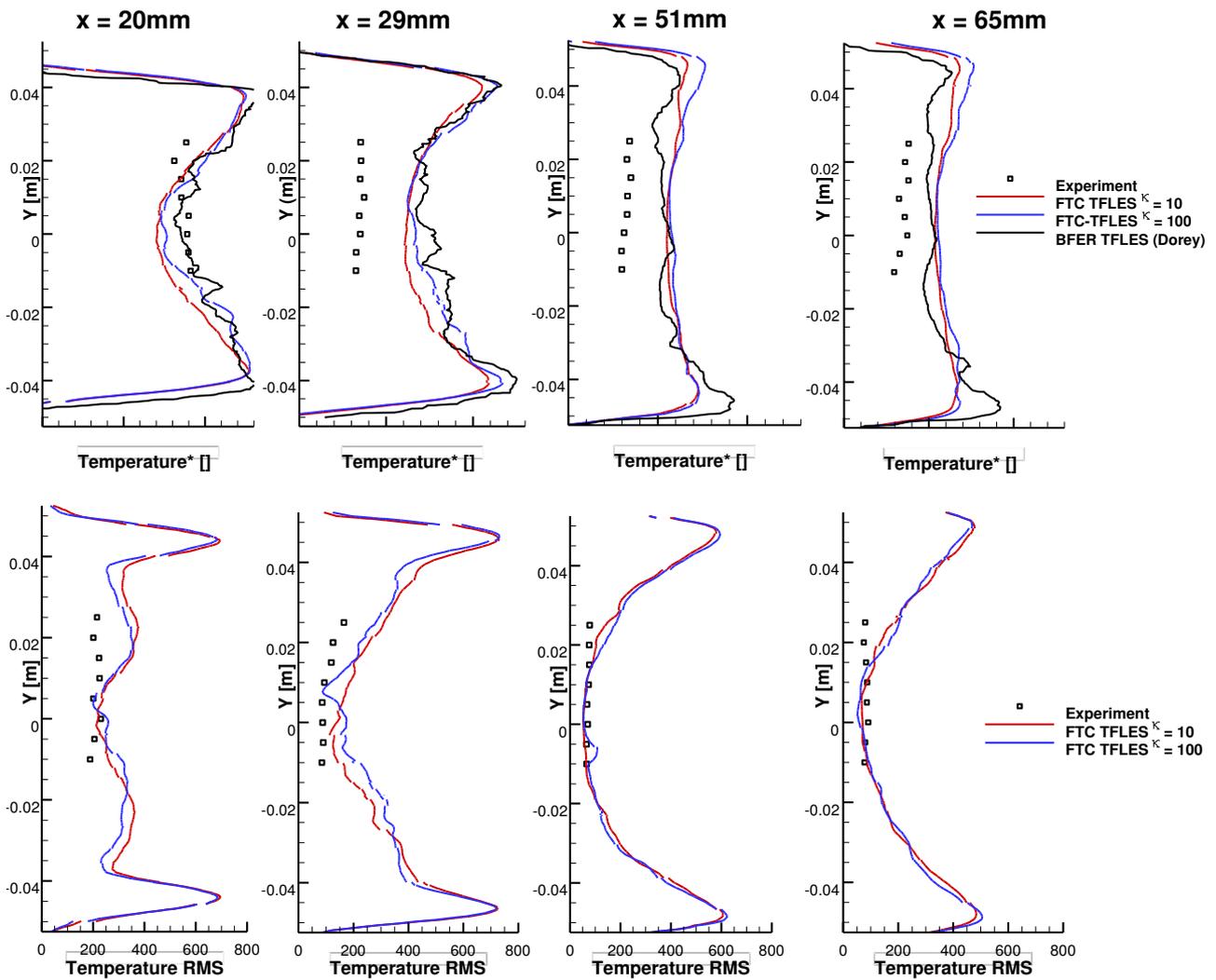


FIGURE H.10 – Effet de la valeur de  $\kappa$  (intervenant dans le calcul de  $\hat{c}$ ) sur les profils de température moyenne adimensionnée et RMS obtenus avec une approche « flamme épaissie » pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

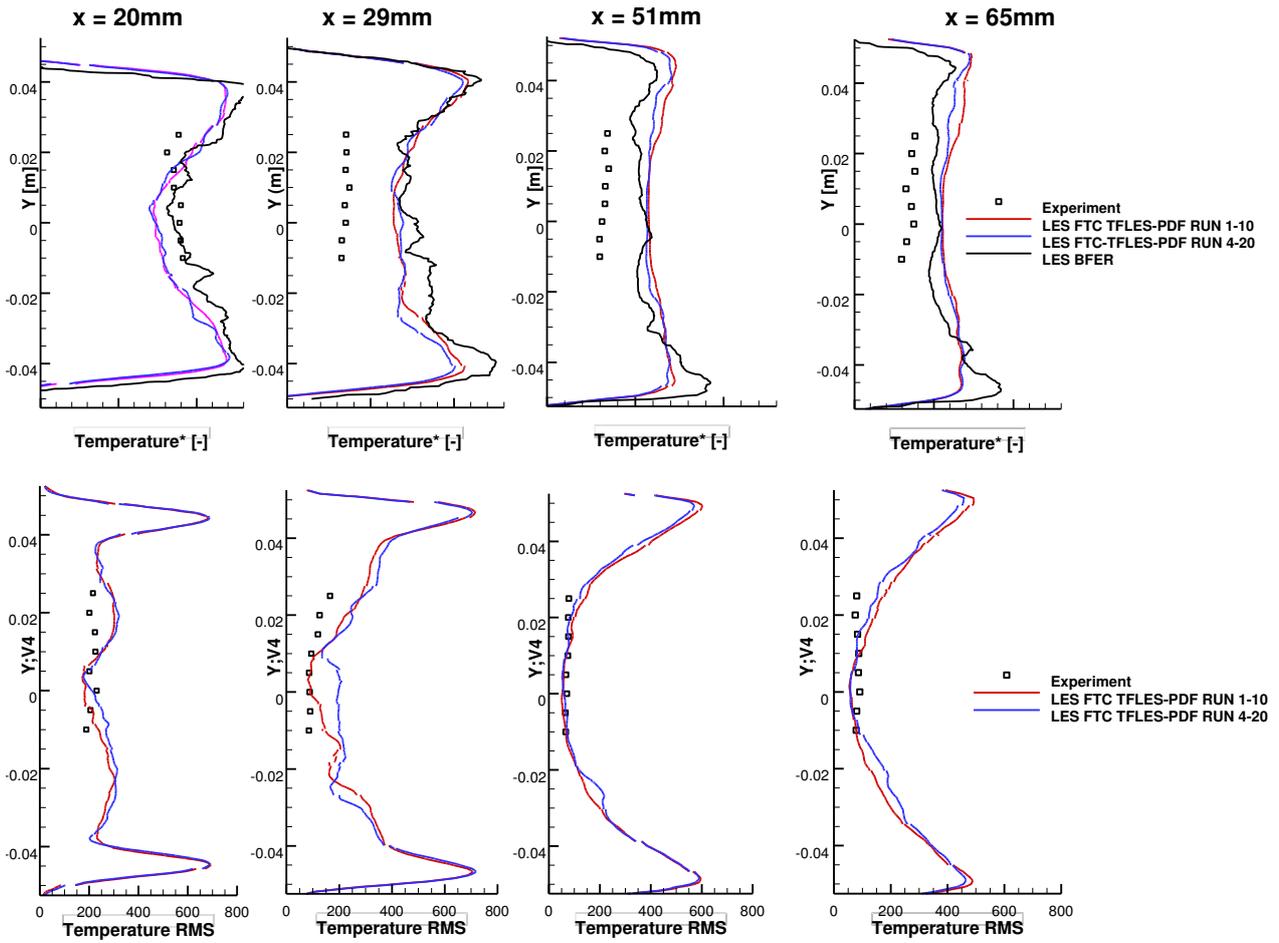


FIGURE H.11 – Effet de la valeur de  $\kappa$  (intervenant dans le calcul de  $\hat{c}$ ) sur les profils de température moyenne adimensionnée et RMS obtenus avec les approches « flamme épaissie » et « PDF de  $Z$  présumée » pour la modélisation de l'interaction chimie-turbulence.

