



HAL
open science

Étude des processus élémentaires impliqués en combustion à volume constant

Aimad Er-Raiy

► **To cite this version:**

Aimad Er-Raiy. Étude des processus élémentaires impliqués en combustion à volume constant. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2018. Français. NNT : 2018ESMA0019 . tel-02080286

HAL Id: tel-02080286

<https://theses.hal.science/tel-02080286>

Submitted on 26 Mar 2019

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

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

THÈSE

Pour l'obtention du Grade de
DOCTEUR DE L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE
DE MÉCANIQUE ET D'AÉROTECHNIQUE

(Diplôme National—Arrêté du 25 mai 2016)

École Doctorale :
Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Énergétique et Aéronautique

Secteur de Recherche :
Énergétique, Thermique, Combustion

Présentée par :

Aimad ER-RAIY

Etude des processus élémentaires impliqués en combustion à volume constant

Directeur de thèse : **Arnaud Mura**

Co-encadrant : **Zakaria Bouali**

Soutenue le 14 décembre 2018

devant la commission d'examen

Jury

Rapporteurs :

M. Yves D'ANGELO

Professeur — Université de Nice

M. Bruno RENOU

Professeur — INSA de Rouen

Membres du jury :

Mme. Benedetta FRANZELLI

Chargée de recherche — CNRS-EM2C

M. Andrei LIPATNIKOV

Professeur — Chalmers University of Technology

M. Julien RÉVEILLON

Professeur — Université de Rouen

Mme. Léa VOIVENEL

Ingénieur SAFRAN TECH

M. Zakaria BOUALI

Maître de conférences — ISAE-ENSMA

M. Arnaud MURA

Directeur de recherche — CNRS-PPRIME

*À la mémoire de mon éternel mentor Hassan MELLALI
À ma grand-mère Khedjou Ali SATTY*

Remerciements

La réalisation de ce travail a été possible grâce au concours de plusieurs personnes à qui je voudrais témoigner ma gratitude.

Je voudrais tout d'abord adresser toute ma reconnaissance à MM. Yves GERVAIS, Jacques BORÉE et Arnaud MURA de m'avoir accueilli au sein du département Fluides, Thermique, Combustion de l'Institut Pprime. En particulier, je tiens à exprimer mes sincères remerciements à mon directeur de thèse Arnaud MURA, de qui, je voulais initialement acquérir des connaissances sur la combustion turbulente, mais qui m'a finalement transmis, en plus de cela, tout une philosophie, un savoir faire, mais surtout, de l'humilité. Merci Arnaud pour votre disponibilité, votre soutien, ainsi que votre dévouement pour votre mission, souvent difficile, de directeur de thèse.

En évoquant mon directeur de thèse, il m'est impossible de ne pas exprimer ma profonde gratitude envers mon encadrant de thèse Zakaria BOUALI, pour sa patience, sa disponibilité et surtout ses judicieux conseils qui ont contribué à alimenter ma réflexion. Je ne manquerai pas de le remercier également pour les nombreux entretiens qu'il m'a accordés, ainsi de m'avoir transmis son expérience personnelle.

J'adresse mes sincères remerciements à M. Marc BELLENOUE, de m'avoir permis de faire partie de la chaire CAPA, qui a d'ailleurs financé ce travail. Merci Marc pour ton soutien et tes encouragements qui ont été d'une grande aide dans l'élaboration de ce travail.

Je tiens à remercier MM. Bruno RENOU et Yves D'ANGELO pour avoir accepté de rapporter ce travail de thèse et pour leurs remarques constructives et pertinentes qui ont permis d'améliorer la qualité du manuscrit. Je remercie également Mmes Benedetta FRANZELLI et Léa VOIVENEL ainsi que MM. Andrei LIPATNIKOV et Julien RÉVEILLON qui m'ont honoré en acceptant de faire partie de mon jury.

J'adresse mes remerciements également à l'ensemble du personnel de l'ENSMA pour son accueil chaleureux. À cet égard, je tiens à exprimer ma reconnaissance à Jocelyne, Marie-Cannelle, Audrey, Catherine et Céline pour les efforts qu'elles réalisent afin d'offrir les meilleures conditions pour les thésards.

Ma profonde gratitude et remerciements vont à mes collègues du bureau et à mes frères d'armes que je cite sans ordre de préférence : Luis, Xiaodong, Marcos, Nguyen, Romain, Fabio,

Maxime et Stéphane. Je ne manquerai pas l'occasion de mettre en Special Mentions Lahna ; pour les pauses réglementaires et régulières, Ahmed ; le pro de la mécanique, la nutrition et la fitness, Omar ; pour le covoiturage régulier du vendredi et les incontournables soirées du samedi, Song ; la personne la plus joviale que j'ai pu rencontrer pendant mon cursus et Anthony ; dont la présence m'était une condition indispensable pour une vie épanouie. Merci Anthony pour tout cela ainsi que tes précieux conseils surtout l'esthétique des figures (que tu critiqueras certainement, je sais ..., il y a toujours des détails à peaufiner).

Je ne remercierai pas assez l'ensemble de ma famille, mes parents Aïcha et Majid et mes beaux-parents Mustapha et Christine pour leur soutien inconditionnel et permanent pendant de nombreuses années, et surtout au cours de l'élaboration de ce manuscrit.

Avant de finir, je souhaite exprimer ma profonde gratitude, mon respect, et mes chaleureux remerciements à mon frère Radouan qui n'a pas hésité à m'épauler et à me soutenir pour réaliser ce travail, mais aussi, dans ma vie personnelle. Je suis malheureusement dans l'incapacité de prouver les mots convenables pour te remercier à la juste valeur de tes actions. Je te souhaite tout le bonheur, la réussite et la prospérité dans ta vie professionnelle et personnelle.

Enfin, ma réussite en thèse était due surtout au noyau dur de mon entourage. Il s'agit de ma femme Sonia, la pro du Cheer up et la coach de motivation dont j'avais besoin dans les moments de doute. Merci pour ta patience et de m'avoir inlassablement supporté avant et pendant la réalisation de ce travail. Merci également pour le bonheur inestimable que tu m'as généreusement apporté et que tu as couronné en faisant venir au monde cette petite merveille qu'est mon fils Adam.

le 18 Mars 2019
Aimad ER-RAIY

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Contexte industriel	2
1.2	Objectifs de la thèse	4
1.3	Organisation du manuscrit	5
2	Outils de simulation et d'analyse	7
2.1	Introduction et objectifs du chapitre	8
2.2	Propriétés thermo-chimiques d'un mélange gazeux	8
2.2.1	Composition d'un mélange	8
2.2.2	Relations thermodynamiques	9
2.3	Modélisation de la chimie	11
2.3.1	Notion de réaction chimique	11
2.3.2	Classification des réactions chimiques	12
2.3.2.1	Étapes de réaction	12
2.3.2.2	Types de réactions chimique	12
2.3.3	Taux de réaction des espèces	15
2.4	Équations de conservation dans un milieu réactif	15
2.5	Flux moléculaires et propriétés de transport	16
2.5.1	Flux moléculaires	16
2.5.2	Hypothèses simplificatrices	17
2.5.3	Coefficients de transport multi-espèces	18
2.6	Code <i>Asphodele</i>	19
2.6.1	Équations de conservation adimensionnées	20
2.6.2	Approximation à faible nombre de Mach	21
2.6.3	Résolution numérique	22
2.6.3.1	Discrétisation spatiale	22
2.6.3.2	Intégration temporelle	22
2.6.3.3	Intégration raide des termes sources	23
2.7	Résolution de l'équation de Poisson	23
2.7.1	Résolution numérique d'un système linéaire	25
2.7.1.1	Méthodes numériques	25

2.7.1.2	Notion du préconditionnement	25
2.7.2	Méthodologie adoptée	26
2.7.2.1	Performances de l'approche adoptée	27
2.8	Critères de résolution numérique	28
2.8.1	Échelles et diagrammes pour la combustion turbulente	29
2.8.1.1	Structure de flamme laminaire prémélangée	29
2.8.1.2	Échelles caractéristiques de la combustion turbulente	30
2.8.1.3	Régimes de combustion	32
2.8.2	Résolution des échelles de la combustion turbulente	34
2.9	Outils d'analyse de la combustion turbulente stratifiée	37
2.9.1	Approches d'analyse de la combustion turbulente	37
2.9.2	Variables de composition pour la combustion prémélangée hétérogène	38
2.9.2.1	Fraction de mélange	38
2.9.2.2	Variable de progrès	39
2.9.3	Approche géométrique	41
2.9.3.1	Vitesse de déplacement du front de flamme	42
2.9.3.2	Densité de surface de flamme	43
2.9.4	Approche basée sur le mélange turbulent	45
2.10	Récapitulatif	46
3	Revue des analyses de flammes en propagation dans un milieu stratifié	49
3.1	Introduction	50
3.2	Terminologie et structure des flammes stratifiées	52
3.2.1	Flammes hétérogènes, partiellement prémélangées et stratifiées	52
3.2.2	Structure de flamme partiellement prémélangée	52
3.3	Propagation des flammes stratifiées	53
3.3.1	Variations de la vitesse de la flamme locale et de la limite d'inflammabilité	53
3.3.1.1	Extension des limites d'inflammabilité	53
3.3.1.2	Comportement de la vitesse de propagation	55
3.3.2	Impact sur la structure de la flamme et de la topologie	57
3.3.2.1	Épaisseur de flamme	57
3.3.2.2	Surface de flamme	58
3.3.2.3	Courbure du front de flamme	62
3.3.3	Variation du taux de réaction local et global	63
3.4	Conclusion	67
4	Base de données de simulations numériques directes	69
4.1	Caractéristiques d'un mélange de réactifs hétérogène	70
4.2	Configuration typique	73
4.2.1	Initialisation du champ de vitesse fluctuant	73
4.2.2	Initialisation du champ scalaire	74
4.2.3	Établissement du noyau de flamme	76
4.3	Base de données DNS	78
4.3.1	Conditions opératoires	78
4.3.2	Caractéristiques de la distribution des gaz frais	79
4.3.2.1	Moyenne et domaine de variation	79
4.3.2.2	Taux de ségrégation	79

4.3.2.3	Échelle caractéristique	80
4.3.3	Caractéristiques de la turbulence	80
4.3.4	Récapitulatif des configurations	81
4.3.5	Convergence statistique des calculs	82
4.4	Récapitulatif	85
5	Propagation d'un noyau de flamme dans un milieu laminaire stratifié	87
5.1	Introduction	88
5.2	Caractérisation des propriétés fondamentales de la flamme	88
5.3	Propriétés de la variable de progrès	91
5.3.1	Choix de la variable de progrès	91
5.3.2	Coefficient de diffusion de la variable de progrès	93
5.3.3	Taux de production de la variable de progrès	94
5.4	Analyses préliminaires	95
5.5	Influence de la nature de l'hétérogénéité	97
5.6	Influence des caractéristiques de la distribution	99
5.6.1	Échelle de longueur caractéristique	99
5.6.2	Taux de ségrégation	104
5.6.3	Influence relative des paramètres de la distribution	110
5.7	Effets des hétérogénéités sur les propriétés locales de la flamme	112
5.8	Conclusion	115
6	Modèle chimique optimisé à une étape (OSS)	117
6.1	Introduction	118
6.2	Revue bibliographique	119
6.3	Modèle optimisé à une étape	122
6.3.1	Estimation de la température des gaz brûlés	122
6.3.2	Estimation de la vitesse de propagation de la flamme laminaire	128
6.3.2.1	Description de l'étape de "remappage"	132
6.3.2.2	Description de l'étape de "rééchelonnement"	134
6.3.3	Restauration de l'épaisseur thermique de la flamme	134
6.4	Analyse préliminaire du modèle OSS résultant	140
6.5	Applications du modèle OSS	143
6.5.1	Développement de noyaux de flamme prémélangés laminaires	145
6.5.2	Développement de noyaux de flamme prémélangés turbulents	146
6.5.3	Développement de noyaux de flamme prémélangés turbulents dans des mélanges hétérogènes	151
6.5.4	DNS tridimensionnelle de développement de noyaux de flamme	152
6.6	Conclusions	154
7	Propagation d'un noyau de flamme dans un milieu turbulent stratifié	155
7.1	Introduction	156
7.2	Influence des caractéristiques de la distribution	156
7.3	Génération de la surface de flamme	159
7.4	Propagation préférentielle	163
7.5	Analyse de la topologie de la flamme	165
7.5.1	Mécanismes opérant sur la surface de flamme	165

7.5.2	Alignement préférentiel du front de flamme	166
7.5.3	Bilan de la densité de surface de flamme	168
7.6	Analyse de la vitesse de déplacement du front de flamme	171
7.6.1	Effet de la diffusion différentielle	171
7.6.2	Analyse du bilan de la vitesse de déplacement	174
7.7	Structure locale de flamme	178
7.8	Analyse du mélange turbulent	180
7.9	Influence de l'intensité de turbulence	183
7.10	Analyse de flammes tridimensionnelles	185
7.11	Étude dynamique et cinématique des orientations scalaire-vitesse	187
7.12	Conclusion	193
8	Conclusions et perspectives	195
	Annexes	200
A	Dérivation de l'équation de transport de la variable de progrès	201
B	Dérivation de l'équation de transport du taux de dissipation scalaire	205
	Bibliographie	207

Liste des symboles

Lettres romaines

$[X]_\alpha$	Concentration molaire de l'espèce α	$[\text{mol.m}^{-3}]$
\mathcal{R}	Constante des gaz parfaits (= 8.314510 J/mol/K)	$[\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}]$
\mathcal{R}_α	Constante massique du gaz parfait composé par l'espèce α	$[\text{J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}]$
$\mathcal{V}_{k,i}$	Vitesse de diffusion de l'espèce k dans la $i^{\text{ème}}$ direction	$[\text{m.s}^{-1}]$
c	Variable de progrès	$[-]$
C_p	Capacité calorifique molaire à pression constante de l'espèce k	$[\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}]$
c_p	Capacité calorifique massique à pression constante	$[\text{J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}]$
$D_{k,j}$	Coefficient de diffusion binaire entre les espèces k et j	$[\text{m}^2.\text{s}^{-1}]$
D_{km}	Coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange	$[\text{m}^2.\text{s}^{-1}]$
H	Enthalpie molaire	$[\text{J.mol}^{-1}]$
h	Enthalpie massique	$[\text{J.Kg}^{-1}]$
h_s	Enthalpie sensible	$[\text{J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}]$
k_τ	Viscosité volumique	$[\text{Kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}]$
L	Taille caractéristique du domaine de calcul	$[\text{m}]$
l_η	Échelle de longueur caractéristique des structures de Kolmogorov	$[\text{m}]$
L_ζ	Échelle de longueur caractéristique du champ scalaire hétérogène ζ	$[\text{m}]$
l_t	Échelle de longueur intégrale turbulente	$[\text{m}]$
m	Masse de fluide	$[\text{Kg}]$
N_{sp}	Nombre des espèces présentes dans le mélange	$[-]$
P	Pression	$[\text{Pa}]$
r_s	Rapport d'équivalence	$[-]$
Re_q	Rayon équivalent du noyau de flamme	$[\text{m}]$
S	Entropie molaire	$[\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}]$
s	Entropie massique	$[\text{J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}]$
S_ζ	Taux de ségrégation du champ scalaire hétérogène ζ	$[-]$
S_L^0	Vitesse de flamme laminaire	$[\text{m.s}^{-1}]$
T	Température	$[\text{K}]$
u_i	Composante suivant la $i^{\text{ème}}$ direction du vecteur vitesse	$[\text{m.s}^{-1}]$
V	Volume de fluide	$[\text{m}^3]$
W	Masse molaire	$[\text{Kg.mol}^{-1}]$
X_α	Fraction molaire de l'espèce α	$[-]$
Y_α	Fraction massique de l'espèce α	$[-]$