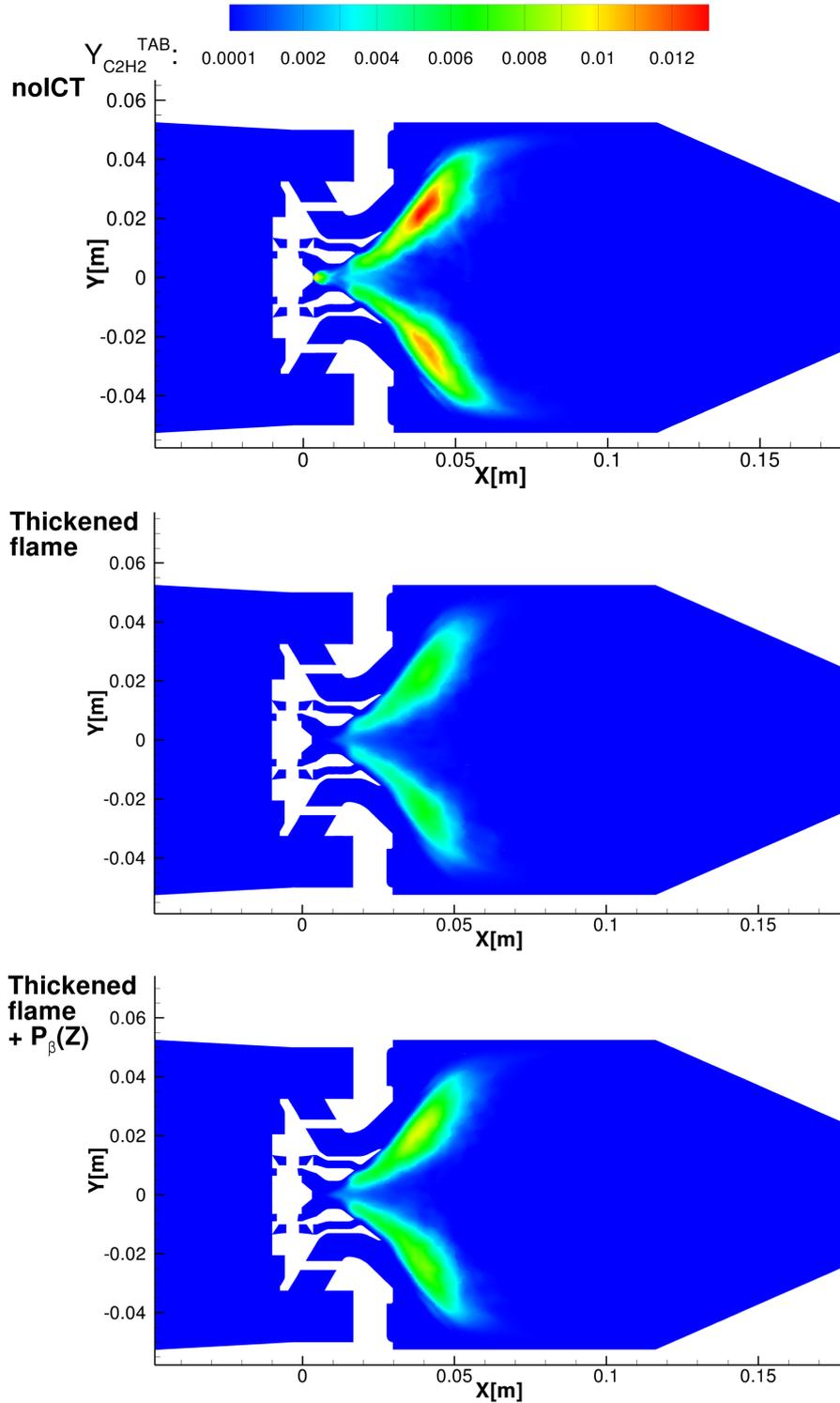


FIGURE H.12 – Champs moyen de la fraction massique de  $C_2H_2$  extraite de la table FTC. Les résultats ont été obtenus avec différentes modélisation de l'interaction chimie-turbulence, en prenant  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{\mathcal{M}_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{\mathcal{M}_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{\mathcal{M}_{NO}}$  et  $\kappa = 10$ .

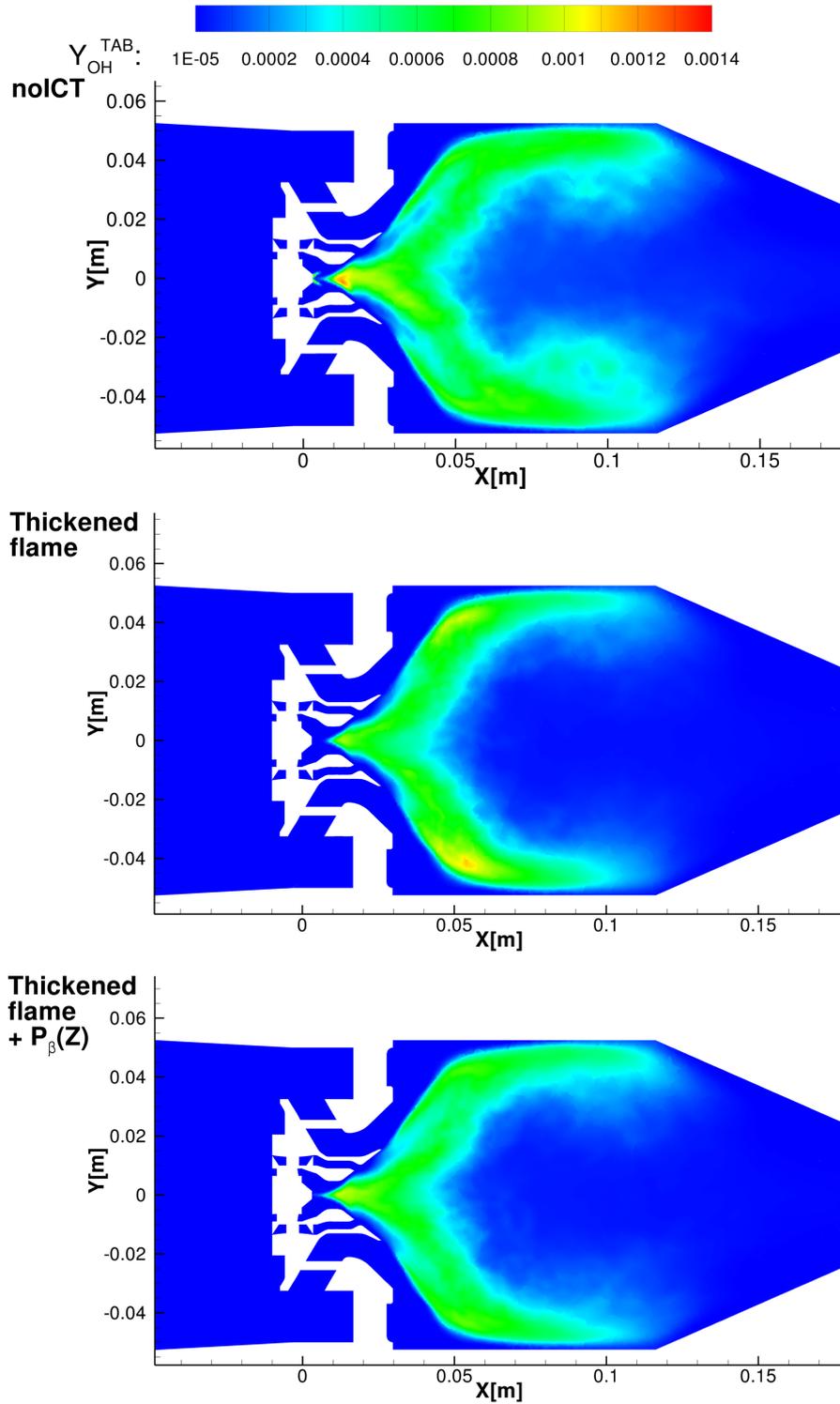


FIGURE H.13 – Champs moyens de la fraction massique de OH extraite de la table FTC. Les résultats ont été obtenus avec différentes modélisation de l'interaction chimie-turbulence, en prenant  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{\mathcal{M}_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{\mathcal{M}_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{\mathcal{M}_{NO}}$  et  $\kappa = 10$ .

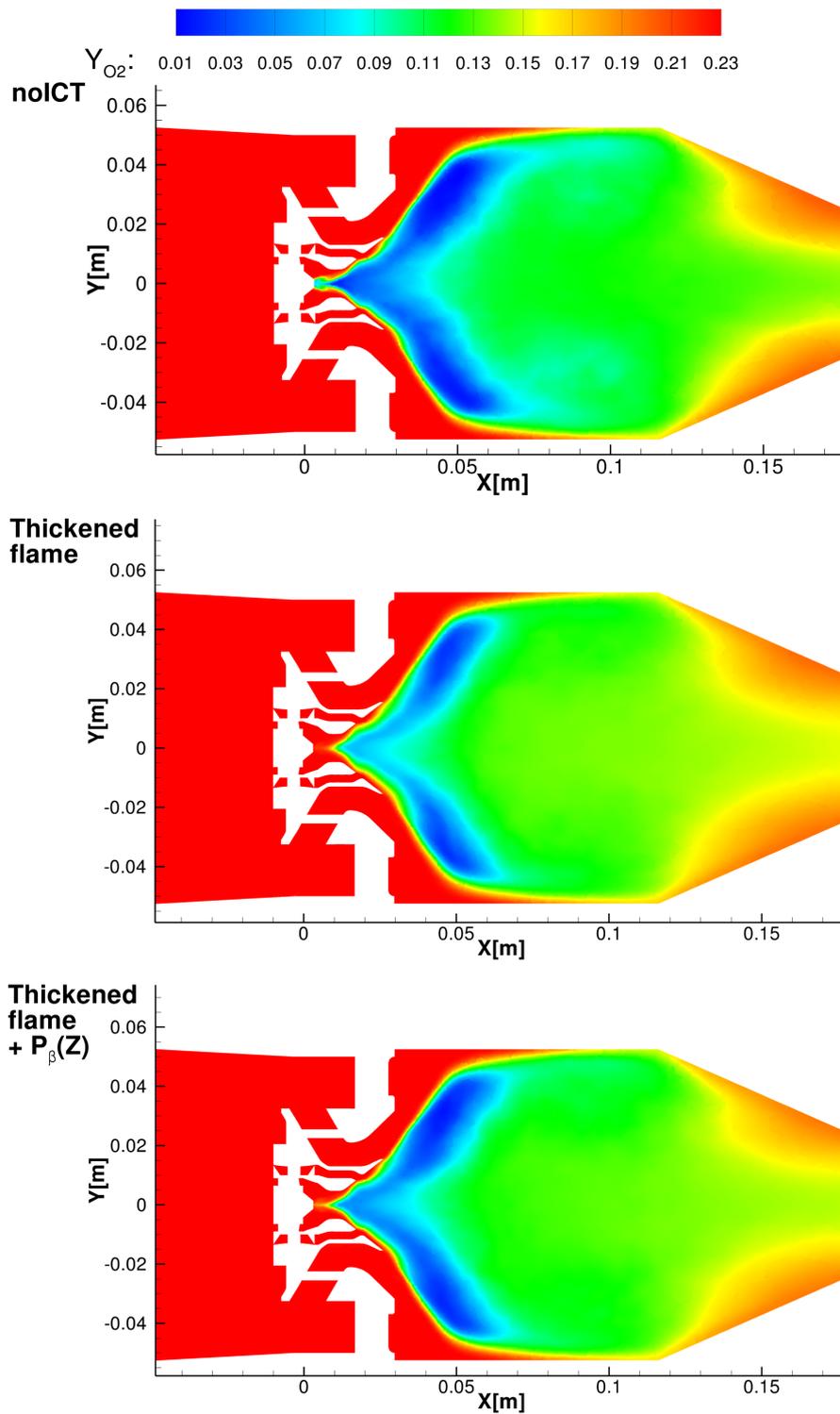


FIGURE H.14 – Champs moyens de la fraction massique transportée de  $O_2$ . Les résultats ont été obtenus avec différentes modélisation de l'interaction chimie-turbulence, en prenant  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{M_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}$  et  $\kappa = 10$ .

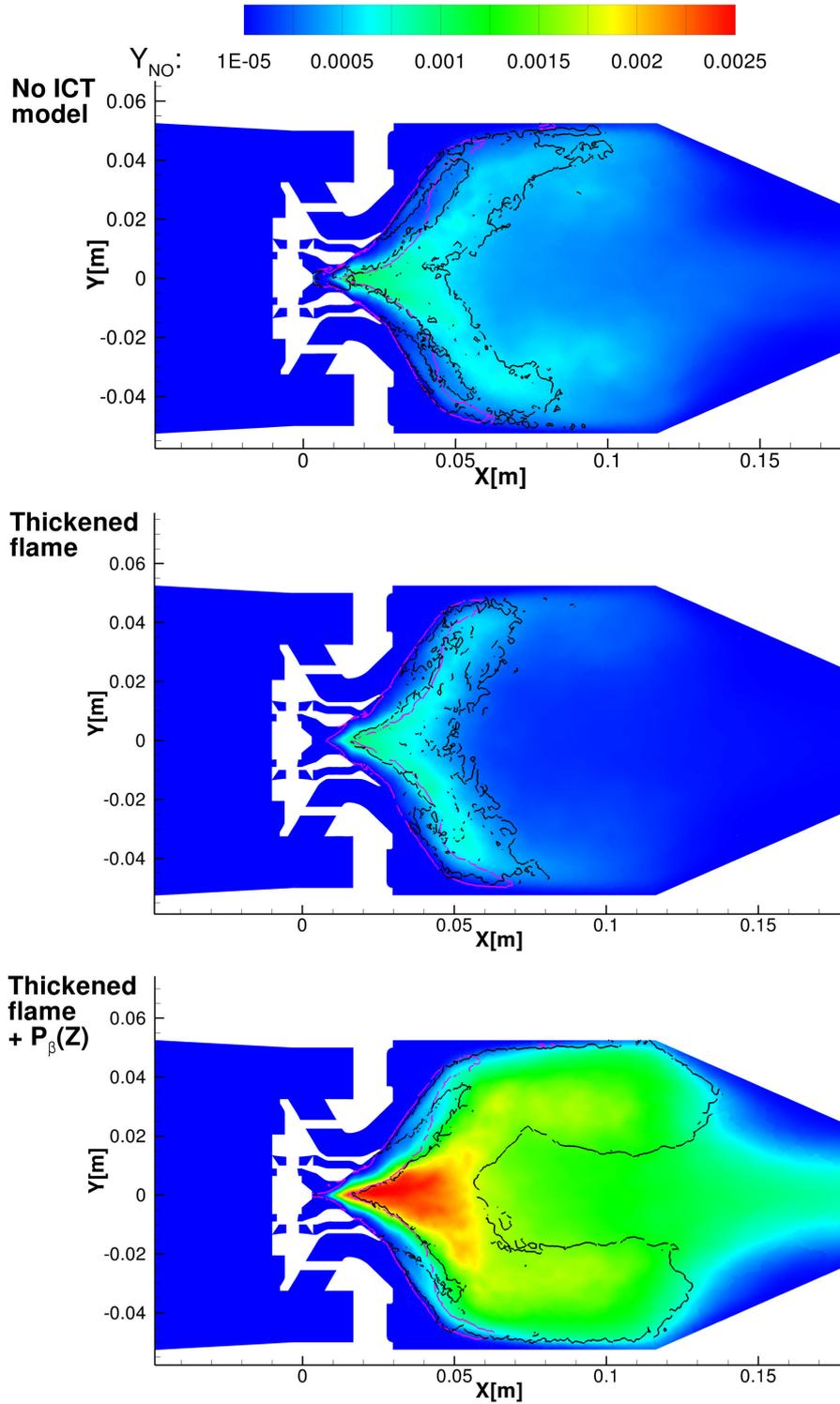


FIGURE H.15 – Champs moyens de la fraction massique transportée de NO. Les résultats ont été obtenus avec différentes modélisation de l'interaction chimie-turbulence, en prenant  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{\mathcal{M}_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{\mathcal{M}_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{\mathcal{M}_{NO}}$  et  $\kappa = 10$ .