Lettres grecques

$\chi_{c,\xi}$	Taux de dissipation croisé des scalaires ζ et c	$[\text{m}^{-2}]$
χ_k	Taux de dissipation du scalaire $k \in (c, \zeta)$	$[\text{m}^{-2}]$

ΔH_f^0	Enthalpie molaire de formation	[J.mol ⁻¹]
ΔS_f^0	Entropie molaire de formation	[J.mol ⁻¹ .K ⁻¹]
$\delta_{i,j}$	Symbole de Kronecker	[-]
δ_L^0	Épaisseur de flamme laminaire	[m]
$\dot{\omega}_k$	Taux de réaction volumique de l'espèce k	[Kg.m ⁻³ .s ⁻¹]
$\dot{\omega}_T$	Taux de dégagement de chaleur volumique	[J.m ⁻³ .s ⁻¹]
γ	Rapport des capacités calorifiques du mélange	[-]
λ	Conductivité thermique	[W.m ⁻¹ .K ⁻¹]
μ	Viscosité dynamique	[Kg.m ⁻¹ .s ⁻¹]
ν	Viscosité cinématique	[m ² .s ⁻¹]
$\nu''_{k,j}$	Coefficient stéréochimique molaire inverse de l'espèce k dans la réaction j	[-]
$\nu'_{k,j}$	Coefficient stéréochimique molaire direct de l'espèce k dans la réaction j	[-]
ν_k	Coefficients molaires stœchiométriques associés à l'espèce k	[-]
Φ	Richesse locale du mélange	[-]
ρ	Masse volumique	[Kg.m ⁻³]
Σ	Densité de surface de flamme	[m ⁻¹]
τ_η	Échelle de temps caractéristique des structures de Kolmogorov	[s ⁻¹]
τ_c	Échelle de temps chimique	[s ⁻¹]
$\tau_{i,j}$	Tenseur de contraintes visqueuses	[Pa]
τ_t	Échelle de temps turbulente	[s ⁻¹]
ξ	Fraction de mélange	[-]
S_d	Vitesse de déplacement	[m.s ⁻¹]

Indices et exposants

$(.)^+$	Grandeur adimensionnée
$(.)^{eq}$	Grandeur à l'équilibre chimique
$(.)_0$	Valeur de référence
$(.)_\infty$	Valeur à l'infinie
$(.)_b$	Caractéristique du mélange des gaz brûlés (burnt)
$(.)_u$	Caractéristique du mélange frais (unburnt)
$(.)_{rms}$	Erreur quadratique moyenne / Écart-type (<i>Root Mean Square</i>)

Nombres adimensionnels

$\langle X Y \rangle$	Moyenne de f conditionnée par g
∇	Opérateur de dérivation nabra
\bar{f}	Moyenne au sens de Reynolds
\tilde{f}	Moyenne au sens de Favre

Opérateurs

\mathcal{M}	Nombre de Mach (vitesse / célérité du son)
Da	Nombre de Damköhler (temps turbulent / temps chimique)
Ka	Nombre de Karlovitz (temps chimique / temps turbulents des échelles de Kolmogorov)
Le	Nombre de Lewis (diffusion thermique / diffusion moléculaire)
Pr	Nombre de Prandtl (viscosité moléculaire / diffusion thermique)
Re	Nombre de Reynolds (inertie / viscosité)
Sc	Nombre de Schmidt (viscosité moléculaire / diffusion moléculaire)

Acronymes

CPU	Unité de centrale de traitement (<i>Central Processing unit</i>)
DNS	Simulation numérique directe (<i>Direct Numerical Simulation</i>)
FSD	Densité de surface de flamme (<i>Flame Surface Density</i>)
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
OSS	<i>Optimized Single Step</i>

PDF	Fonction densité de probabilité (<i>Probability Density Function</i>)
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
SDF	Fonction de densité de surface (<i>Surface Density Function</i>)
SDR	Taux de dissipation scalaire (<i>Scalar Dissipation Rate</i>)
THI	Turbulence Homogène isotrope
TSI	Interaction turbulence scalaire (<i>Turbulence Scalar Interaction</i>)

Introduction

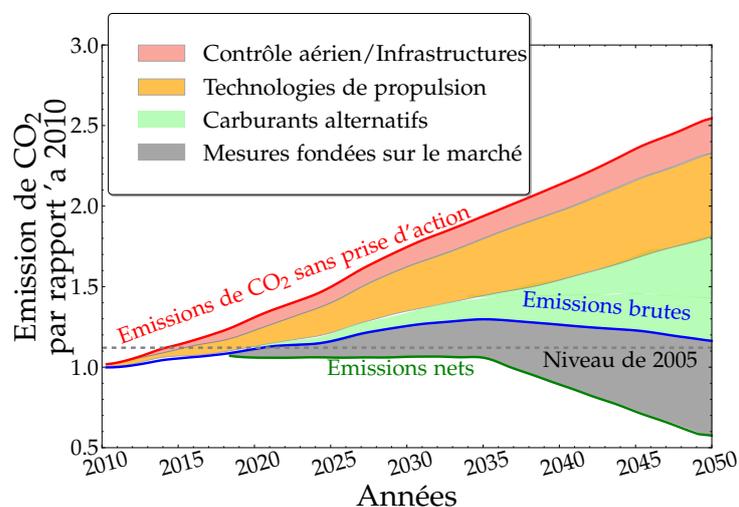
Sommaire

1.1	Contexte industriel	2
1.2	Objectifs de la thèse	4
1.3	Organisation du manuscrit	5

1.1 Contexte industriel

Alors que le secteur de l'aviation représente aujourd'hui quelques millions d'emplois et pèse plusieurs centaines de milliards d'euros pour l'économie mondiale, il contribue cependant aux changements climatiques principalement par les émissions de dioxyde de carbone (CO₂) et d'oxydes d'azote (NOx) lors de la combustion de carburants. Le bruit des avions est également un problème environnemental important, en particulier pour la population proche des zones aéroportuaires et sous les principales voies d'arrivée et de départ. À l'heure actuelle, le secteur de l'aviation est responsable d'environ 12% des émissions des transports et de 2% de toutes les émissions de CO₂ imputables à l'activité humaine, avec le risque d'une augmentation significative des pourcentages à mesure que le transport aérien se développe.

Figure 1.1 – Feuille de route schématique pour la réduction des émissions de CO₂. Adapté du programme Clean Sky de l'ACARE.



Malgré toutes les améliorations apportées à la réduction de l'impact de l'aviation sur l'environnement au cours des 40 dernières années, cet impact continue de croître en raison de la croissance du trafic aérien. Une action ciblée et rapide est alors indispensable pour créer un système de transport aérien plus écologique. Dans ce sens, le programme stratégique de recherche et d'innovation de l'ACARE¹ vise des objectifs ambitieux pour un secteur de l'aviation durable et compétitif d'ici 2050. Ceux-ci comprennent une réduction des émissions de 75% et 90% respectivement pour CO₂ (cf. Figure 1.1) et les NOx, ainsi que la réduction de 65% du bruit perçu d'ici 2050 par rapport aux caractéristiques des aéronefs produits en 2000. L'une des principales difficultés est liée aux systèmes de propulsion actuels qui ont quasiment atteint leur maturité technologique, et ne permettront donc pas de respecter les objectifs annoncés. Ainsi, de nouveaux concepts de propulsion faisant appel à des ruptures technologiques doivent être recherchés dans le but d'améliorer l'efficacité des systèmes et d'atteindre ces objectifs.

L'une des solutions envisageables est de changer le mode de combustion des propulseurs

1. Advisory Council for Aviation Research and innovation in Europe

actuels qui utilisent le cycle thermodynamique de Brayton et basés sur une combustion à pression constante (cf. Figure 1.2), par un mode de combustion à volume constant (CVC) qui caractérise le cycle thermodynamique de Humphrey (cf. Figure 1.2). Ce mode permettra d'atteindre une température de gaz brûlés et une pression de chambre notablement supérieures à celles obtenues pour la même quantité de réactifs. Par conséquent, dans une application pratique, cela peut se traduire par l'augmentation de l'efficacité du système mesurée en terme des économies au niveau de la consommation de carburant et du système de compression. Évidemment, Une conséquence directe de la réduction de la consommation est de diminuer également les émissions en gaz à effet de serre. Pour ces raisons, les chambres CVC font l'objet d'un intérêt croissant de la part de la communauté aéronautique.

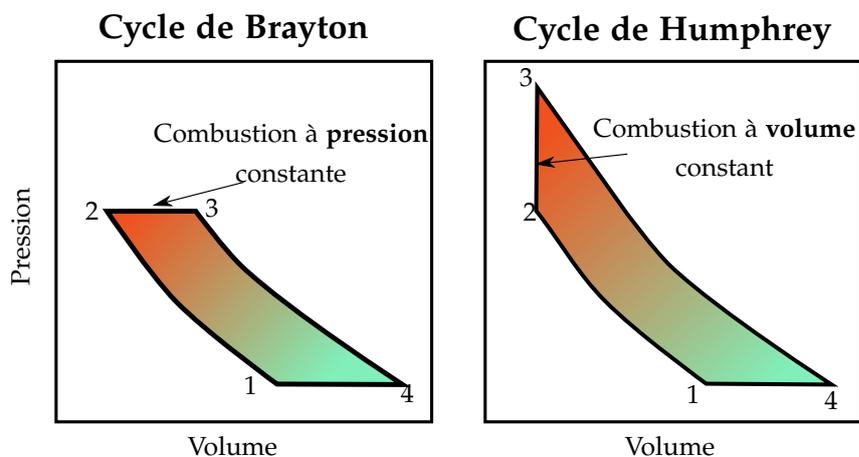


Figure 1.2 – Schématisation des cycles thermodynamiques de Brayton et de Humphrey avec leurs transformations thermodynamiques : 1-2 (compression isentropique), 2-3 (combustion) et 3-4 (détente isentropique).

Différents régimes de combustion peuvent être employés, les deux cas extrêmes sont les régimes des flammes prémélangées et non-prémélangées. La première a son combustible et son oxydant préalablement mélangés avant la combustion, tandis que la seconde fait intervenir un combustible et un oxydant provenant de différents flux. Les deux types de flammes présentées ont chacune leurs avantages et leurs inconvénients. La flamme prémélangée, notamment, se caractérise par des produits de combustion plus "propres" par rapport aux flammes de la seconde catégorie. Néanmoins, ce type de flamme souffre de quelques limitations telles que ses plages de conditions de fonctionnement réduites et le risque de retour de flamme qui peut avoir des conséquences catastrophiques. D'un autre côté, ayant une plage de fonctionnement plus large, une flamme non prémélangée est plus facile à contrôler et ne pose aucun risque de retour de flamme, car le combustible et l'air sont séparés. En revanche, ce mode de combustion est souvent incomplet localement, formant des polluants tels que les suies et les NOx.

Ces deux modes de combustion correspondent à des situations idéales. En réalité, rares sont les situations où la combustion se produit dans un milieu parfaitement homogène. Cela est dû aux phénomènes qui précèdent le processus de la combustion comme par exemple : la dispersion préliminaire du spray et l'évaporation de gouttelettes du combustible ainsi que de la topologie de l'écoulement et/ou la présence éventuelle de gaz résiduels issus du cycle précédent. Ainsi, il existe un mode de combustion intermédiaire entre les deux situations

extrêmes abordées précédemment, dans lequel la flamme interagit avec les réactifs non homogènes : on parle de *combustion prémélangée de réactifs hétérogènes*. La présence de réactifs hétérogènes dans la combustion prémélangée est répandue dans les systèmes de combustion pratiques [1, 2], y compris les turbines à gaz [3], les post-brûleurs et les moteurs à combustion interne à allumage commandé [4]. Dans la littérature, on parle également de prémélange stratifié [5], ou encore de flammes partiellement prémélangées.

Concevoir une chambre de combustion CVC, qui présente des avantages en termes de rendement et de réduction des émissions des gaz à effet de serre, requiert donc une compréhension des phénomènes ayant lieu au sein de cette dernière notamment celles qui concernent la propagation du front réactif dans un milieu hétérogène en composition.

1.2 Objectifs de la thèse

Dans le but d'améliorer la compréhension des mécanismes régissant la propagation du front réactif dans un milieu inhomogène, nombreuses sont les questions que l'on peut se poser : comment réagira une flamme prémélangée homogène lorsqu'elle se propage dans un champ hétérogène ? Puisque les hétérogénéités peuvent concerner la composition du milieu (richesse et température), quel est l'impact de ces hétérogénéités sur les propriétés locales et globales de la flamme ? La chaleur générée par la flamme hétérogène sera-t-elle similaire, supérieure ou plutôt inférieure que celle produite par une flamme homogène ? etc.

Malgré de fortes restrictions (géométries simples, temps de calcul important et une intensité de turbulence relativement modérée), la simulation numérique directe (DNS) reste une approche précieuse pour mener à bien ce type d'études. De plus, avec les moyens de calcul actuels, l'utilisation de mécanismes chimiques représentatifs devient possible particulièrement pour des configurations bidimensionnelles. La précision de la DNS et le fait qu'elle fournit suffisamment des détail de l'écoulement permettent d'étudier les mécanismes de l'interaction flamme turbulence.