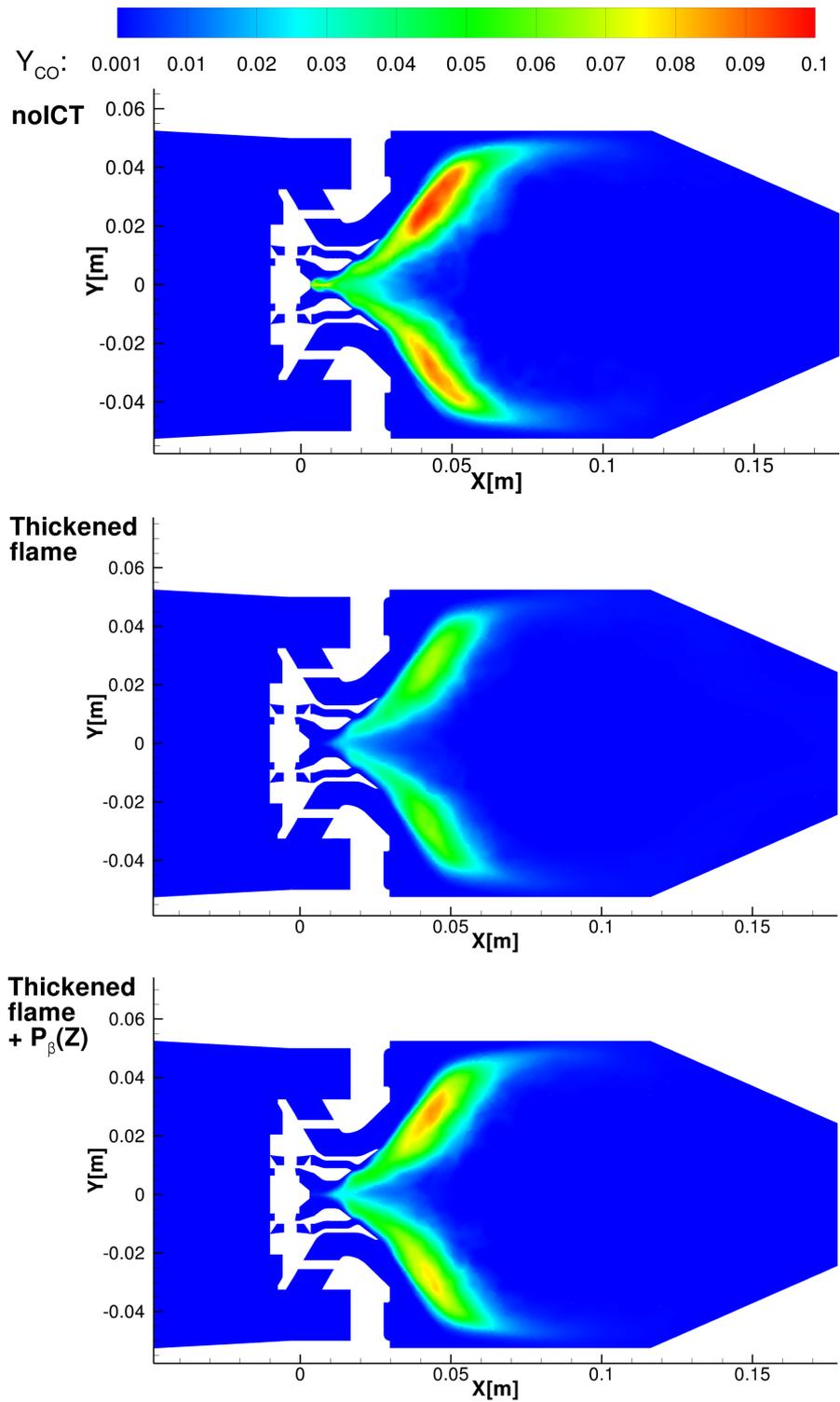


FIGURE H.16 – Champs moyens de la fraction massique transportée de CO. Les résultats ont été obtenus avec différentes modélisation de l'interaction chimie-turbulence, en prenant  $\hat{c} = \frac{Y_{CO_2}}{\mathcal{M}_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{\mathcal{M}_{CO}} + \kappa \frac{Y_{NO}}{\mathcal{M}_{NO}}$  et  $\kappa = 10$ .



- [1] P. AUZILLON, B. FIORINA, R. VICQUELIN, N. DARABIHA, O. GICQUEL et D. VEYNANTE. « Modeling chemical flame structure and combustion dynamics in LES ». Dans : *Proceedings of the Combustion Institute* 33:1 (2011), p. 1331–1338. DOI : 10.1016/j.proci.2010.05.045.
- [2] P. AUZILLON. « Modélisation de la structure et de la dynamique des flammes pour la simulation aux grandes échelles. » Thèse de doct. Ecole Centrale Paris, 2011.
- [3] P. AUZILLON, O. GICQUEL, N. DARABIHA, D. VEYNANTE et B. FIORINA. « A Filtered Tabulated Chemistry model for LES of stratified flames ». Dans : *Combustion and Flame* 159:8 (2012), p. 2704–2717. DOI : 10.1016/j.combustflame.2012.03.006.
- [4] Y. BABA et R. KUROSE. « Analysis and flamelet modelling for spray combustion ». Dans : *Journal of Fluid Mechanics* 612 (2008), p. 45–79. DOI : 10.1017/S0022112008002620.
- [5] N. BERTIER. *Simulation des grandes échelles en aérothermique sur des maillages non-structurés généraux*. Paris 6, 2006.
- [6] M. BOILEAU, G. STAFFELBACH, B. CUENOT, T. POINSOT et C. BÉRAT. « LES of an ignition sequence in a gas turbine engine ». Dans : *Combustion and Flame* 154:1–2 (2008), p. 2–22. DOI : 10.1016/j.combustflame.2008.02.006.
- [7] R. BORGHI, M. DESTRIAU et G. D. SOETE. *Combustion and Flames*. en. Editions OPHRYS, 1998.
- [8] R. BORGHI et E. POURBAIX. « Lagrangian Models for Turbulent Combustion ». en. Dans : *Turbulent Shear Flows 4*. Sous la dir. de L. J. S. BRADBURY, F. DURST, B. E. LAUNDER, F. W. SCHMIDT et J. H. WHITELAW. Springer Berlin Heidelberg, 1985, p. 369–380.
- [9] BOUDIER, G. BOUDIER, LAMARQUE, N. LAMARQUE, STAFFELBACH, G. STAFFELBACH, GICQUEL, L.Y.M. GICQUEL, POINSOT et T. POINSOT. « Thermo-acoustic stability of a helicopter gas turbine combustor using Large Eddy Simulation ». Dans : *International Journal of Aeroacoustics* 8:1 (2009), p. 69–93. DOI : 10.1260/147547209786234975.
- [10] G. BOUDIER, L. Y. M. GICQUEL, T. POINSOT, D. BISSIÈRES et C. BÉRAT. « Comparison of LES, RANS and experiments in an aeronautical gas turbine combustion chamber ». Dans : *Proceedings of the Combustion Institute* 31:2 (2007), p. 3075–3082. DOI : 10.1016/j.proci.2006.07.067.
- [11] G. BOUDIER, L. Y. M. GICQUEL et T. J. POINSOT. « Effects of mesh resolution on large eddy simulation of reacting flows in complex geometry combustors ». Dans : *Combustion and Flame* 155:1–2 (2008), p. 196–214. DOI : 10.1016/j.combustflame.2008.04.013.
- [12] A. BRUYAT, C. LAURENT, O. ROUZAUD et G. LAVERGNE. « Simulation of laminar flame propagation in a multicomponent droplet stream ». Dans : *12th International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*. Heidelberg, 2013.
- [13] M. CHAPUIS, C. FUREBY, E. FEDINA, N. ALIN et J. TEGNÉR. « Les modeling of combustion applications using OpenFOAM ». Dans : *ECCOMAS CFD*. Lisbon, Portugal, 2010.

- [14] F. CHARLETTE, C. MENEVEAU et D. VEYNANTE. « A power-law flame wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion Part II : dynamic formulation ». Dans : *Combustion and Flame* 131:1–2 (2002), p. 181–197. DOI : 10.1016/S0010-2180(02)00401-7.
- [15] F. CHARLETTE, C. MENEVEAU et D. VEYNANTE. « A power-law flame wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion Part I : non-dynamic formulation and initial tests ». Dans : *Combustion and Flame* 131:1–2 (2002), p. 159–180. DOI : 10.1016/S0010-2180(02)00400-5.
- [16] M. CHRIGUI, J. GOUNDER, A. SADIKI, A. R. MASRI et J. JANICKA. « Partially premixed reacting acetone spray using LES and FGM tabulated chemistry ». Dans : *Combustion and Flame* 159:8 (2012), p. 2718–2741. DOI : 10.1016/j.combustflame.2012.03.009.
- [17] O. COLIN, F. DUCROS, D. VEYNANTE et T. POINSOT. « A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion ». Dans : *Physics of Fluids* 12:7 (2000), p. 1843–1863. DOI : doi:10.1063/1.870436.
- [18] O. COLIN, C. PERA et S. JAY. « Detailed chemistry tabulation based on a FPI approach adapted and applied to 3-D internal combustion engine calculations ». Dans : *Proceedings of European Combustion Meeting*. 2007.
- [19] B. COURBET, C. BENOIT, V. COUAILLIER, F. HAIDER, M. LE PAPE et S. PÉRON. « Space discretization methods ». Dans : *AerospaceLab Journal* 2 (2011). [URL] <http://www.aerospacelab-journal.org/>.
- [20] P. DOMINGO, L. VERVISCH et K. BRAY. « Partially premixed flamelets in LES of nonpremixed turbulent combustion ». en. Dans : *Combustion Theory and Modelling* 6:4 (2002), p. 529–551. DOI : 10.1088/1364-7830/6/4/301.
- [21] P. DOMINGO, L. VERVISCH et J. RÉVEILLON. « DNS analysis of partially premixed combustion in spray and gaseous turbulent flame-bases stabilized in hot air ». Dans : *Combustion and Flame* 140:3 (2005), p. 172–195. DOI : 10.1016/j.combustflame.2004.11.006.
- [22] P. DOMINGO, L. VERVISCH et D. VEYNANTE. « Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow ». Dans : *Combustion and Flame* 152:3 (2008), p. 415–432. DOI : 10.1016/j.combustflame.2007.09.002.
- [23] L.-H. DOREY. « Modélisation des phénomènes couples combustion-formation des suies-transferts radiatifs dans les chambres de combustion de turbine à gaz ». Thèse de doct. Châtenay-Malabry, France : Ecole Centrale Paris, 2012.
- [24] L.-H. DOREY, N. BERTIER, L. TESSÉ et F. DUPOIRIEUX. « Soot and radiation modeling in laminar ethylene flames with tabulated detailed chemistry ». Dans : *Comptes Rendus Mécanique* 339:12 (2011), p. 756–769. DOI : 10.1016/j.crme.2011.09.004.
- [25] L.-H. DOREY et D. BUROT. *Modélisation de la formation des suies et des transferts radiatifs dans les flammes de diffusion académiques*. Rapport Technique RT 4/18922. Onera DEFA, 2014.
- [26] C. EBERLE, P. M. GERLINGER, K. P. GEIGLE et M. AIGNER. « Soot Predictions in an Aero-Engine Model Combustor at Elevated Pressure Using URANS and Finite-Rate Chemistry ». Dans : *50th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*. American Institute of Aeronautics et Astronautics, 2014.
- [27] B. FIORINA, O. GICQUEL, L. VERVISCH, S. CARPENTIER et N. DARABIHA. « Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using FPI flamelet tabulation ». Dans : *Combustion and Flame* 140:3 (2005), p. 147–160. DOI : 10.1016/j.combustflame.2004.11.002.
- [28] B. FIORINA, O. GICQUEL, L. VERVISCH, S. CARPENTIER et N. DARABIHA. « Premixed turbulent combustion modeling using tabulated detailed chemistry and PDF ». Dans : *Proceedings of the Combustion Institute* 30:1 (2005), p. 867–874. DOI : 10.1016/j.proci.2004.08.062.
- [29] B. FIORINA, R. VICQUELIN, P. AUZILLON, N. DARABIHA, O. GICQUEL et D. VEYNANTE. « A filtered tabulated chemistry model for LES of premixed combustion ». Dans : *Combustion and Flame* 157:3 (2010), p. 465–475. DOI : 10.1016/j.combustflame.2009.09.015.