Les travaux menés dans cette thèse s'inscrivent dans le cadre de la Chaire CAPA (Combustion Alternative pour la Propulsion Aérobie, dont les principaux collaborateurs sont : L'INSTITUT PPRIME-UPR3346, L'ISAE-ENSMA, L'UNIVERSITÉ DE POITIERS, SAFRAN TECH, MBDA FRANCE et L'ANR. Les objectifs de la thèse sont multiples et consistent à :

1. évaluer et adapter un cadre d'analyse afin d'étudier les effets de réactifs hétérogènes sur des flammes laminaires, en considérant l'influence éventuelle des caractéristiques spatiales et statistiques du champ hétérogène et en mettant en lumière certains mécanismes élémentaires ayant lieu au sein de telles flammes.
2. déterminer si les observations dans des flammes laminaires se manifesteront également dans des flammes turbulentes et évaluer l'influence éventuelle de l'intensité de la turbulence ainsi que la prépondérance de ses effets par rapport à ceux engendrés par les hétérogénéités.

3. Développer une description chimique permettant l'extension des analyses précédentes à des configurations tridimensionnelles à coût numérique modéré.

1.3 Organisation du manuscrit

Ce mémoire de thèse est composé de 8 chapitres et 2 annexes. Il est organisé de la manière suivante :

Le chapitre §2 «Outils de simulation et d'analyse » introduit le cadre théorique et technique des approches numériques de cette étude en présentant, les notions relatives à l'aérothermo-chimie, les relations constitutives des phénomènes de transport et le formalisme général de la simulation numérique des écoulements réactifs à faible nombre de Mach tel qu'il est implémenté dans le code *Asphodele* utilisé. Un accent particulier, sera mis sur les optimisations appliquées sur ce dernier.

Le chapitre suivant, §3 «Revue des analyses de flammes en propagation dans un milieu stratifié », dresse un bref état de l'art des différents travaux expérimentaux et numériques réalisés dans la thématique de la propagation des flammes dans des milieux hétérogènes et présente certains des effets potentiels des stratifications.

Ensuite, le chapitre §4 «Base de données de simulations numériques directes » fournit les détails concernant la configuration retenue pour réaliser notre étude avant de discuter des différents choix des paramètres et conditions considérés. Ce chapitre se termine par une synthèse de la méthodologie de construction de la base de données de calculs DNS.

Le chapitre §5 «Propagation d'un noyau de flamme dans un milieu laminaire stratifié » s'intéresse à l'analyse des effets exclusifs des hétérogénéités sur les propriétés globales et locales de la flamme. En considérant un écoulement laminaire, l'impact des caractéristiques spatiales et statistiques du champ hétérogène est mis en évidence.

Puis, le chapitre §6 «Modèle chimique optimisé à une étape (OSS) » présente la méthode d'optimisation de la chimie globale développée au cours de cette thèse dont l'objectif est de restituer les propriétés fondamentales de la flamme obtenues à partir d'un mécanisme chimique détaillé, et ce à faible coût. En particulier, les éléments clés pour la mise en œuvre et la validation de cette méthode seront exposés.

Par la suite, le chapitre §7 «Propagation d'un noyau de flamme dans un milieu turbulent stratifié » complète l'analyse conduite en laminaire en s'intéressant aux effets conjoints de la turbulence et des hétérogénéités sur le développement et la propagation du front de flamme. Un certain nombre de mécanismes élémentaires induits par les hétérogénéités seront examinés dans des configurations bidimensionnelles, avant d'être analysés dans des configurations tridimensionnelles conduites grâce à la méthode de chimie globale optimisée développée dans le cadre de cette thèse et qui a été présentée dans le chapitre précédent.

Enfin, le dernier chapitre §8 «[Conclusions et perspectives](#) », tire les conclusions des analyses réalisées et présente un nombre de suggestions pour des recherches futures visant à compléter ce travail.

Outils de simulation et d'analyse

Sommaire

2.1	Introduction et objectifs du chapitre	8
2.2	Propriétés thermo-chimiques d'un mélange gazeux	8
2.3	Modélisation de la chimie	11
2.4	Équations de conservation dans un milieu réactif	15
2.5	Flux moléculaires et propriétés de transport	16
2.6	Code <i>Asphodele</i>	19
2.7	Résolution de l'équation de Poisson	23
2.8	Critères de résolution numérique	28
2.9	Outils d'analyse de la combustion turbulente stratifiée	37
2.10	Récapitulatif	46

2.1 Introduction et objectifs du chapitre

L'étude de la combustion turbulente couvre un large éventail de disciplines. Au cœur du défi se trouve la présence d'une large gamme d'échelles caractéristiques spatio-temporelles, où interagissent les différents processus gouvernant la combustion.

Bilger et al. [5] ont discuté les différents paradigmes qui ont évolué au fil des années pour résoudre le problème de la combustion turbulente. Un thème récurrent parmi ces paradigmes est la séparation des échelles pour surmonter la complexité associée à la multitude des échelles couplées dans les écoulements turbulents réactifs. Ces stratégies ont été couronnées de succès pour une grande classe de problèmes et ont permis l'utilisation de la simulation numérique (CFD) pour la modélisation de la combustion et la conception de dispositifs pratiques. Ces stratégies peuvent également refléter la formulation et la mise en équation ainsi que les solutions numériques du jeu d'équations considérées en plus de la simplification inhérente de ces équations en raison du régime d'écoulement, c'est le cas de la formulation à faible nombre de Mach, à titre d'exemple. Elles reflètent également la méthodologie adoptée par le modélisateur, qui est susceptible de s'intéresser à des résultats moyennés, filtrés, ou encore résultats pleinement résolus.

La dernière approche fait référence à la simulation numérique directe (DNS) par laquelle les équations de l'aérothermochimie sont résolues sans filtrage ni considération de la moyenne de la solution et en tenant pleinement compte de la résolution spatiale et temporelle requise dans la limite du continuum.

Les travaux réalisés dans le cadre de cette thèse s'inscrivent dans cette approche. À ce titre, le présent chapitre, propose de présenter, les équations régissant les écoulements réactifs. Une attention particulière est accordée aux phénomènes chimiques et de transport. L'approche numérique employée dans le code *Asphodele* ainsi que les choix de résolution sont également exposés.

2.2 Propriétés thermo-chimiques d'un mélange gazeux

2.2.1 Composition d'un mélange

Les écoulements réactifs correspondent généralement à des systèmes comportant plusieurs composants appelés mélanges. Les propriétés thermodynamiques et de transport de ces derniers dépendent de leurs compositions. Pour cette raison, il convient de rappeler les propriétés d'un mélange quelconque.

Considérons un mélange d'un volume V de fluide et de masse m qui est égale à la somme des masses des N_{sp} espèces chimiques qui le composent :

$$m = \sum_{k=1}^{N_{sp}} m_k \quad (2.1)$$

Cela implique que la masse volumique du mélange $\rho = m/V$ s'exprime :

$$\rho = \frac{m}{V} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{m_k}{V} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \rho_k \quad (2.2)$$

où ρ_k désigne la masse volumique partielle de l'espèce k . Une des manière de quantifier la contribution de chaque espèce k est d'introduire sa fraction massique Y_k :

$$Y_k = \frac{\rho_k}{\rho} = \frac{m_k}{m} \quad (2.3)$$

Il est aussi courant d'exprimer cette contribution en termes de quantité de matière, grâce à la fraction molaire X où à la concentration molaire $[X]$:

$$X_k = \frac{n_k}{n}, \quad [X_k] = \frac{n_k}{V} = \frac{\rho_k}{W_k} \quad (2.4)$$

où n désigne le nombre de moles dans le mélange, n_k celui de l'espèce k et W_k sa masse molaire.

La masse molaire du mélange, quant à elle, s'exprime à partir de celles des espèces comme :

$$W = \left[\sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{W_k} \right]^{-1} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k W_k \quad (2.5)$$

2.2.2 Relations thermodynamiques

Les relations thermodynamiques sont généralement utilisées pour lier la composition, la température et l'enthalpie d'un mélange pour une pression donnée. En particulier, en supposant que les gaz constituant le mélange sont parfaits, il est possible de lier la pression partielle P_k de l'espèce k à la température et à la masse volumique de l'espèce k :

$$P_k = \rho_k \frac{\mathcal{R}}{W_k} T = \rho_k \mathcal{R}_k T \quad (2.6)$$

où \mathcal{R} et \mathcal{R}_k désignent respectivement la constante des gaz parfaits ($8.314510 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$) et la constante du gaz parfait composé par l'espèce k . Cette hypothèse permet également d'exprimer la pression du mélange en fonction des pressions partielles :

$$P = \sum_{k=1}^{N_{sp}} P_k = \rho \mathcal{R} T \quad (2.7)$$

Compte tenu de l'hypothèse des gaz parfaits, nous supposons que les chaleurs spécifiques de chaque espèce ne dépendent que de la température, ce qui mène à une simplification des relations thermodynamiques¹ :

■ La chaleur spécifique à pression constante de l'espèce k à la pression standard $P^0 =$

1. on notera que pour les gaz réels la dépendance en pression doit être considérée

1 atm en fonction de la température T est exprimée à l'aide d'une approximation polynomiale ajustée à partir de données expérimentales [6] :

$$\frac{C_{p,k}}{\mathcal{R}}(T, P^0) = \sum_{i=0}^4 a_{i,k} T^i \quad (2.8)$$

- L'enthalpie molaire H_k , ainsi que l'entropie molaire S_k , sont liées à la capacité calorifique à pression constante par les relations :

$$H_k(T, P^0) = \int_{T^0}^T C_{p,k}(\theta, P^0) d\theta + \Delta H_{f,k}^0 \quad (2.9)$$

$$S_k(T, P^0) = \int_{T^0}^T \frac{C_{p,k}(\theta, P^0)}{\theta} d\theta + \Delta S_{f,k}^0 \quad (2.10)$$

où T_0 est la température de référence, $\Delta H_{f,k}^0$ et $\Delta S_{f,k}^0$ sont respectivement, l'enthalpie et l'entropie de formation de l'espèce k . La température de référence T_0 est définie de sorte à ce que le système d'équations (2.11) soit vérifié :

$$\begin{cases} \Delta H_{f,k}^0 = H_k(T^0, P^0) \\ \Delta S_{f,k}^0 = S_k(T^0, P^0) \end{cases} \quad (2.11)$$

La température de référence est conventionnellement choisie à $T^0 = 298.15K$. On peut alors déduire les approximations polynomiales pour l'enthalpie et l'entropie :

$$\frac{H_k}{\mathcal{R}T}(T, P^0) = \sum_{i=0}^4 \frac{a_{i,k}}{i+1} T^i + \frac{a_{5,k}}{T} \quad (2.12)$$

$$\frac{S_k}{\mathcal{R}}(T, P^0) = a_{0,k} \ln(T) + \sum_{i=1}^4 \frac{a_{i,k}}{i} T^i + a_{6,k} \quad (2.13)$$

Les coefficients $a_{i,k}$ sont dépendants du domaine de température dans lequel les expressions sont appliquées. Deux groupes de coefficients existent. Le premier groupe est utilisé pour décrire les propriétés des espèces dans le domaine des basses températures, qu'on note $[T_{min}, T_{mid}]$ tandis que le second est utilisé pour la gamme de températures supérieures, désignée par $[T_{mid}, T_{max}]$. Les trois valeurs T_{min} , T_{mid} et T_{max} sont a priori définies indépendamment pour chaque espèce. Les valeurs typiques sont de l'ordre de 300, 1000 et 5000K pour T_{min} , T_{mid} et T_{max} respectivement. Il s'ensuit donc, à partir des équations (2.8), (2.12) et (2.13), qu'un ensemble de 14 coefficients par espèce est requis pour évaluer les propriétés thermodynamiques de chaque espèce entre T_{min} et T_{max} .

À partir des grandeurs molaires obtenues par approximation polynomiale, on peut définir les grandeurs massiques correspondantes :

$$c_{p,k} = \frac{C_{p,k}}{W_k}, \quad h_k = \frac{H_k}{W_k}, \quad s_k = \frac{S_k}{W_k} \quad (2.14)$$

Enfin, les propriétés thermodynamiques du mélange sont déterminées par le biais des lois de mélange suivantes :

$$c_p(T, P, Y) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k c_{p,k}(T, P^0) \quad (2.15)$$

$$h(T, P, Y) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k h_k(T, P^0) \quad (2.16)$$

$$s(T, P, Y) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k \left[s_k(T, P^0) - \frac{\mathcal{R}}{W_k} \ln \left(\frac{P}{P^0} \right) - \frac{\ln(X_k)}{W_k} \right] \quad (2.17)$$

2.3 Modélisation de la chimie

2.3.1 Notion de réaction chimique

D'après le dictionnaire de Larousse, la combustion est *l'ensemble des phénomènes qui se produisent lors d'une oxydation exothermique*. Ce propos pourrait intuitivement être formulé en terme d'équation de réaction chimique entre un combustible \mathcal{F} et un comburant \mathcal{O} et produisant un produit \mathcal{P} suivant :



où ν'_F , ν'_O et ν''_P désignent respectivement les coefficients stœchiométriques du combustible, du comburant et du produit. En revanche, la vision extrêmement simpliste de cette formulation ne permet pas de décrire, réellement, l'oxydation détaillée du combustible, dont le processus est régi par des phénomènes chimiques bien plus complexes. En effet, une telle réaction se déroule suivant de nombreuses réactions élémentaires faisant appel à une multitude d'intermédiaires réactionnels. L'ensemble de ces N_r réactions constitue le mécanisme cinétique ou réactionnel dont la formulation la plus générale prend la forme :



où M_k désigne l'espèce $k^{\text{ème}}$, $\nu'_{k,j}$ et $\nu''_{k,j}$ correspondent respectivement aux coefficients stœchiométriques molaires directs et inverses de cette espèce dans la réaction j .

Il convient, toutefois, de spécifier que chaque réaction élémentaire ne fait pas intervenir toutes les espèces. En effet, dans une telle formulation, si une espèce ne fait pas partie d'une réaction, ses coefficients stœchiométriques sont considérés nuls. Dans le cas où l'un des coefficients stœchiométriques associés à une espèce est non nul, cette espèce peut être un réactif, s'il s'agit d'un coefficient stœchiométrique direct, ou un produit, si le coefficient stœchiométrique est inverse. Il existe, néanmoins, des espèces qui peuvent apparaître à la fois dans les réactifs et les produits, il s'agit de partenaires non réactifs ou inertes. De telles espèces ne sont pas affectées par la réaction mais leur concentration peut influencer le taux de réaction, par un effet de dilution.

2.3.2 Classification des réactions chimiques

2.3.2.1 Étapes de réaction

Un schéma cinétique, tel qu'il est présenté dans le paragraphe précédent est composé de quatre phases distinctes, qui se déroulent selon l'ordre suivant :

1. l'amorçage ou l'initiation, où les réactifs principaux se dissocient ;
2. le branchement, où les radicaux ou les espèces intermédiaires se forment ;
3. la propagation, où les réactifs principaux entrent en réaction avec les radicaux produisant ainsi les produits ou éventuellement d'autres radicaux ;
4. la terminaison, où tous les radicaux sont consommés et la réaction atteint son état d'équilibre.