- [30] B. FRANZELLI, B. FIORINA et N. DARABIHA. « A tabulated chemistry method for spray combustion ». Dans : *Proceedings of the Combustion Institute* 34:1 (2013), p. 1659–1666. DOI : 10.1016/j.proci.2012.06.013.
- [31] B. FRANZELLI, E. RIBER, M. SANJOSÉ et T. POINSOT. « A two-step chemical scheme for kerosene-air premixed flames ». Dans : *Combustion and Flame* 157:7 (2010), p. 1364–1373. DOI : 10.1016/j.combustflame.2010.03.014.
- [32] J. GALPIN. « Modélisation LES de la combustion avec une prise en compte des effets de cinétique détaillée et en perspective d'application moteur ». Thèse de doct. Saint-Etienne du Rouvray, France : INSA de Rouen, 2007.
- [33] K. P. GEIGLE et C. GUIN. *TLC deliverable report D2.3.1.1b - first campaign report (particulates, LII)*. Rapport Technique D2.3.1.1b. 2008.
- [34] O. GICQUEL, N. DARABIHA et D. THÉVENIN. « Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion ». Dans : *Proceedings of the Combustion Institute* 28:2 (2000), p. 1901–1908. DOI : 10.1016/S0082-0784(00)80594-9.
- [35] V. GIOVANGIGLI et M. D. SMOOKE. « Adaptive continuation algorithms with application to combustion problems ». Dans : *Applied Numerical Mathematics* 5:4 (1989), p. 305–331. DOI : 10.1016/0168-9274(89)90013-5.
- [36] G. GODEL, P. DOMINGO et L. VERVISCH. « Tabulation of NO<sub>x</sub> chemistry for Large-Eddy Simulation of non-premixed turbulent flames ». Dans : *Proceedings of the Combustion Institute* 32:1 (2009), p. 1555–1561. DOI : 10.1016/j.proci.2008.06.129.
- [37] D. GOODWIN, N. MALAY, H. MOFFAT et R. SPETH. *Cantera : an object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. v2.1a*. 2013.
- [38] F. GRISCH et M. ORAIN. *TLC deliverable report D2.3.1.2 - third ONERA campaign report*. Rapport Technique. 2010.
- [39] G. HANNEBIQUE, P. SIERRA, E. RIBER et B. CUENOT. « Large Eddy Simulation of Reactive Two-Phase Flow in an Aeronautical Multipoint Burner ». en. Dans : *Flow, Turbulence and Combustion* 90:2 (2013), p. 449–469. DOI : 10.1007/s10494-012-9416-x.
- [40] D. HAWORTH. « Progress in probability density function methods for turbulent reacting flows ». Dans : *Progress in Energy and Combustion Science* 36:2 (2010), p. 168–259. DOI : 10.1016/j.pecs.2009.09.003.
- [41] I. HERNANDEZ VERA. « Soot modelling in flames and Large-Eddy Simulation of thermoacoustic instabilities ». phd. 2011.
- [42] C. HOLLMANN et E. GUTHEIL. « Modeling of turbulent spray diffusion flames including detailed chemistry ». Dans : *Symposium (International) on Combustion* 26:1 (1996), p. 1731–1738. DOI : 10.1016/S0082-0784(96)80398-5.
- [43] M. IHME, C. M. CHA et H. PITSCH. « Prediction of local extinction and re-ignition effects in non-premixed turbulent combustion using a flamelet/progress variable approach ». Dans : *Proceedings of the Combustion Institute* 30:1 (2005), p. 793–800. DOI : 10.1016/j.proci.2004.08.260.
- [44] M. IHME et H. PITSCH. « Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent non-premixed flames using a flamelet/progress variable formulation ». Dans : *Physics of Fluids* 20:5 (2008), DOI : doi:10.1063/1.2911047.
- [45] S. JAMES, J. ZHU et M. S. ANAND. « Large-Eddy Simulations as a Design Tool for Gas Turbine Combustion Systems ». Dans : *AIAA Journal* 44:4 (2006), p. 674–686. DOI : 10.2514/1.15390.
- [46] P. K. JHA et C. P. GROTH. « Tabulated chemistry approaches for laminar flames : Evaluation of flame-prolongation of ILDM and flamelet methods ». Dans : *Combustion Theory and Modelling* 16:1 (2012), p. 31–57. DOI : 10.1080/13647830.2011.608856.

- [47] I. M. KENNEDY, C. YAM, D. C. RAPP et R. J. SANTORO. « Modeling and measurements of soot and species in a laminar diffusion flame ». Dans : *Combustion and Flame* 107:4 (1996), p. 368–382. DOI : 10.1016/S0010-2180(96)00092-2.
- [48] A. KETELHEUN, C. OLBRICHT, F. HAHN et J. JANICKA. « NO prediction in turbulent flames using LES/FGM with additional transport equations ». Dans : *Proceedings of the Combustion Institute* 33:2 (2011), p. 2975–2982. DOI : 10.1016/j.proci.2010.07.021.
- [49] E. KNUDSEN et H. PITSCH. « A general flamelet transformation useful for distinguishing between premixed and non-premixed modes of combustion ». Dans : *Combustion and Flame* 156:3 (2009), p. 678–696. DOI : 10.1016/j.combustflame.2008.10.021.
- [50] E. KNUDSEN et H. PITSCH. « Capabilities and limitations of multi-regime flamelet combustion models ». Dans : *Combustion and Flame* 159:1 (2012), p. 242–264. DOI : 10.1016/j.combustflame.2011.05.025.
- [51] J. KUEHNE, A. KETELHEUN et J. JANICKA. « Analysis of sub-grid PDF of a progress variable approach using a hybrid LES/TPDF method ». Dans : *Proceedings of the Combustion Institute* 33:1 (2011), p. 1411–1418. DOI : 10.1016/j.proci.2010.08.001.
- [52] G. KUENNE, A. KETELHEUN et J. JANICKA. « LES modeling of premixed combustion using a thickened flame approach coupled with FGM tabulated chemistry ». Dans : *Combustion and Flame* 158:9 (2011), p. 1750–1767. DOI : 10.1016/j.combustflame.2011.01.005.
- [53] G. LECOCQ, D. POITOU, I. HERNÁNDEZ, F. DUCHAINE, E. RIBER et B. CUENOT. « A Methodology for Soot Prediction Including Thermal Radiation in Complex Industrial Burners ». en. Dans : *Flow, Turbulence and Combustion* 92:4 (2014), p. 947–970. DOI : 10.1007/s10494-014-9536-6.
- [54] R. LECOURT. *TLC deliverable report D2.2.1c - injection system characterisation at 30 bar*. Rapport Technique. 2007.
- [55] R. LECOURT et F. BISMES. *TLC deliverable report D2.2.1b - injection system characterisation at 0.5 and 5 bar*. Rapport Technique. 2007.
- [56] R. LECOURT, F. D’HERBIGNY et F. BISMES. *TLC - injection system characterisation at 1 bar on test benches CAPITOL and TOULOUSE*. Deliverable report D2.2.1a. 2007.
- [57] J.-P. LÉGIER, T. POINSOT et D. VEYNANTE. « Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion ». Dans : *Proc. of the summer program*. 2000, p. 157–168.
- [58] K. LEUNG, R. LINDSTEDT et W. JONES. « A simplified reaction mechanism for soot formation in nonpremixed flames ». Dans : *Combustion and Flame* 87:3–4 (1991), p. 289–305. DOI : 10.1016/0010-2180(91)90114-Q.
- [59] F. LIU, H. GUO, G. J. SMALLWOOD et Ö. L. GÜLDER. « Effects of gas and soot radiation on soot formation in a coflow laminar ethylene diffusion flame ». Dans : *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. Third International Symposium on Radiative Transfer 73:2–5 (2002), p. 409–421. DOI : 10.1016/S0022-4073(01)00205-9.
- [60] J. LUCHE. « Obtention de modèles cinétiques réduits de combustion - Application à un mécanisme du kérosène ». Thèse de doct. Université d’Orléans, 2003.
- [61] K. MAHESH, G. CONSTANTINESCU, S. APTE, G. IACCARINO, F. HAM et P. MOIN. « Large-Eddy Simulation of Reacting Turbulent Flows in Complex Geometries ». Dans : *Journal of Applied Mechanics* 73:3 (2005), p. 374–381. DOI : 10.1115/1.2179098.
- [62] S. MENON et N. PATEL. « Subgrid Modeling for Simulation of Spray Combustion in Large-Scale Combustors ». Dans : *AIAA Journal* 44:4 (2006), p. 709–723. DOI : 10.2514/1.14875.
- [63] J.-B. MICHEL, O. COLIN, C. ANGELBERGER et D. VEYNANTE. « Using the tabulated diffusion flamelet model ADF-PCM to simulate a lifted methane–air jet flame ». Dans : *Combustion and Flame* 156:7 (2009), p. 1318–1331. DOI : 10.1016/j.combustflame.2008.12.012.

- [64] J. A. MILLER et C. T. BOWMAN. « Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion ». Dans : *Progress in Energy and Combustion Science* 15:4 (1989), p. 287–338. DOI : 10.1016/0360-1285(89)90017-8.
- [65] P. MOIN et S. V. APTE. « Large-Eddy Simulation of Realistic Gas Turbine Combustors ». Dans : *AIAA Journal* 44:4 (2006), p. 698–708. DOI : 10.2514/1.14606.
- [66] A. MURRONE et P. VILLEDIEU. « Numerical modeling of dispersed two-phase flows ». Dans : *AerospaceLab Journal* 2 (2011). [URL] <http://www.aerospacelab-journal.org/>.
- [67] E. B. NAUMAN. « Residence Time Distributions ». en. Dans : *Handbook of Industrial Mixing*. Sous la dir. d'E. L. PAUL, V. A. ATIEMO-OBENG et S. M. KRESTA. John Wiley & Sons, Inc., 2003, p. 1–17.
- [68] P.-D. NGUYEN, L. VERVISCH, V. SUBRAMANIAN et P. DOMINGO. « Multidimensional flamelet-generated manifolds for partially premixed combustion ». Dans : *Combustion and Flame* 157:1 (2010), p. 43–61. DOI : 10.1016/j.combustflame.2009.07.008.
- [69] F. NICOUD et F. DUCROS. « Subgrid-Scale Stress Modelling Based on the Square of the Velocity Gradient Tensor ». en. Dans : *Flow, Turbulence and Combustion* 62:3 (1999), p. 183–200. DOI : 10.1023/A:1009995426001.
- [70] J. van OIJEN, F. LAMMERS et L. de GOEY. « Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds ». Dans : *Combustion and Flame* 127:3 (2001), p. 2124–2134. DOI : 10.1016/S0010-2180(01)00316-9.
- [71] ONERA. « CFD Platforms and Coupling ». Dans : *AerospaceLab Journal* 2 (2011). [URL] [www.aerospacelab-journal.org](http://www.aerospacelab-journal.org).
- [72] ONERA. *Manuel théorique de la chaîne Cedre - 5.1.1*. Document utilisateur. 2014.
- [73] M. ORAIN et F. GRISCH. *TLC deliverable report D2.3.1.1c - second campaign report (Kerosene)*. Rap. tech. 2008.
- [74] M. ORAIN, F. GRISCH, E. JOURDANNEAU, B. ROSSOW, C. GUIN et B. TRÉTOUT. « Simultaneous measurements of equivalence ratio and flame structure in multipoint injectors using PLIF ». Dans : *Comptes Rendus Mécanique. Combustion for aerospace propulsion* 337:6–7 (2009), p. 373–384. DOI : 10.1016/j.crme.2009.06.019.
- [75] M. ORAIN, E. JOURDANNEAU et F. GRISCH. *TLC deliverable report D2.3.1.1a - first campaign report (OH)*. Rapport Technique. 2008.
- [76] P. PANTANGI, A. SADIKI, J. JANICKA, M. HAGE, A. DREIZLER, J. A. van OIJEN, C. HASSA, J. HEINZE et U. MEIER. « LES of Pre-Vaporized Kerosene Combustion at High Pressures in a Single Sector Combustor Taking Advantage of the Flamelet Generated Manifolds Method ». Dans : (2011), p. 755–764. DOI : 10.1115/GT2011-45819.
- [77] F. PECQUERY. « Développement d'un modèle numérique de prédiction des émissions d'oxydes d'azote pour la simulation aux grandes échelles de chambres de combustion aéronautiques ». Thèse de doct. INSA de Rouen, 2013.
- [78] C. PERA, J. RÉVEILLON, L. VERVISCH et P. DOMINGO. « Modeling subgrid scale mixture fraction variance in LES of evaporating spray ». Dans : *Combustion and Flame* 146:4 (2006), p. 635–648. DOI : 10.1016/j.combustflame.2006.07.003.
- [79] N. PETERS. « Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion ». Dans : *Progress in Energy and Combustion Science* 10:3 (1984), p. 319–339. DOI : 10.1016/0360-1285(84)90114-X.
- [80] N. PETERS. *Turbulent Combustion*. en. Cambridge University Press, 2000.
- [81] N. PETROVA. « Modélisation de la combustion turbulente dans les foyers aéronautiques. » A paraître. Thèse de doct. Ecole Polytechnique.
- [82] C. D. PIERCE et P. MOIN. « Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion ». Dans : *Journal of Fluid Mechanics* 504 (2004), p. 73–97. DOI : 10.1017/S0022112004008213.

- [83] H. PITSCH. *FlameMaster : A C++ Computer Program for 0D Combustion and 1D Laminar Flame Calculations. v3.3.10.* 2008.
- [84] H. PITSCH et N. PETERS. « A Consistent Flamelet Formulation for Non-Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects ». Dans : *Combustion and Flame* 114:1–2 (1998), p. 26–40. DOI : 10.1016/S0010-2180(97)00278-2.
- [85] T. POINSOT et D. VEYNANTE. *Theoretical And Numerical Combustion.* en. R.T. Edwards, Inc., 2005.
- [86] S. B. POPE. « PDF methods for turbulent reactive flows ». Dans : *Progress in Energy and Combustion Science* 11:2 (1985), p. 119–192. DOI : 10.1016/0360-1285(85)90002-4.
- [87] G. RIBERT, L. VERVISCH, P. DOMINGO et Y.-S. NIU. « Hybrid Transported-Tabulated Strategy to Downsize Detailed Chemistry for Numerical Simulation of Premixed Flames ». en. Dans : *Flow, Turbulence and Combustion* 92:1-2 (2014), p. 175–200. DOI : 10.1007/s10494-013-9520-6.
- [88] F. L. SACOMANO FILHO, M. CHRIGUI, A. SADIKI et J. JANICKA. « Les-Based Numerical Analysis of Droplet Vaporization Process in Lean Partially Premixed Turbulent Spray Flames ». Dans : *Combustion Science and Technology* 186:4-5 (2014), p. 435–452. DOI : 10.1080/00102202.2014.883207.
- [89] M. SANJOSÉ, J. M. SENONER, F. JAEGLE, B. CUENOT, S. MOREAU et T. POINSOT. « Fuel injection model for Euler–Euler and Euler–Lagrange large-eddy simulations of an evaporating spray inside an aeronautical combustor ». Dans : *International Journal of Multiphase Flow* 37:5 (2011), p. 514–529. DOI : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2011.01.008.
- [90] R. SANTORO, H. SEMERJIAN et R. DOBBINS. « Soot particle measurements in diffusion flames ». Dans : *Combustion and Flame* 51 (1983), p. 203–218. DOI : 10.1016/0010-2180(83)90099-8.
- [91] R. J. SANTORO, T. T. YEH, J. J. HORVATH et H. G. SEMERJIAN. « The Transport and Growth of Soot Particles in Laminar Diffusion Flames ». Dans : *Combustion Science and Technology* 53:2-3 (1987), p. 89–115. DOI : 10.1080/00102208708947022.
- [92] J. SAVRE. « Simulation numérique instationnaire de la combustion turbulente au sein de foyers aéronautiques et prédiction des émissions polluantes ». Thèse de doct. INSA de Rouen, 2010.
- [93] J. SAVRE, N. BERTIER, Y. D’ANGELO et D. GAFFIÉ. « A chemical time scale approach for FPI modeling ». Dans : *Comptes Rendus Mécanique* 336:11–12 (2008), p. 807–812. DOI : 10.1016/j.crme.2008.10.005.
- [94] B. SOMERS. *CHEM1D.* 1994.
- [95] R. SPETH. *Ember - Quasi-1D Unsteady Flame Solver. v1.2.2.* 2014.
- [96] G. STAFFELBACH, L. Y. M. GICQUEL, G. BOUDIER et T. POINSOT. « Large Eddy Simulation of self excited azimuthal modes in annular combustors ». Dans : *Proceedings of the Combustion Institute* 32:2 (2009), p. 2909–2916. DOI : 10.1016/j.proci.2008.05.033.
- [97] L. TESSÉ. *Modélisation des transferts radiatifs dans les flammes turbulentes par une méthode de Monte Carlo.* Châtenay-Malabry, Ecole Centrale de Paris, 2001.
- [98] L. TESSÉ et J.-M. LAMET. « Radiative Transfer Modeling Developed at Onera for Numerical Simulations of Reactive Flows ». Dans : *Onera Aerospacelab Journal* :2 (2011).
- [99] E. F. TORO. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics : A Practical Introduction.* en. Springer Science & Business Media, 2009.
- [100] *Towards Lean Combustion - Transport - Research & Innovation - European Commission.*
- [101] J. A. VAN OIJEN et L. P. H. DE GOEY. « Predicting NO Formation with Flamelet Generated Manifolds ». Dans : *Proceedings of the European Combustion Meeting.* 2009.
- [102] L. VERHOEVEN, W. RAMAEKERS, J. van OIJEN et L. de GOEY. « Modeling non-premixed laminar co-flow flames using flamelet-generated manifolds ». Dans : *Combustion and Flame* 159:1 (2012), p. 230–241. DOI : 10.1016/j.combustflame.2011.07.011.