2.3.2.2 Types de réactions chimique

Les réactions chimiques peuvent être, d'abord, classifiées en fonction de la nature de leurs coefficients stœchiométriques. Dans le cas où (i) ces derniers sont entiers, (ii) la réaction fait intervenir au maximum quatre espèces et (iii) celle-ci se déroule sans impliquer une intermédiaire réactionnel, on parle de réaction élémentaire. Toute autre réaction ne validant pas ces trois critères est qualifiée de réaction non-élémentaire.

la première catégorie des réactions est celle des réactions irréversibles. Une réaction irréversible s'opère uniquement dans le sens de la transformation des réactifs en produits, car la composition des produits empêche la réaction dans le sens inverse. En réalité, la réaction dans le sens inverse se produit, mais elle est considérée négligeable dans les conditions ordinaires.

La seconde catégorie est celle des réactions réversibles. Dans ce cas, la réaction qui s'effectue dans le sens inverse n'est pas négligeable.

De manière générale, le taux d'avancement \mathcal{Q}_j d'une réaction j est la somme d'un taux d'avancement direct q_j^f et d'un taux de réaction inverse q_j^r (nul lorsque la réaction est considérée irréversible) suivant la relation suivante :

$$\mathcal{Q}_j = \underbrace{k_j^f \prod_{k=1}^{N_{sp}} [X_k]^{v_{kj}'}}_{q_f} - \underbrace{k_j^r \prod_{k=1}^{N_{sp}} [X_k]^{v_{kj}''}}_{q_r} \quad (2.20)$$

avec k_j^f et k_j^r les constantes de vitesse directe et inverse associées à la réaction j .

La constante de vitesse directe k_j^f est communément modélisée par une loi d'Arrhenius modifiée :

$$k_j^f = A_j T^{b_j} \exp\left(-\frac{E_{a,j}}{RT}\right) \quad (2.21)$$

pour chaque réaction j :

- A_j est le facteur pré-exponentiel modélisant la fréquence de collision entre les molécules ;
- b_j fait référence à l'exposant de température ;
- $E_{a,j}$ désigne l'énergie d'activation de la réaction.

La constante de vitesse inverse, quant à elle, s'obtient à partir de la constante de vitesse directe et de la constante d'équilibre selon :

$$k_j^r = k_j^f / k_j^{eq} \quad (2.22)$$

Cette dernière est dérivée de la minimisation de l'enthalpie libre molaire $G = H - TS$ en utilisant l'équation d'état des gaz parfaits :

$$k_j^{eq} = \left(\frac{P^0}{\mathcal{R}T} \right)^{\sum_{k=1}^{N_{sp}} (v''_{kj} - v'_{kj})} \exp \left(\frac{\Delta S_j^0}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta H_j^0}{\mathcal{R}T} \right) \quad (2.23)$$

où ΔH_j^0 et ΔS_j^0 font référence, respectivement, aux variations de l'enthalpie et de l'entropie molaires au cours de la réaction j :

$$\Delta H_j^0 = \sum_{k=1}^{N_{sp}} (v''_{kj} - v'_{kj}) W_k h_k(T) \quad ; \quad \Delta S_j^0 = \sum_{k=1}^{N_{sp}} (v''_{kj} - v'_{kj}) W_k s_k(T) \quad (2.24)$$

Les réactions faisant intervenir un troisième corps M , telles que les réactions de recombinaison de type : $A + B \rightarrow AB^*$ et $AB^* + M \rightarrow C + M$ s'écrivent :



Bien qu'il ne soit pas réactif, le partenaire collisionnel M affecte le processus de réaction en absorbant l'excès d'énergie de l'espèce transitionnelle AB^* et ainsi la stabiliser. De plus, la présence de M avec une concentration molaire $[M]$ implique une dilution du mélange réactif. Cette concentration est déterminée en fonction de la concentration des réactifs selon :

$$[M] = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \eta_k [X_k] \quad (2.26)$$

avec η_k est l'efficacité de l'espèce k en tant que troisième corps. Cela modifie le taux de réaction prédit par l'équation (2.20) en :

$$\mathcal{Q}_j = \left(\sum_{k=1}^{N_{sp}} \eta_k [X_k] \right) \left(k_j^f \prod_{k=1}^{N_{sp}} [X_k]^{v'_{kj}} - k_j^r \prod_{k=1}^{N_{sp}} [X_k]^{v''_{kj}} \right) \quad (2.27)$$

Toutefois, l'effet du troisième corps sur le taux de réaction reste limité lorsque la pression totale du mélange P est élevée. En effet, dans ce cas le mélange est suffisamment concentré pour contraindre l'accumulation de l'espèce transitionnelle AB^* . Il convient alors de définir une quatrième catégorie de réactions, celle dite des réactions de *fall-off* ou réactions dépendantes de la pression. Pour ce type de réactions, la constante de vitesse dépend de la concentration et donc de la pression totale P . Lorsque la réaction se fait dans le domaine des faibles concentrations, le taux de réaction est égal à celui des réactions impliquant un troisième corps

(cf équation (2.27)). De même, dans le domaine des fortes concentrations, le taux de réaction prend la forme de celui des réactions réversibles (équation (2.20)). Cependant, dans la zone de transition, une formulation du taux de réaction est exigée. Une des solutions possibles consiste à introduire un facteur correctif empirique F dans l'estimation de la constante de vitesse directe qui se formule :

$$k_f(T, P_r) = k_\infty \left(\frac{P_r}{1 + P_r} \right) F \quad (2.28)$$

avec P_r la pression réduite définie par :

$$P_r = \frac{k_0[M]}{k_\infty} \quad (2.29)$$

et k_0, k_∞ sont respectivement les constantes de vitesse pour les limites basse pression et haute pression, qui sont données sous la forme Arrhenius :

$$k_0 = A_0 T^{b_0} \exp\left(-\frac{E_{a,0}}{RT}\right) \quad (2.30)$$

$$k_\infty = A_\infty T^{b_\infty} \exp\left(-\frac{E_{a,\infty}}{RT}\right) \quad (2.31)$$

Le facteur correctif F tend asymptotiquement vers l'unité dans les limites basse et haute pressions. Les formulations suivantes permettent d'estimer F :

$$F = \begin{cases} 1 & \text{Lindemann } et \text{ al. [7]} \\ 10^{\log(F_\alpha/(1+\beta^2))} & \text{Gilbert } et \text{ al. [8]} \\ D \left(A \exp(-B/T) + B \exp(-T/C)^Z \right) T^E & \text{Stewart } et \text{ al. [9]} \end{cases} \quad (2.32)$$

En fonction de la formulation retenue dans le système (2.32), des variables et des constantes apparaissent :

- Dans la formulation de [Gilbert et al. \[8\]](#) :

$$F_\alpha = (1 - a) \exp(-T/T^{***}) + a \exp(-T/T^*) + \exp(-T^{**}/T) \quad (2.33)$$

$$\beta = \frac{\log(P_r) + \alpha}{0.75 - 1.27 \log(F_\alpha) - 0.14(\log(P_r) + \alpha)} \quad (2.34)$$

$$\alpha = -(0.4 + 0.67 \log(F_\alpha)) \quad (2.35)$$

les quatre paramètres (a, T^*, T^{**} et T^{***}) sont définis dans le mécanisme pour chaque réaction de *fall-off*.

- De manière analogue, dans la formulation de [Stewart et al. \[9\]](#), les paramètres (A, B, C, D, E) sont définis dans le mécanisme pour chaque réaction de *fall-off*. Z quant à lui est calculé à partir de P_r :

$$Z = \left(1 + \log(P_r)^2 \right)^{-1} \quad (2.36)$$

2.3.3 Taux de réaction des espèces

L'ensemble des réactions chimiques conduit à un taux de réaction moléculaire de chaque espèce k , égal à la somme de tous les taux d'avancement des réactions impliquant l'espèce k pondérés par les coefficients stœchiométriques correspondants :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^{N_r} \dot{\omega}_{k,j} = \sum_{j=1}^{N_r} (v''_{kj} - v'_{kj}) Q_j \quad (2.37)$$

La conservation de la masse totale (conservation des atomes) implique que la somme des taux de réaction de toutes les espèces est nulle :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_k = 0 \quad (2.38)$$

En revanche, cette somme pondérée par les enthalpies standards de formation des espèces $\Delta h_{f,k}^0$ peut ne pas être nulle, et représente l'opposé du taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$:

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (2.39)$$

2.4 Équations de conservation dans un milieu réactif

Les équations régissant les écoulements réactifs peuvent être exprimées sous différentes formes. Cependant, elles sont communément représentées comme des équations de transport ou de conservation pour la masse totale, de la quantité de mouvement et des scalaires supplémentaires qui peuvent être utilisés pour résoudre spatialement et temporellement l'état thermodynamique du mélange. Ces équations sont résolues en tenant compte des conditions initiales et limites, ainsi que les relations constitutives ou lois de comportement (la réaction, la diffusion moléculaire, les équations d'état,...). Par conséquent, en plus de la masse volumique et du moment, des équations de transport régissant la composition (fraction massique ou molaire, masses volumiques ou concentrations d'espèces) et une mesure scalaire de la température ou de l'énergie (énergie interne, ou enthalpie) doivent être résolues. Ces équations peuvent s'écrire dans l'absence de force volumique et d'apport de masse et d'énergie externes :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.40a)$$

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = - \frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \quad (2.40b)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = - \frac{\partial \mathcal{F}_{k,i}}{\partial x_i} + \dot{\omega}_k \quad (2.40c)$$

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i h_s}{\partial x_i} = \dot{\omega}_T + \frac{DP}{Dt} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial Q_i}{\partial x_i} \quad (2.40d)$$

Dans les équations ci-dessus, \mathbf{u} est le vecteur vitesse ; τ est le tenseur des contraintes visqueuses ; \mathcal{F}_k est le flux diffusif associé à la $k^{\text{ème}}$ espèce ; $\dot{\omega}_k$ est le taux de production de la $k^{\text{ème}}$ espèce ; h_s est l'enthalpie sensible totale du mélange, qui peut être exprimée par $h_s = \sum_{k=1}^{N_{sp}} (h_k - \Delta h_{f,k}^0)$ et \mathbf{Q} est le flux de chaleur, qui représente la conduction thermique, le rayonnement et le transport à travers les gradients d'espèces.

Le vecteur solution \mathcal{S} représenté par le système d'équations (2.40) ci-dessus est $\mathcal{S} = (\rho, \rho u, \rho Y, \rho h_s)$ dans sa forme conservative ou $\mathcal{S} = (\rho, u, Y, h_s)$ dans sa forme non conservative, avec $Y = (Y_k, k = 1, N_{sp})$. Les équations directrices peuvent être exprimées sous une forme plus compacte comme suit :

$$\frac{D\mathcal{S}}{Dt} = \mathcal{L}(\mathcal{S}) \quad (2.41)$$

où \mathcal{L} représente le second membre des équations de conservation qui comporte des termes avec des dérivées spatiales (*i.e.* des flux diffusifs pour la masse et la chaleur) et des termes sources (*i.e.* des termes sources chimiques). La dérivée particulaire $D\mathcal{S}/Dt$ inclut à la fois le terme instationnaire et le terme advectif dans la représentation eulérienne telle que :

$$\frac{D\mathcal{S}}{Dt} \equiv \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathcal{S} \quad (2.42)$$

Comme on peut le voir, un certain nombre de termes dans les équations de conservation ne sont pas explicitement exprimés en termes de vecteur de solution et doivent reposer sur des relations constitutives, des équations d'état ou des relations auxiliaires supplémentaires. Ces termes comprennent des expressions pour les contraintes visqueuses, les vitesses de diffusion des espèces, la vitesse de réaction des espèces et le dégagement de chaleur, etc. La majorité de ces termes trouvent leur origine à l'échelle moléculaire, et par conséquent, le rôle des relations constitutives est de les représenter dans des modèles de continuum. En effet, l'utilisation des équations constitutives est le premier niveau de traitement multi-échelle pour la modélisation des écoulements réactifs turbulents. Les approches alternatives, significativement plus coûteuses, impliquent leur détermination en utilisant des modèles couplés "à la volée" avec des modèles de continuum. Il est à noter, tout de même, que les cas où de telles approches sont nécessaires restent très limités.

Les relations constitutives telles que l'équation d'état, les taux de réactions des espèces et le taux de dégagement de chaleur étant déterminés dans les sections précédentes, l'objectif de la section suivante portera sur la détermination des relations constitutives associées aux flux moléculaires et aux propriétés de transport.

2.5 Flux moléculaires et propriétés de transport

2.5.1 Flux moléculaires

Comme évoqué ci-dessus, les processus diffusifs ont pour origine les mouvements ayant lieu à l'échelle moléculaire et qui tendent à estomper les gradients macroscopiques présents

au sein d'un écoulement. Les équations de conservation (2.40) font apparaître trois grandeurs associées à la contribution de la diffusion :

- **le tenseur de pression et de contrainte visqueuse τ** : dans les écoulements gazeux réactifs, l'hypothèse du fluide newtonien est raisonnablement valide, et le tenseur des contraintes visqueuses peut être représenté par la relation suivante :

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left(\kappa_\tau - \frac{2}{3}\mu \right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.43)$$

avec μ est la viscosité de cisaillement, κ_τ la viscosité volumique et δ_{ij} le symbole de Kronecker.

- **le flux de masse $\mathcal{F}_k = \rho Y_k \mathcal{V}_k$** : d'après la théorie cinétique des gaz, le flux de masse s'obtient par le biais de la résolution du système de Stefan-Maxwell-Boltzmann, qui permet d'exprimer ce dernier comme somme des contributions des gradients de concentrations, de la diffusion barotrope et des gradients de température (effet *Soret*) :

$$\rho Y_k \mathcal{V}_{k,i} = - \sum_{j=1}^{N_{sp}} \rho Y_k D_{kj} \frac{\partial X_j}{\partial x_i} - \sum_{j=1}^{N_{sp}} \rho Y_k D_{kj} (X_j - Y_j) \frac{\partial (\ln P)}{\partial x_i} - \sum_{j=1}^{N_{sp}} \rho Y_k D_{kj} \chi_j \frac{\partial (\ln T)}{\partial x_i} \quad (2.44)$$

avec D_{kj} le coefficient de diffusion binaire entre l'espèce k et l'espèce j et χ_j le rapport de diffusion thermique de l'espèce j .

- **le flux de chaleur Q** : le flux de chaleur surfacique est la somme des effets de conduction, des flux diffusifs d'enthalpies partielles des différentes espèces et des gradients de concentration (effet *Dufour*) :

$$Q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k} Y_k \mathcal{V}_{k,i} - P \sum_{k=1}^{N_{sp}} \chi_k \mathcal{V}_{k,i} \quad (2.45)$$

où λ désigne la conductivité thermique du mélange.

2.5.2 Hypothèses simplificatrices

En terme de coûts numériques, la résolution du système (2.40a)-(2.40d) en prenant en compte les flux diffusifs moléculaires définis par les équations discutées dans le paragraphe précédent est assez onéreuse. En effet, à un instant et un point donnés, l'évaluation de l'ensemble des coefficients requiert la résolution de trois systèmes linéaires de taille N_{sp}^2 , ce qui est difficile algorithmiquement et extrêmement coûteux à réaliser, voir par exemple [Ern et Giovangigli \[10\]](#). Pour s'affranchir de ces limitations certaines hypothèses simplificatrices sont retenues dans de grand nombre d'applications. Par exemple, dans un écoulement à faible nombre de Mach ($\mathcal{M} \ll 1$) :

- l'hypothèse de Stokes peut être adoptée. Cette dernière consiste à négliger le terme mettant en jeu la viscosité volumique κ_τ , ce qui permet de simplifier le terme des contraintes visqueuses :

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.46)$$

- le terme de diffusion barotrope $\nabla(\ln P)$ est négligé sous cette hypothèse étant donné que les fluctuations spatiales en pression sont négligeables.

D'autre part, dans les conditions ordinaires de flammes, les rapports de diffusion thermique des espèces χ_j sont négligeables, ce qui permet de négliger les effets des gradients de température et de concertations effets (*Soret* et *Dufour*). Une des hypothèses communément adoptée est celle basée sur l'approximation de Hirschelder-Curtiss [11] qui consiste à considérer que la diffusion de l'espèce k dépend uniquement de son propre gradient, avec un coefficient moyenné de diffusion pour le mélange D_{km} . Selon *Ern et Giovangigli* [10, 12], cette approximation est considérée comme la meilleure au premier ordre.

Ces hypothèses permettent de simplifier des flux de masse et de chaleur en :

$$\rho Y_k \mathcal{V}_{k,i} = -\rho Y_k D_{km} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}; \quad Q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k} Y_k \mathcal{V}_{k,i} \quad (2.47)$$

2.5.3 Coefficients de transport multi-espèces

Les différents flux diffusifs qui apparaissent dans les équations de conservation ont été présentés. L'adoption de certaines hypothèses a permis d'obtenir des formulations simplifiées. Cette section vise à présenter des formulations permettant d'estimer les coefficients de transport requis.

La viscosité de dynamique (ou de cisaillement) du mélange μ est estimée via une loi de mélange de *Wilke* [13] :

$$\mu(\mathbf{Y}, T) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{X_k \mu_k}{\sum_{j=1}^{N_{sp}} X_j \eta_{ij}} \quad ; \quad \eta_{ij} = \frac{(1 + \sqrt{\mu_i/\mu_j})(W_j/W_i)^{1/4})^2}{\sqrt{8(1 + W_i/W_j)}} \quad (2.48)$$

La conductivité thermique du mélange est évaluée par le biais d'une loi de mélange, donnée par *Mathur et al.* [14] :

$$\lambda(\mathbf{Y}, T) = \frac{1}{2} (\Lambda_{\parallel} + \Lambda_{\perp}) \quad \text{avec : } \Lambda_{\parallel} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k \lambda_k \quad \text{et : } \Lambda_{\perp} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k \lambda_k^{-1} \quad (2.49)$$

Avec l'approximation Hirschelder-Curtiss [11], le coefficient de diffusion D_{km} n'est plus un coefficient binaire mais un coefficient de diffusion équivalent de l'espèce k dans le reste du mélange qui s'exprime par le biais de :

$$D_{km}(\mathbf{Y}, T, P) = \frac{1 - Y_k}{\sum_{\substack{j=1, \\ j \neq k}}^{N_{sp}} X_j / D_{jk}(T, P)} \quad (2.50)$$

Néanmoins, cette approximation souffre d'un inconvénient qui se manifeste par la non conservation de la masse. Une des méthode permettant de surmonter un tel inconvénient consiste à introduire une vitesse de correction \mathcal{V}^c afin de pouvoir conserver la masse totale.

Ainsi, la vitesse de diffusion \mathbf{V}_k est légèrement modifiée :

$$\mathbf{V}'_k = -Y_k D_{km} \nabla \ln(X_k) + \mathbf{V}^c \quad (2.51)$$

de telle sorte que :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k \mathbf{V}'_k = \mathbf{0} \quad (2.52)$$

c'est à dire :

$$\mathbf{V}^c = \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k^2 D_{km} \nabla \ln(X_k) \quad (2.53)$$

Il est important de noter qu'il est possible, à partir des coefficients de transport présentés ci-dessus, de définir des nombres adimensionnels qui permettent de caractériser le fluide indépendamment des conditions de l'écoulement. En effet, la diffusion moléculaire est généralement caractérisée via le nombre de Schmidt Sc_k de l'espèce k :

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho D_{km}} \quad (2.54)$$

qui compare les effets de cette dernière aux effets visqueux. De même, la conductivité décrivant les effets de diffusion thermique est comparée aux effets visqueux via le nombre de Prandtl :

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda} \quad (2.55)$$

Par ailleurs, on peut comparer les effets de la diffusion thermique à ceux de la diffusion moléculaire en introduisant la diffusivité thermique D_{th} :

$$D_{th} = \frac{\lambda}{\rho c_p} \quad (2.56)$$

qui pourrait être lié au coefficient de diffusion moléculaire de l'espèce k via le nombre de Lewis Le_k :

$$Le_k = \frac{D_{th}}{D_{km}} = \frac{Sc_k}{Pr} \quad (2.57)$$

Afin d'alléger l'écriture, la notation D_{km} sera remplacée par \mathcal{D}_k dans la suite.

2.6 Code *Asphodele*

Les sections précédentes ont permis d'introduire les équations de Navier-Stokes régissant les écoulements réactifs ainsi que les relations constitutives associées aux processus de réactions chimiques et aux phénomènes de transport. L'étude réalisée dans le cadre de cette thèse, sera réalisée exclusivement avec une approche numérique. L'objectif de cette section sera d'introduire les méthodes et les stratégies numériques retenues dans le code de simulation numérique directe *Asphodele* développé conjointement par les laboratoires CORIA, PPRIME, EM2C et CMAP [15, 16, 17, 18]. Bien qu'*Asphodele* soit un code DNS diphasique, nous allons introduire uniquement les aspects relatifs à résolution de la phase ga-

zeuse. Le code de calcul *Asphodele* est aujourd'hui largement utilisé dans la communauté [19, 20, 17, 18, 21, 15, 22, 16, 23, 24, 25, 26, 27].

2.6.1 Équations de conservation adimensionnées

La résolution numérique directe du système des équation de conservation en utilisant les grandeurs avec leurs unités physiques, entraîne une manipulation des variables non normalisées. D'un point de vue numérique, cela induit souvent à l'introduction d'erreurs non contrôlables d'arrondi et de troncature. Cependant, ces erreurs peuvent être minimales lorsque les grandeurs sont pratiquement de même amplitude. Une des méthodes courantes utilisées pour atteindre un tel objectif consiste à résoudre un système d'équations adimensionnées équivalent au système considéré.

Une forme adimensionnelle des équations (2.40a)-(2.40d) peut s'écrire :

$$\frac{\partial \rho^+}{\partial t^+} + \frac{\partial (\rho^+ u_j^+)}{\partial x_j^+} = 0 \quad (2.58a)$$

$$\frac{\partial (\rho^+ u_i^+)}{\partial t^+} + \frac{\partial (\rho^+ u_i^+ u_j^+)}{\partial x_j^+} = \frac{-1}{\gamma_\infty \mathcal{M}_\infty^2} \frac{\partial P^*}{\partial x_i^+} + \frac{\partial \tau_{ij}^+}{\partial x_j^+} \quad (2.58b)$$

$$\frac{\partial \rho^+ h_s^+}{\partial t^+} + \frac{\partial (\rho^+ h_s^+ u_j^+)}{\partial x_j^+} = \frac{\gamma_\infty - 1}{\gamma_\infty} \frac{DP^+}{Dt^+} + \dot{\omega}_T^+ - \frac{\partial Q_j^+}{\partial x_j^+} + \mathcal{M}_\infty^2 (\gamma_\infty - 1) \tau_{ij}^+ \frac{\partial u_i^+}{\partial x_j^+} \quad (2.58c)$$

$$\frac{\partial \rho^+ Y_k^+}{\partial t^+} + \frac{\partial (\rho^+ Y_k^+ u_j^+)}{\partial x_j^+} = \frac{\partial}{\partial x_j^+} \left(\rho^+ \mathcal{D}_k^* \frac{\partial Y_k}{\partial x_j^+} \right) + \dot{\omega}_k^+ \quad (2.58d)$$

avec :

$$P^+ = \frac{\rho^+ T^+}{W^+} \quad (2.59a)$$

$$h_s^+ = \frac{1}{c_p^\infty T_\infty} \sum_{k=1}^{N_{sp}} \left(Y_k \int_{T_0}^T c_{p,k}(\theta) d\theta \right) \quad (2.59b)$$

L'adimensionnement des grandeurs est obtenu en divisant ces dernières par des valeurs de référence, de manière à ce que l'on puisse effectuer des calculs avec des variables adimensionnées proches de l'unité. On distinguera les valeurs de référence, qui sont indexées par 0, des valeurs à l'infinie A_∞ , qui suivent le comportement physique prédit par la loi des gaz parfaits :

$$\begin{array}{l|l|l}
x_i = x_0 x_i^+ & u_i = u_0 u_i^+ & t = \frac{x_0}{u_0} t^+ \\
\rho = \rho_\infty \rho^+ & T = T_\infty T^+ & P = P_\infty P^+ = \rho_\infty \frac{\mathcal{R} T_\infty}{W_\infty} P^+ \\
h_s = c_p^\infty T_\infty h_s^+ & \gamma_\infty = \frac{c_p^\infty}{c_p^\infty - \mathcal{R}/W_\infty} & \mathcal{M}_\infty = \frac{u_0}{\sqrt{\gamma_\infty T_\infty \mathcal{R}/W_\infty}} \\
c_p = c_p^\infty c_p^+ & \text{Re}_\infty = \frac{\rho_\infty u_0 x_0}{\mu_0} & \mu = \mu_0 \mu^+ \\
\mu^\bullet = \frac{\mu^+}{\text{Re}_\infty} & \mathcal{D}_k^\bullet = \frac{\mu^+}{\rho^+ \text{Re}_\infty \text{Sc}_k} & \lambda^\bullet = \frac{c_p^+ \mu^+}{\text{Re}_\infty \text{Pr}}
\end{array}$$

et :

$$\begin{aligned}
\dot{\omega}_T &= \frac{\rho_\infty c_p^\infty T_\infty u_0}{x_0} \dot{\omega}_T^+; & \dot{\omega}_k &= \frac{\rho_\infty u_0}{x_0} \dot{\omega}_k^+; \\
\tau_{ij}^+ &= \mu^\bullet \left(\frac{\partial u_i^+}{\partial x_j^+} + \frac{\partial u_j^+}{\partial x_i^+} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k^+}{\partial x_k^+} \delta_{ij} \right); \\
\frac{\partial Q_j^+}{\partial x_j^+} &= - \frac{\partial}{\partial x_j^+} \left(\lambda^\bullet \frac{\partial T^+}{\partial x_j^+} + \rho^+ \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k}^+ \mathcal{D}_k^\bullet \frac{\partial Y_k^+}{\partial x_j^+} \right);
\end{aligned}$$

2.6.2 Approximation à faible nombre de Mach

Pour la plupart des applications pratiques, le nombre de Mach comparant la vitesse du fluide et la célérité du son demeure assez faible. Dans les chambres de combustion des moteurs automobiles et aéronautiques ainsi que les fours en sont des exemples. Un tel régime d'écoulement est appelé "un écoulement à faible nombre de Mach" *LMN (Low Mach Number)*. Lorsque le nombre de Mach est faible devant l'unité, la pression dans le domaine subit une homogénéisation assez rapide pour que la propagation des ondes acoustiques se fasse beaucoup plus rapidement que celles des ondes entropiques. Ainsi, les fluctuations spatiales de la pression n'ont pas d'effet notable sur les propriétés thermodynamiques de l'écoulement, et peuvent alors être négligées. Par conséquent, la pression est considérée constante en espace mais, peut être, variable en temps. Les variations locales de température et de masse volumique inhérentes aux réactions chimiques seront les seules à considérer. De ce fait, formulation incompressible des équations de Navier-Stokes ne peut pas être retenue car elle conduit à des températures et des masse volumiques constantes en temps en espace.

Une formulation intermédiaire des équations de Navier-Stokes avec l'approximation à faible nombre de Mach, a été proposée par [Majda et Sethian \[28\]](#). Elle consiste à ne garder que l'ordre zéro en $\epsilon \equiv \gamma_\infty \mathcal{M}_\infty^2$ dans les développements asymptotiques des équations de Navier-Stokes compressibles adimensionnelles. L'intérêt majeur présenté par une telle approximation réside dans le fait qu'elle néglige la propagation des ondes acoustiques qui s'effectue suivant des échelles de temps caractéristiques très faibles et qui sont susceptibles de réduire drastiquement les pas de temps de simulations et par conséquent, augmenter le coût des calculs.

Le développement en puissances du nombre de Mach pour une variable A^+ s'écrit :

$$A^* = A^0 + \epsilon A^1 + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (2.61)$$

Lorsque $\epsilon \ll 1$, i.e $\mathcal{M}_\infty \ll 1$, l'ordre zéro dans les équations correspond à :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.62a)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P^1}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.62b)$$

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j h_s)}{\partial x_j} = \frac{\gamma_\infty - 1}{\gamma_\infty} \frac{DP^0}{Dt} + \dot{\omega}_T - \frac{\partial Q_j}{\partial x_j} \quad (2.62c)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j Y_k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \mathcal{D}_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_k \quad (2.62d)$$

$$\nabla P^0 = \vec{0}; \quad P^0 = \frac{\rho T}{W^+}; \quad W^+ = \left[W_\infty \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{W_k} \right]^{-1}; \quad (2.62e)$$

Pour alléger l'écriture les exposants $(\cdot)^0$ et $(\cdot)^+$ sont omis pour toutes les variables à l'exception de la pression thermodynamique P^0 .

2.6.3 Résolution numérique

Après avoir introduit les différentes équations régissant un écoulement réactif, ainsi que les méthodes d'évaluation des termes sources chimiques et des coefficients de transport, quelques caractéristiques du solveur *Asphodele* retenu pour conduire nos simulations seront présentées.