- [103] L. VERVISCH, R. HAUGUEL, P. DOMINGO et M. RULLAUD 2. « Three facets of turbulent combustion modelling : DNS of premixed V-flame, LES of lifted nonpremixed flame and RANS of jet-flame ». Dans : *Journal of Turbulence* (2004), N4. DOI : 10.1088/1468-5248/5/1/004.
- [104] R. VICQUELIN, B. FIORINA, S. PAYET, N. DARABIHA et O. GICQUEL. « Coupling tabulated chemistry with compressible CFD solvers ». Dans : *Proceedings of the Combustion Institute* 33:1 (2011), p. 1481–1488. DOI : 10.1016/j.proci.2010.05.036.
- [105] A. VIÉ, B. FRANZELLI, B. FIORINA, N. DARABIHA et M. IHME. « On the description of the spray flame structure in a mixture fraction space. » Dans : *Annual research briefs*. 2013.
- [106] A. VREMAN, B. ALBRECHT, J. van OIJEN, L. de GOEY et R. BASTIAANS. « Premixed and nonpremixed generated manifolds in large-eddy simulation of Sandia flame D and F ». Dans : *Combustion and Flame* 153:3 (2008), p. 394–416. DOI : 10.1016/j.combustflame.2008.01.009.
- [107] G. WANG, M. BOILEAU et D. VEYNANTE. « Implementation of a dynamic thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion ». Dans : *Combustion and Flame* 158:11 (2011), p. 2199–2213. DOI : 10.1016/j.combustflame.2011.04.008.
- [108] H. WANG et A. LASKIN. *A Comprehensive Reaction Model of Ethylene and Acetylene Combustion*. Rap. tech. 1999.
- [109] H. WATANABE, R. KUROSE, S.-M. HWANG et F. AKAMATSU. « Characteristics of flamelets in spray flames formed in a laminar counterflow ». Dans : *Combustion and Flame* 148:4 (2007), p. 234–248. DOI : 10.1016/j.combustflame.2006.09.006.
- [110] C. K. WESTBROOK et F. L. DRYER. « Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames ». Dans : *Combustion Science and Technology* 27:1-2 (1981), p. 31–43. DOI : 10.1080/00102208108946970.
- [111] P. WOLF, R. BALAKRISHNAN, G. STAFFELBACH, L. Y. M. GICQUEL et T. POINSOT. « Using LES to Study Reacting Flows and Instabilities in Annular Combustion Chambers ». en. Dans : *Flow, Turbulence and Combustion* 88:1-2 (2012), p. 191–206. DOI : 10.1007/s10494-011-9367-7.
- [112] F. XU, P. B. SUNDERLAND et G. M. FAETH. « Soot formation in laminar premixed ethylene/air flames at atmospheric pressure ». Dans : *Combustion and Flame* 108:4 (1997), p. 471–493. DOI : 10.1016/S0010-2180(96)00200-3.
- [113] H. YAMASHITA, M. SHIMADA et T. TAKENO. « A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames ». Dans : *Symposium (International) on Combustion* 26:1 (1996), p. 27–34. DOI : 10.1016/S0082-0784(96)80196-2.
- [114] Y. ZELDOVICH, D. FRANK-KAMENETSKII et P. SADOVNIKOV. *Oxidation of nitrogen in combustion*. translated by M. Shelef. Publishing House of the Acad of Sciences of USSR, 1947.

## **Modélisation de la formation des polluants au sein des foyers aéronautiques par une méthode de chimie tabulée**

La réduction des émissions polluantes des foyers aéronautiques est un enjeu majeur pour les motoristes. Afin de les accompagner dans cette tâche, il est nécessaire de développer des outils de simulation numérique permettant de prédire avec précision les émissions d'espèces chimiques en sortie du foyer. Pour cela, une description détaillée des réactions chimiques est nécessaire. Celle-ci est néanmoins incompatible avec la simulation des foyers industriels, compte tenu des puissances de calcul actuelles. C'est pourquoi il est nécessaire de recourir à des méthodes de réduction de la chimie qui préservent la capacité de prédire la concentration des polluants. La démarche consistant à tabuler la chimie nous a semblé appropriée pour aborder ces problèmes et son développement a fait l'objet de cette thèse. Un premier travail a été effectué afin de sélectionner dans la littérature les modèles permettant de traiter des écoulements réactifs turbulents diphasiques avec une approche de chimie tabulée. Par rapport à l'existant, des améliorations ont été apportées à la génération des tables chimiques, afin de prendre en compte l'effet du temps de résidence des gaz brûlés dans le foyer sur la formation des oxydes d'azote. Le couplage de la méthode avec un modèle de formation des suies a également été réalisé. La chimie tabulée permet d'avoir accès à la concentration des précurseurs de suie et des espèces oxydantes, quantités sur lesquelles s'appuie le modèle de formation des suies. Le modèle de chimie tabulée développé dans le cadre de cette thèse a été appliqué à la simulation d'une configuration représentative des foyers aéronautiques. Les concentrations d'oxydes d'azote, de particules de suie, mais aussi de monoxyde de carbone et d'hydrocarbures imbrûlés prédites par les calculs ont été comparées aux résultats expérimentaux. Un bon accord avec l'expérience est observé concernant la topologie du champ de suie et l'allure des profils de concentration de polluants en sortie. Néanmoins, les niveaux de concentration obtenus par les simulations diffèrent des résultats expérimentaux. Cela est imputable notamment à une erreur de prédiction du champ de température qui n'est pas due à l'approche de chimie-tabulée puisque une erreur similaire a été observée avec un autre modèle de combustion.

**Mot-clés :** COMBUSTION TURBULENTE ; CHIMIE TABULEE ; EMISSIONS POLLUANTES ; FORMATION DES SUIES ; FORMATION DES NOX ;

### **Modelling of pollutant species formation in aeronautical combustors using a tabulated chemistry method**

The reduction of pollutant emissions of aeronautical combustion chambers is a major issue for engine manufacturers. In order to support them in this task, it is necessary to develop numerical simulation tools able to predict accurately chemical species emissions at the chamber outlet. To achieve this, a detailed description of the chemical reactions is necessary. Nevertheless, considering the current computer capabilities, this description is not presently affordable. This is why the use of chemistry reduction methods preserving the capability to predict pollutants species is necessary. The method of tabulated chemistry is a good candidate to tackle these problems and therefore is used as the basis of model developments achieved in the framework of this PhD thesis. A preliminary work has been made to select in the literature tabulated chemistry methods applying to turbulent reactive two-phase flows. The technique to create the chemical tables has been improved in order to take into account the effect of the residence time of the burnt gases on nitrogen oxides formation. The coupling of the method with a soot model has also been achieved. The tabulated chemistry gives access to the concentration of soot precursors and oxidizers, quantities which are required by the model used for the soot prediction. The developed tabulated chemistry model has been applied to the simulation of a configuration representative of aeronautical combustors. The concentration of nitrogen oxides, soot particles, carbon monoxide and unburnt hydrocarbons predicted by the numerical simulations have been compared to experimental results. The topology of the soot volume fraction field and the shape of pollutant concentrations profiles at the outlet agree quite well with the experiments. Nevertheless, concentration levels obtained from the simulations differ from the experimental results. This can be imputed to the error in the prediction of the temperature field that is independent of the combustion model, since a similar error was observed with another combustion model.

**Keywords :** TURBULENT COMBUSTION ; TABULATED CHEMISTRY ; POLLUTANT EMISSIONS ; SOOT FORMATION ; NOX FORMATION ;