2.6.3.1 Discrétisation spatiale

Le système d'équations (2.62) est résolu par le code *Asphodele* sur un maillage fixe bi ou tridimensionnel en adoptant une discrétisation spatiale basée sur des schémas explicites aux différences finies ou des schémas compacts d'ordre élevé proposé par [Lele \[29\]](#), et qui se présentent comme une généralisation des schémas classiques de type Padé. Leur précision est comparable à celle atteinte par des codes spectraux, avec une dissipation numérique limitée.

2.6.3.2 Intégration temporelle

L'intégration temporelle, quant à elle, est réalisée par le biais d'un schéma de type Runge-Kutta d'ordre 3 à faible empreinte mémoire [30]. La difficulté majeure dans une telle résolution provient de la présence d'une large gamme d'échelles caractéristiques temporelles. *Asphodele* adopte une approche d'estimation du pas temporel pour chaque contribution (diffusive, convective et chimique). Une telle approche présente l'avantage de réduire le temps de calcul puisqu'elle l'offre le choix du pas de temps d'une itération, qui peut, donc, être égal au minimum des pas de temps diffusif, convectif et chimique.

2.6.3.3 Intégration raide des termes sources

Un couplage avec la librairie CHEMKIN [31], permet d'évaluer les différents coefficients de transport ainsi que les termes sources chimiques (cf. Bouali [32]). Il est intéressant de rappeler, que l'intégration de ces derniers relève un défi dans la résolution numérique des équations de conservation d'un écoulement réactif. En effet, comme nous l'avons indiqué ci-dessus, les différents processus physico-chimiques impliquent une multitude d'échelles temporelles caractéristiques. En particulier, la situation fréquente est celle où l'échelle caractéristique de temps chimique est de plusieurs ordres de grandeurs inférieure à celle des phénomènes convectifs. Or, dans le cas où un schéma explicite est adopté pour intégrer les termes sources, la stabilité numérique et la précision imposent un pas temporel de l'ordre de grandeur du pas de temps convectif.

Cette difficulté est contournée dans *Asphodele* en tirant profit de la séparation d'opérateurs en effectuant la résolution de la chimie indépendamment des autres opérateurs (diffusion et convection) en utilisant des schémas implicites en temps de type *Backward Differentiation Formulas* BDF. Le schéma BDF est une méthode multi-pas implicite qui utilise les points connus calculés à différents instants précédents ainsi que la solution inconnue du point courant. L'ordre de précision peut être facilement ajusté en utilisant plus ou moins de points précédents. Cette méthode est connue pour fournir une bonne stabilité pour la résolution de systèmes raides. La résolution implicite en temps nécessite de résoudre, à chaque pas de temps, un système d'équations non linéaire de grande taille comportant toutes les variables.

Plusieurs bibliothèques basées sur le principe de cette méthode existent et se distinguent par certains aspects techniques tels que leur langage d'implémentation ou les solveurs linéaires utilisés pour résoudre les systèmes. *Asphodele*, par exemple, utilisait la librairie VODE [33] avant qu'elle ne soit remplacée, dans le cadre ce travail de thèse, par son homologue optimisé CVODE [34].

Pratiquement, dans *Asphodele*, la séparation d'opérateurs permet de considérer les termes sources constants pendant un pas de temps (*i.e.* sur l'intervalle $[t, t + \Delta t]$). ce qui permet d'obtenir le terme source $\dot{\Omega} = (\dot{\omega}_k|_{k=1, N_{sp}}, \dot{\omega}_T)$ sous la forme d'une approximation de premier ordre en temps du vecteur solution $\psi = (Y_k|_{k=1, N_{sp}}, T)$:

$$\dot{\Omega} = \frac{\psi(t + \Delta t) - \psi(t)}{\Delta t} \quad (2.63)$$

2.7 Résolution de l'équation de Poisson

La résolution du système d'équations LMN est basée sur une extension au cas d'un écoulement de masse volumique variable, de la méthode de projection-correction, initialement introduite par Chorin [35] et modifiée plus tard par Kim et Moin [36] pour traiter des écoulements incompressibles. Cette méthode fait intervenir une équation de Poisson dont l'inconnue est la pression (*i.e.* : $\Delta P = \text{RHS}$, avec Δ est l'opérateur laplacien). Au début de la thèse, la réso-

lution de l'équation de Poisson a été réalisée par l'usage d'un solveur de la librairie FISHPACK [37]. Cependant, l'implémentation est scalaire (*i.e.* non parallèle) ce qui occasionne une perte d'efficacité. Pour cette raison, cette partie a bénéficié d'une amélioration par l'intermédiaire d'un travail de développement numérique qui sera explicitée plus loin dans ce chapitre.

La résolution l'équation de Poisson résultant de l'application de la méthode de projection-corréction pour le couplage pression-vitesse, occupe une part notable de la totalité du temps de calcul qu'un solveur *LMN* passe dans chaque pas de temps de la simulation. En discrétisant l'opérateur laplacien sur un maillage à pas fixe suivant chaque direction et en tenant compte des conditions aux limites, cette équation résulte en un système linéaire sous la forme $AX = b$ où A désigne la matrice de l'opérateur laplacien, b est le vecteur du second membre et X est le vecteur inconnu.

Au début de cette thèse, *Asphodele* était muni d'un solveur elliptique de la librairie FISHPACK [37]. Cette approche souffrait de plusieurs limitations dont l'origine réside dans la nature du couplage entre le solveur scalaire FISHPACK avec le code *Asphodele* parallèle, ce qui implique l'existence d'une architecture pseudo-parallèle : tous les processeurs communiquent les données des nœuds de calculs qui leur sont associés à un seul et unique processeur qui s'occupe ensuite de la résolution de l'équation de Poisson, pendant que le reste des unités de calculs reste en attente de la solution. Une telle approche conduit à une détérioration importante de l'efficacité du code de calcul.

En effet, l'architecture pseudo-parallèle de cette partie du code *Asphodele*, souffrait alors de plusieurs limitations. Parmi lesquelles :

- l'accord d'une proportion très importante du temps total de la simulation aux communications inter-processeurs du fait que tous les nœuds de domaine sont regroupés sur un seul processeur.
- Cela, en particulier, est très critique, car dans le cas où le nombre de nœuds dans le domaine est relativement important, le calcul peut s'arrêter à cause d'un débordement de la mémoire du processeur collecteur.
- Enfin, du point de vue de scalabilité², l'aspect le plus pénalisant de cette implémentation, est le fait qu'il ne tire pas profit du gain potentiel en temps de calcul que présente la parallélisation.

Pour s'affranchir de ces limitations, l'amélioration de cette implémentation, a fait partie des travaux menés durant cette thèse. Avant de présenter la méthode retenue à l'issue de ces travaux, une introduction succincte de quelques concepts et notions liés à la résolution des systèmes linéaire est d'abord abordée.

2. La scalabilité fait référence à l'aptitude d'un système à accroître sa capacité de calcul sous une charge accrue quand des ressources sont ajoutées.

2.7.1 Résolution numérique d'un système linéaire

2.7.1.1 Méthodes numériques

Les méthodes directes de résolution de systèmes linéaires donnent théoriquement la solution exacte dans un nombre fini d'opérations. Malheureusement, cela n'est pas toujours vrai dans les applications en raison des erreurs d'arrondi, d'autant plus que le coût numérique associé est onéreux lorsque la taille du système à résoudre est relativement grande. Contrairement aux méthodes directes, les méthodes itératives consistent à construire une série de solutions approchées de telle sorte qu'elles convergent vers la solution exacte du système. Le principal avantage d'une méthode itérative est qu'elle est auto-correctrice et qu'elle est scalable quelle que soit la taille du système. Il est à noter que le nombre d'itérations nécessaire à l'obtention de la convergence est également très dépendant de l'algorithme utilisé et des caractéristiques de la matrice de l'opérateur laplacien discret. D'autre part, la convergence peut également être accéléré en utilisant un préconditionneur.

2.7.1.2 Notion du préconditionnement

Le terme préconditionnement fait référence à la transformation du système $AX = b$ en un autre système avec des propriétés plus favorables pour une résolution itérative. Un préconditionneur P est une matrice qui effectue une telle transformation, de sorte à ce que le système à résoudre ait la même solution que le système suivant :

$$P^{-1}AX = P^{-1}b \quad (2.64)$$

D'une manière générale, le préconditionnement tente d'améliorer les propriétés spectrales de la matrice A . Pour les problèmes symétriques définis positifs, le taux de convergence de la résolution dépend de la distribution des valeurs propres de A . Un préconditionneur optimal aura un nombre plus petit de conditions spectrales, et/ou des valeurs propres groupées autour de 1 de manière à ce qu'il réponde aux exigences suivantes :

- le système préconditionné devrait être facile à résoudre, et
- le coût de la construction et de l'application du préconditionneur doit être minimal.

La première propriété signifie que l'itération préconditionnée devrait converger rapidement, tandis que la seconde garantit que le coût de chaque itération n'est pas trop élevé. Il est intéressant de noter que ces deux exigences sont en concurrence l'une avec l'autre et qu'il est nécessaire de trouver un compromis entre ces deux contraintes. Avec un bon préconditionneur, le temps de convergence pour une résolution préconditionnée devrait être significativement inférieur à celui de son homologue non-conditionnée.

La construction du préconditionneur a également un coût. Cependant, ce dernier reste acceptable lorsque le préconditionneur est réutilisable. Dans la situation courante où une séquence de systèmes linéaires avec la même matrice de coefficients (ou une variable variant lentement) et différents seconds membres doit être résolue, on peut se permettre de passer du temps à construire un préconditionneur puissant avec un coût susceptible d'être amorti sur

des résolutions répétées. Dans notre cas, avec l'équation de Poisson, une telle approche est envisageable.

2.7.2 Méthodologie adoptée

Une approche populaire pour construire des préconditionneurs dans les applications impliquant des équations à dérivées partielles (EDP) est de concevoir des algorithmes spécialisés qui sont optimaux (ou presque) pour une classe étroite de problèmes. Cette approche spécifique à l'application peut être très efficace, mais elle nécessite une connaissance complète du problème en question, à savoir, le domaine d'intégration, les conditions aux limites, les détails de la discrétisation, etc. Cependant, une telle approche peut ne pas être toujours réalisable ou même souhaitable. En effet, pour diverses raisons, le développeur du solveur peut ne pas avoir une connaissance complète du problème à résoudre, ou l'information peut être trop difficile à obtenir ou à utiliser. En outre, les approches spécifiques aux problèmes sont généralement très sensibles aux détails de la configuration, et même des changements modestes de cette dernière peuvent compromettre l'efficacité du solveur.

Pour ces raisons, il existe un besoin de techniques de préconditionnement universellement applicables. Ceci justifie l'intérêt durable pour les méthodes (et les bibliothèques associées) qui n'utilisent que l'information contenue dans la matrice A . Ces techniques, bien qu'elles ne soient pas optimales pour un problème particulier, atteignent une efficacité raisonnable sur une large gamme de problèmes. En outre, les codes utilisant des solveurs polyvalents peuvent être plus facilement adaptés lorsque le problème à résoudre change. De plus, les méthodes génériques peuvent souvent être affinées pour exploiter des caractéristiques spécifiques d'un problème. Les solveurs de type "boîte noire" qui en résultent peuvent être compétitifs avec les spécificités des problèmes mais moins polyvalentes.

Plusieurs bibliothèques offrant cette possibilité ont été développées et sont mises à disposition des développeurs. Parmi les plus populaires, on peut mentionner PASTIX [38], MUMPS[39], PARDISO[40], etc. Pour les besoins spécifiques d'*Asphodele*, le choix s'est orienté vers la bibliothèque HYPRE.

La bibliothèque HYPRE [41, 42, 43] est une bibliothèque de préconditionneurs et de solveurs de haute performance pour la résolution de grands systèmes linéaires d'équations sur des machines massivement parallèles. La bibliothèque HYPRE met l'accent sur les préconditionneurs multigrille, y compris le multigrille algébrique. Alors que HYPRE a trois interfaces conceptuelles [41], l'interface la plus adaptée dans ce contexte est l'interface de grille structurée (Struct). Cette interface est conçue pour les codes qui utilisent des maillages structurés, comme *Asphodele*, qui consistent en des unions de blocs rectangulaires. Les solveurs multigrille structurés dans HYPRE font usage de l'interface conceptuelle pour introduire des aspects algorithmiques spécifiques aux problèmes en tirant parti de la structure du problème et sont donc la partie la plus scalable de HYPRE [41].

Il est intéressant à noter que, dans notre cas, les méthodes multigrilles ne sont pas utilisées comme solveurs linéaires mais sont utilisées comme préconditionneurs pour des méthodes itératives de résolution fournies par HYPRE telles que le gradient conjugué (CG), BICGSTAB, GMRES, etc. Pour des raisons de consistance, les détails de l'implémentation des algorithmes et des spécifications associées aux méthodes de résolution sont omis. Le lecteur intéressé est invité à consulter le livre de Saad [44] pour plus de détails.

2.7.2.1 Performances de l'approche adoptée

A l'issue du couplage de la librairie présentée ci-dessus avec le code *Asphodele*, une étude de scalabilité sur ce dernier a été réalisée dans le but de quantifier ses performances avec la nouvelle implémentation.

Ces performances sont couramment mesurées par l'accélération (appelée également *speedup*) Γ qui correspond au rapport entre le temps CPU de calcul en scalaire (mono processus) et celui consommé par n processus :

$$\Gamma(n) = \frac{t_{(n=1)}}{t_n} \quad (2.65)$$

Pour parler en terme de rendement, l'efficacité Ξ est également utilisée. Elle correspond au rapport entre l'accélération et le nombre de processus :

$$\Xi(n) = \frac{\Gamma(n)}{n} \quad (2.66)$$

En pratique, le calcul scalaire se déroule sur une durée assez longue et peut ne pas aboutir en raison des débordements éventuels de la mémoire. Pour ces raisons, il est assez courant de considérer une étude de scalabilité en prenant un cas avec un nombre de processus de référence n_0 relativement bas de sorte à ce que l'approximation $t_{(n=1)} \approx n_0 \times t_{n_0}$ soit valide.

L'étude de scalabilité a été réalisée d'abord sur la configuration d'une turbulence homogène isotrope comparable à celle qui sera présentée au chapitre §4. Afin de jauger l'impact effectif de la nouvelle implémentation, les cas considérés sont inertes (*i.e.* non réactifs) de manière à ce que les opérations associées à la partie chimique ne biaisent pas les résultats obtenus³. De plus, même si les entrées/sorties (IO) ont été entièrement parallélisées et optimisées, durant cette thèse, par l'usage de la librairie HDF5 parallèle, les sorties de fichiers ont été désactivées, pour que l'étude soit indépendante de la vitesse d'écriture sur le disque. Les différents calculs sont réalisés pour effectuer 200 itérations.

Tout d'abord, les performances de la nouvelle implémentation ont été comparées à celles de l'implémentation existante. Nous nous sommes limités ici à des configurations bidimensionnelles qui ont été réalisées sur le supercalculateur OCCIGEN⁴ du CINES⁵. La Figure 2.1

3. En effet, les calculs des termes sources chimiques se font au niveau de chaque point indépendamment (approche 0D) et donc ne nécessitent pas de parallélisation. En général, le *speedup* et l'efficacité sont *artificiellement* améliorés en considérant les cas réactifs si aucune attention particulière n'a été portée à la répartition de charge.

4. La machine Bull OCCIGEN compte 50544 cœurs Intel (E5-2690V3@2.6 GHz) et 35280 cœurs (E5-2690 V4@2.6GHz)

5. Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur

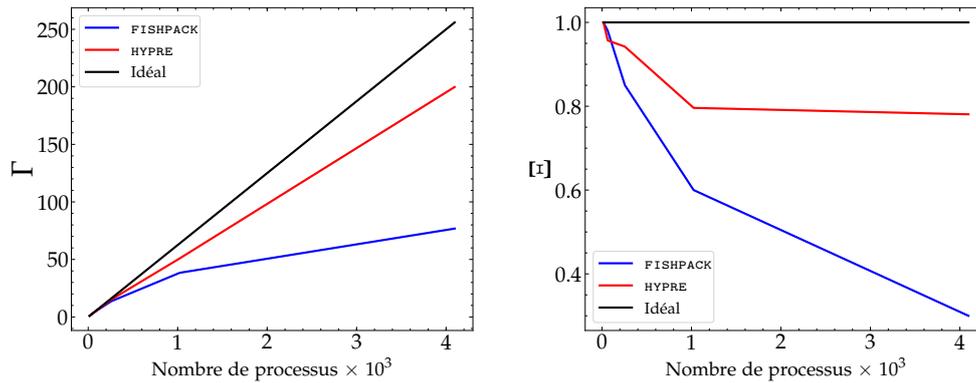


Figure 2.1 – Étude de scalabilité, comparaison des performances de la méthodologie implémentée et celles de l’implémentation existante. À gauche accélérations. À droite efficacités.

résume les résultats de cette comparaison en traçant l’accélération et l’efficacité en fonction du nombre de processus MPI, avec un nombre de processus de référence $n_0 = 16$ qui est une valeur très restrictive. D’après les résultats obtenus, la nouvelle implémentation a pu apporter une contribution non négligeable à l’amélioration des performances du solveur. En effet, à 4096 processus l’ancienne implémentation présente une efficacité très modeste et qui tend à se dégrader avec l’augmentation du nombre de processus. Cependant, la nouvelle implémentation restitue un résultat assez satisfaisant, *pour un code LMN* : à ce nombre de processus l’efficacité est d’environ 78% par rapport au point de référence de 16 processus, ce qui constitue un gain de plus de 45% en efficacité par rapport à l’ancienne version.

Ce résultat a été confirmé par une seconde étude de scalabilité réalisée sur la machine TURING⁶ de l’IDRIS⁷, qui a montré également une scalabilité satisfaisante. Cette étude a été, quant à elle, réalisée sur la configuration tridimensionnelle de celle utilisée ci-dessus, avec un nombre de processus de référence $n_0 = 1024$. Cela a permis de quantifier le comportement éventuel du code lorsqu’un large nombre de processus est considéré. Les performances obtenues sont reportées sur la [Figure 2.2](#), et montrent qu’avec la présente implémentation on peut continuer à avoir une bonne scalabilité jusqu’à 16384 processus. Cette amélioration du code *Asphodele* est susceptible d’évoluer via l’optimisation d’autres aspects que le solveur de Poisson. Néanmoins, pour la conduite des simulations qui seront considérées dans le cadre de la thèse, les performances obtenues sont satisfaisantes.

2.8 Critères de résolution numérique

Jusqu’à présent, les équations de conservation pour un écoulement réactif turbulent à faible nombre de Mach, ainsi que les approches numériques retenues pour leur résolution, notamment dans le code *Asphodele*, ont été introduites. Cependant, les critères que doit remplir une configuration numérique pour qu’elle soit représentative d’un tel écoulement n’ont

6. Turing est un calculateur massivement parallèle IBM Blue Gene/Q, il compte 65536 cœurs d’exécution

7. Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique

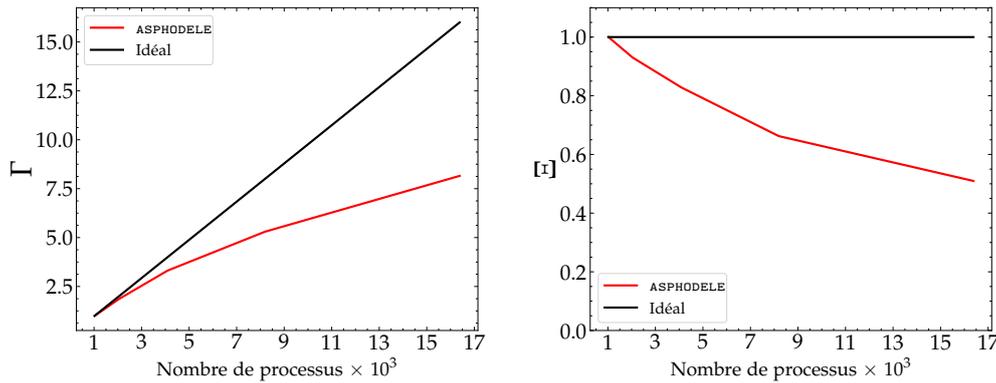


Figure 2.2 – Étude de scalabilité d'Asphodele avec l'implémentation de la nouvelle méthodologie sur le calculateur TURING de l'IDRIS.

pas encore été explicitées. Cette section a pour objectif de relever cette question. Pour ce faire, il convient, d'abord, de caractériser les échelles présentes au sein d'une combustion qui se déroule dans un milieu turbulent.

2.8.1 Échelles et diagrammes pour la combustion turbulente

2.8.1.1 Structure de flamme laminaire prémélangée

Parmi les échelles impliquées dans la combustion turbulente, on retrouve celles associées à l'aspect chimique du phénomène. Ces dernières font appel à des grandeurs intrinsèques à la propagation de flamme. Avant d'introduire ces dernières, la structure de flammes laminaires prémélangées est d'abord présentée.

Dans un certain nombre de modèles de combustion turbulente prémélangée, les flammes laminaires prémélangées sont considérées comme éléments constitutifs de référence. Elles sont caractérisées par des réactifs initialement mélangés, et le front de flamme se propage vers les gaz frais. Elle comprend trois zones principales qui peuvent être identifiées sur la [Figure 2.3](#) : (i) une zone de préchauffage, (ii) une zone de réaction puis (iii) une zone où s'accumulent les gaz brûlés, composés essentiellement des produits majoritaires de combustion. Ces zones

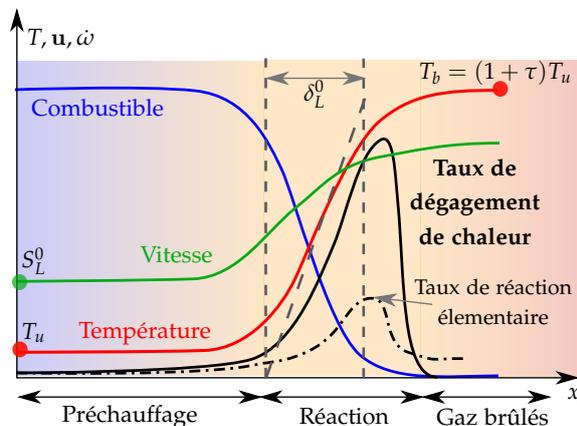


Figure 2.3 – Schématisation de la structure de flamme laminaire prémélangée.

permettent de définir des échelles spatiales caractéristiques telles que l'épaisseur de flamme

pour laquelle il existe différentes définitions. Parmi elles, il est courant d'utiliser, dans le cas des flammes monodimensionnelles non-étirées, l'épaisseur thermique δ_L^0 basée sur le gradient maximal de température :

$$\delta_L^0 = \frac{T_b - T_u}{\max(\|\nabla T\|)}$$

où l'exposant $(.)^0$ fait référence à l'état non-étiré de la flamme, et les indice (u, b) indiquent l'état des gaz frais et l'état des gaz brûlés.

Enfin, à partir du taux de consommation du combustible $\dot{\omega}_F$, de sa fraction massique à l'état frais Y_F^u ainsi que de la masse volumique des réactifs frais ρ^u , la vitesse de flamme laminaire S_L^0 se définit comme :

$$S_L^0 = \frac{-1}{\rho^u Y_F^u} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_F dx$$

Par ailleurs, notons que les gaz brûlés sont plus chauds et plus légers que les réactifs frais en raison de l'expansion thermique causée par le dégagement de chaleur. L'expansion thermique (évaluée via le facteur $\tau = (T_b - T_u)/T_b$) a une influence notable en écoulements turbulents réactifs notamment lorsqu'il s'agit de transport turbulence-scalaire dans des régimes de "contre-gradient" cf. [Sabelnikov et Lipatnikov \[45\]](#).

2.8.1.2 Échelles caractéristiques de la combustion turbulente

La combustion turbulente implique diverses échelles caractéristiques de longueur, de vitesse et de temps décrivant le champ d'écoulement turbulent et les réactions chimiques. L'analyse physique est principalement basée sur la comparaison entre ces échelles. Cette comparaison est souvent réalisée sur la base de certains nombres adimensionnels :

- **Le nombre de Reynolds Re_t** caractérise l'écoulement turbulent en comparant le transport turbulent aux forces visqueuses :

$$Re_t = \frac{u_{rms} l_t}{\nu} \quad (2.67)$$

où u_{rms} est la moyenne quadratique des fluctuations de vitesse (proportionnelle à la racine carrée de l'énergie cinétique turbulente k_T), l_t est l'échelle de longueur intégrale de la turbulence et ν la viscosité cinématique de l'écoulement.

- **Le nombre de Damköhler Da** compare les échelles de temps turbulentes τ_t et chimiques τ_c :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} \quad (2.68)$$

τ_t est le temps de retournement des structures turbulentes donné en termes d'échelle de longueur intégrale l_T et des fluctuations de vitesse turbulente u_{rms} . L'échelle de temps chimique, τ_c peut être estimée pour une flamme de pré-mélange, comme le rapport de son épaisseur δ_L^0 et sa vitesse de propagation S_L^0 . Il correspond au temps nécessaire à la propagation de la flamme sur une distance égale à sa propre épaisseur. Le nombre de

Damköhler s'exprime donc :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t}{\delta_L^0} \frac{S_L^0}{u_{rms}} \quad (2.69)$$

Dans la limite des nombres de Damköhler élevés ($Da \gg 1$), l'échelle de temps chimique est plus courte par rapport à l'échelle temporelle de la turbulence, la flamme turbulente correspond à une zone de réaction mince déformée et convectée par le champ d'écoulement. Les structures turbulentes de cet écoulement plissent et étirent la surface de la flamme sans affecter fortement sa structure interne. Dans ce cas, la flamme peut être décrite comme un élément de flamme laminaire appelé *flamelette*. En revanche, un faible nombre de Damköhler ($Da \ll 1$) fait référence à une réaction chimique lente. Les réactifs et les produits sont mélangés par des structures turbulentes avant de rentrer, à leur tour, en réaction. Lorsque le mélange entre réactifs frais et gaz brûlés se fait de manière très rapide, la définition d'une zone de réaction s'avère difficile, il s'agit de la limite du réacteur parfaitement agitée (*PSR*). Dans les flammes turbulentes, tant que l'extinction ne se produit pas, la plupart des situations pratiques correspondent à des valeurs élevées ou moyennes des nombres de Damköhler. Il convient de mentionner que diverses échelles de temps chimiques peuvent être rencontrées : l'oxydation du combustible correspond généralement à des échelles de temps chimiques faible (Da élevé) alors que la production ou la destruction de polluants tels que l'oxydation du CO ou la formation de NO sont plus lentes (Da faible).

- **Le nombre de Karlovitz (Ka)** caractérise le rapport des échelles de temps chimiques τ_c et celles des petites échelles turbulentes τ_η associées aux structures de Kolmogorov :

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_\eta} \quad (2.70)$$

De manière analogue à τ_t , τ_η s'exprime en fonction de la longueur l_η et la vitesse u_η caractéristiques des structures de Kolmogorov : $\tau_\eta = l_\eta / u_\eta$. Les grandeurs caractéristiques des structures de Kolmogorov sont données par :

$$l_\eta = \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/4} ; \quad u_\eta = (\nu l_\eta)^{1/4} \quad (2.71)$$

où ε est le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente k .

Pour les nombres faibles de Karlovitz $Ka \ll 1$, les processus chimiques dans le front de flamme sont beaucoup plus rapides que toutes les échelles de temps de turbulence. Ainsi, la structure de la flamme locale et la portée de la réaction chimique ne sont pas altérées ou influencées par la turbulence et par conséquent, les conditions laminaires prévalent à l'intérieur de la flamme. Dans ce cas, la flamme peut généralement être bien décrite avec une approche de flamelette. Dans le cas contraire ($Ka \gg 1$), la taille des plus petites structures turbulentes est égale ou inférieure à l'épaisseur de la zone de préchauffage dans le front de flamme. Cela peut conduire à un transport de chaleur et de masse turbulent dans le front de flamme. Ce qui génère à la fois un élargissement du front réactif et une augmentation de la vitesse de la flamme turbulente.

Les grandeurs définies ci-dessus, sont également à la base de la présentation du diagramme de la combustion turbulente prémélangée. Ce dernier regroupe les différents régimes de la combustion turbulente de prémélange. Sur le plan pratique, le diagramme en question pourrait être un support pour la sélection et le développement d'un modèle de combustion pertinent pour une situation donnée.

2.8.1.3 Régimes de combustion

Les nombres de Reynolds Re_t , de Damköhler Da , et de Karlovitz Ka sont liés par la relation :

$$Re_t = Da^2 Ka^2 \quad (2.72)$$

et un ensemble de deux paramètres (Re, Da) , (Re, Ka) ou (Da, Ka) sont nécessaires pour discuter des régimes de combustion dans le cas de flammes prémélangées.

Le nombre de Karlovitz est utilisé pour définir le critère de Klimov-Williams *cf.* [46], correspondant à $Ka = 1$; délimitant deux régimes de combustion. Ce critère a d'abord été interprété comme la transition entre le régime des flammes $Ka < 1$, décrit précédemment, et le régime de combustion distribuée où la structure interne de la flamme est fortement modifiée par les mouvements de turbulence. Pour les nombres de Karlovitz supérieurs à l'unité $Ka > 1$, les mouvements turbulents deviennent capables d'affecter la structure interne de la flamme mais pas nécessairement la zone de réaction. Cette zone de réaction, où la chaleur est dégagée est caractérisée par une épaisseur δ_r beaucoup plus faible que l'épaisseur δ_L^0 de la flamme $\delta_r < 0.1 \delta_L^0$. Le nombre de Karlovitz basé sur cette épaisseur de réaction est :

$$Ka_r = \left(\frac{\delta_r}{l_\eta}\right)^2 = \left(\frac{\delta_r}{\delta_L^0}\right)^2 \left(\frac{\delta_L^0}{l_\eta}\right)^2 = \left(\frac{1}{\beta}\right)^2 \left(\frac{\delta_L^0}{l_\eta}\right)^2 \approx \frac{1}{100} \left(\frac{\delta_L^0}{l_\eta}\right)^2 = \frac{Ka}{100} \quad (2.73)$$

avec β le nombre de Zeldovich.

Borghi [47] et **Peters** [48] ont proposé les régimes de flamme prémélangés turbulents suivants :

■ $Ka < 1$: Régime des flammelettes ou régime des flammes fines et plissées (Figure 2.4a).

Deux subdivisions peuvent être proposées en fonction du rapport des vitesses u_{rms}/S_L^0 :

- $u_{rms}/S_L^0 < 1$: **flamme plissée**. Comme u_{rms} peut être considérée comme la vitesse de rotation des plus grands mouvements turbulents, les structures turbulentes sont incapables de plisser la surface de la flamme au point de faire apparaître des interactions frontales de flamme. La propagation laminaire est prédominante et les interactions flamme/turbulence restent limitées.
- $u_{rms}/S_L^0 > 1$: **flamme plissée avec poches**. Dans cette situation, les plus grandes structures deviennent capables d'induire des interactions de front de flamme conduisant à la formation de poches.

■ $1 < Ka \leq 100$ ($Ka_r < 1$) : Régime de flamme plissée épaissie ou zone de réaction mince.

Dans ce cas, les mouvements turbulents sont capables d'affecter et d'épaissir la zone de préchauffage de la flamme, mais ne peuvent pas modifier la zone de réaction qui reste mince et proche d'une zone de réaction laminaire (Figure 2.4b).

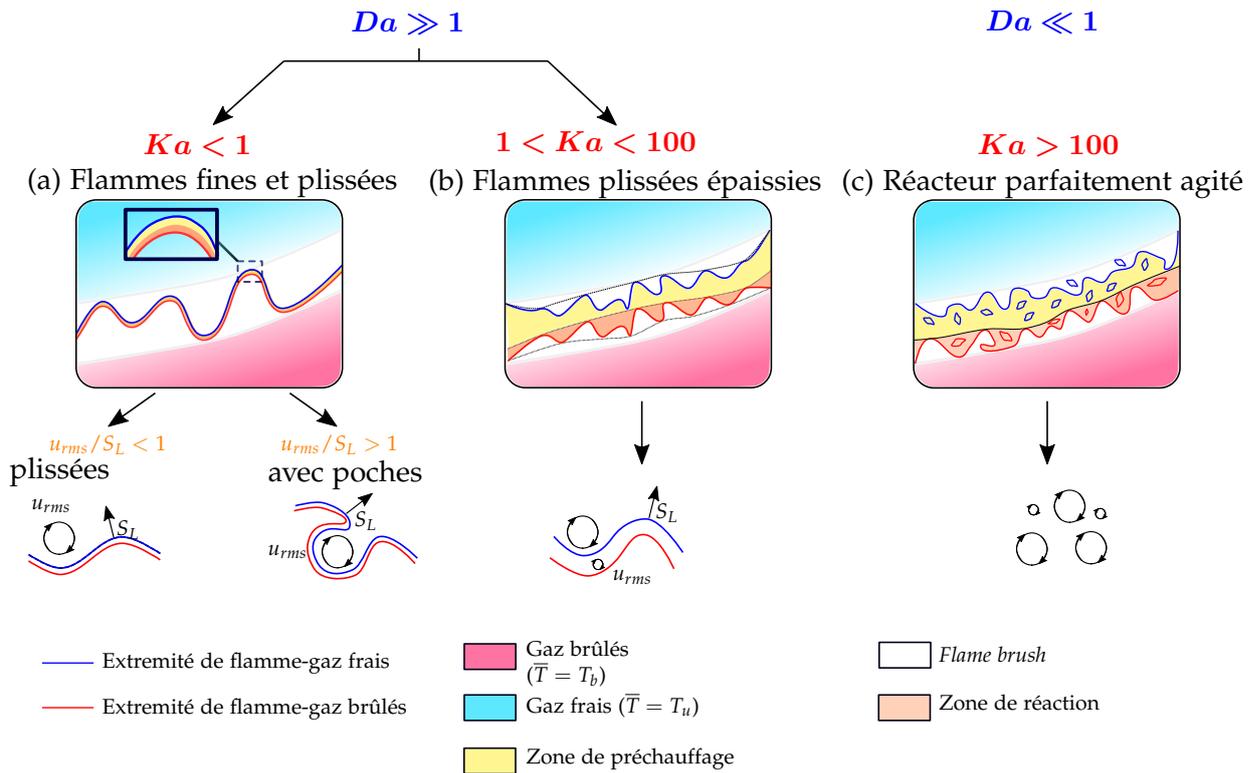


Figure 2.4 – Schématisation des régimes de combustion prémélangés turbulents proposés par Borghi [47] et Peters [48].

■ $Ka > 100$ ($Ka_r > 1$) : Régime de flamme épaissie ou réacteur parfaitement agité. Dans cette situation, les zones de préchauffage et de réaction sont fortement affectées par les mouvements turbulents et aucune structure de flamme laminaire ne peut être identifiée (Figure 2.4c).

Ces différents régimes sont généralement regroupés et sur un diagramme logarithmique ($u_{rms}/S_L^0, l_t/\delta_L^0$), similaire à celui présenté sur la Figure 2.5. Notons enfin que les effets de l’expansion thermique $\tau = (T_b - T_u)/T_u$ ont été intégrés dans ce diagramme par Mura et Champion [49].

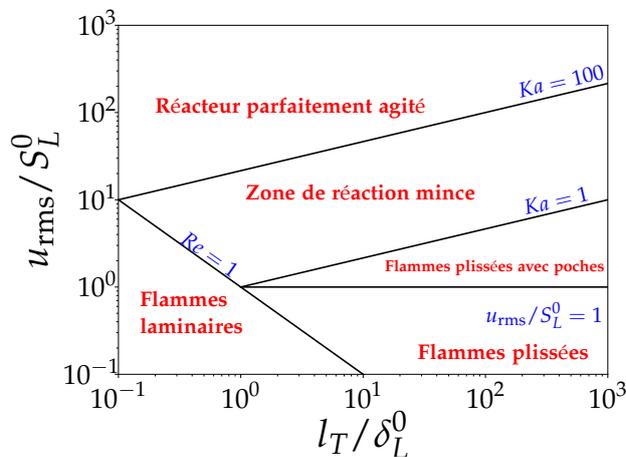


Figure 2.5 – Diagramme de la combustion turbulente prémélangée

2.8.2 Résolution des échelles de la combustion turbulente

La résolution des échelles de la combustion turbulente, impose de valider un certain nombre de contraintes :

- le calcul doit être réalisé sur le plus grand domaine possible pour résoudre les grandes échelles,
- le maillage doit être suffisamment fin pour résoudre les plus petites échelles de la turbulence (échelle de Kolmogorov),
- ainsi que la structure interne de la flamme.

■ Résolution des échelles turbulentes :

Les échelles turbulentes sont correctement résolues lorsque toutes structures sont capturées par le maillage du calcul. Ceci conduit à une condition standard dérivée comme suit.

Considérons un domaine de calcul d'une taille caractéristique L . Le maillage contient N points suivant chaque dimension, ce qui donne une taille caractéristique de maille $\Delta x = L/N$. L'écoulement turbulent peut être caractérisé par les fluctuations de vitesse à grande échelle u_{rms} et l'échelle de longueur intégrale l_t . Si le domaine de calcul contient r_1 échelles intégrales, sa taille doit vérifier :

$$L = N\Delta x > r_1 l_t \quad (2.74)$$

La plus petite échelle des structures turbulentes l_η est estimée à partir de la cascade de Kolmogorov :

$$l_\eta \approx l_t / (Re_t)^{3/4} \quad (2.75)$$

cette échelle est résolue par le calcul si elle est plus grande que r_2 fois la taille de la maille, où r_2 est un paramètre supérieur ou égal à l'unité et désignant le nombre de mailles associé à l'échelle de de Kolmogorov :

$$l_\eta > r_2 \Delta x \quad (2.76)$$

La combinaison des expressions précédentes conduit à $l_t/l_\eta < N/(r_1 r_2)$ ou $N/(r_1 r_2) > Re_t^{3/4}$ ce qui équivaut à :

$$Re_t < (N/(r_1 r_2))^{4/3} \quad (2.77)$$

l'équation (2.77) détermine le nombre de points du maillage N requis dans chaque direction pour un nombre de Reynolds Re_t donné ou la valeur limite du nombre de Reynolds pour un nombre déterminé de points suivant chaque direction.

■ Résolution des échelles chimiques :

La structure de la flamme interne doit également être discrétisée par le maillage de calcul. La précision de la résolution des échelles chimiques dépend fortement de la nature du mécanisme chimique utilisé. Lorsqu'une description simple de la chimie est utilisée (réaction irréversible en une étape), les calculs montrent que la résolution de la structure interne de

la flamme nécessite au moins r_3 points de maillage, où r_3 est de l'ordre de dix ($r_3 \approx 10$). En d'autres termes, l'épaisseur de flamme δ_L^0 doit s'étendre sur ($r_3 \approx 10$) mailles. En termes d'épaisseur de flamme, la taille du domaine de calcul est alors donnée par $L \approx (N/r_3)\delta_L^0$. Les flammes d'hydrocarbures standards à la température ambiante ont une épaisseur de l'ordre de $\delta_L^0 \approx 0.5$ mm. Avec un nombre points de $N = 256$, on pourrait faire des simulations sur un domaine de taille caractéristique d'environ $L \approx 13$ mm. Cette condition conduit également à une limite supérieure pour l'échelle de longueur intégrale de turbulence l_t qui doit être inférieure à L/r_1 pour fournir des statistiques convergentes :

$$\frac{l_t}{\delta_L^0} < \frac{L}{r_1 \delta_L^0} < \frac{N}{r_1 r_3} \quad (2.78)$$

Une autre expression peut être obtenue en remplaçant δ_L^0 par l'épaisseur diffusive de flamme $\delta \approx \nu/S_L^0$. Le produit du nombre de Reynolds par le nombre de Damköhler est :

$$Re_t Da = \frac{l_t^2 S_L^0}{\nu \delta_L^0} = \left(\frac{l_t}{\delta}\right)^2 \quad (2.79)$$

conduisant à la contrainte suivante sur le maillage (en supposant que δ et δ_L^0 sont du même ordre de grandeur) :

$$Re_t Da < (N/(r_1 r_3))^2 \quad (2.80)$$

Pour un nombre de Reynolds donné vérifiant la condition (2.77), le nombre de Damköhler est borné par l'expression (2.80). Cette condition est relativement forte comme le montre l'exemple suivant :

En supposant que $N = 512$, $r_3 = 16$ et $r_1 = r_2 = 1$ alors $Re_t < 4096$ selon (2.77) et $Re_t Da < 1024$ selon (2.80). Pour un nombre de Reynolds de turbulence $Re_t = 1000$, le nombre de Damköhler ne peut pas dépasser 1, une valeur éloignée de l'hypothèse des grands nombres de Damköhler utilisée dans la plupart des modèles de combustion turbulente. Les exigences

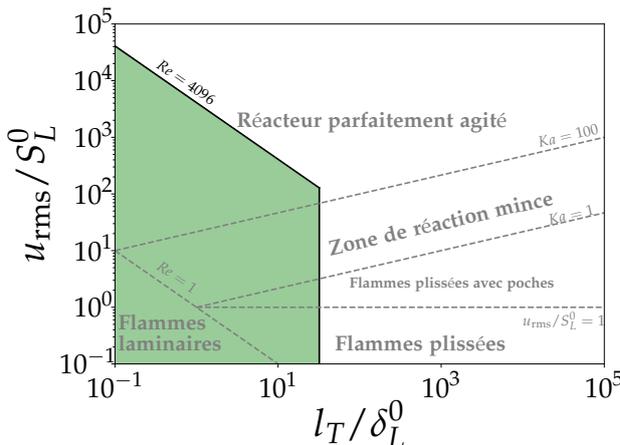


Figure 2.6 – Limites de résolution (en vert) par une approche DNS d'un écoulement turbulent réactif sur le diagramme de la combustion turbulente prémélangée.

pour la résolution des échelles chimiques imposent une limitation sévère sur la plage des paramètres qui peut être explorée en utilisant la DNS. Ces conditions sont illustrées sur la Figure 2.6, où les contraintes de fonctionnement sont tracées en fonction de l_t/δ et u_{rms}/S_L^0 . Le domaine qui peut être exploré avec la DNS est montré comme la région verte sur la Figure 2.6.

Cette région est délimitée par la contrainte sur le nombre de Reynolds de la turbulence (ligne $Re_t = 4096$) et à droite par la condition $l_t/\delta = N/(r_1 r_3) = 32$.

Le diagramme montre également, que pour les petites valeurs de l'échelle intégrale l_t par rapport à l'épaisseur de flamme δ , la limite de résolution est définie par la première condition (2.77) sur le nombre de Reynolds. La plus grande échelle intégrale l_t est généralement définie par la limite (2.80) induite par la résolution de la flamme.

Il est important de noter que, pour des coûts numériques fixes, le nombre de points de grille N dans une direction peut être plus grand pour les calculs bidimensionnels par rapport aux simulations tridimensionnelles. En conséquence, la gamme de paramètres explorés dans les calculs bidimensionnels peut être plus large.

D'un point de vue pratique, un compromis entre les coûts numériques et le besoin de réaliser des analyses physiques sur l'écoulement étudié doit être fait. Dans le cadre de cette thèse, un outil visuel basé sur les équations susmentionnées a été mis en place afin de simplifier la réalisation d'une telle tâche. Ce dernier permet à partir d'un certain nombre de paramètres ($N, r_1, r_2, r_3, S_L, \delta_L$) de prédire d'abord les limites de résolution, avant de permettre à l'utilisateur de construire la configuration optimale correspondante au point sélectionné sur le diagramme de Borghi. La Figure 2.7 illustre un exemple de configuration basé sur les paramètres introduits ci-dessus.

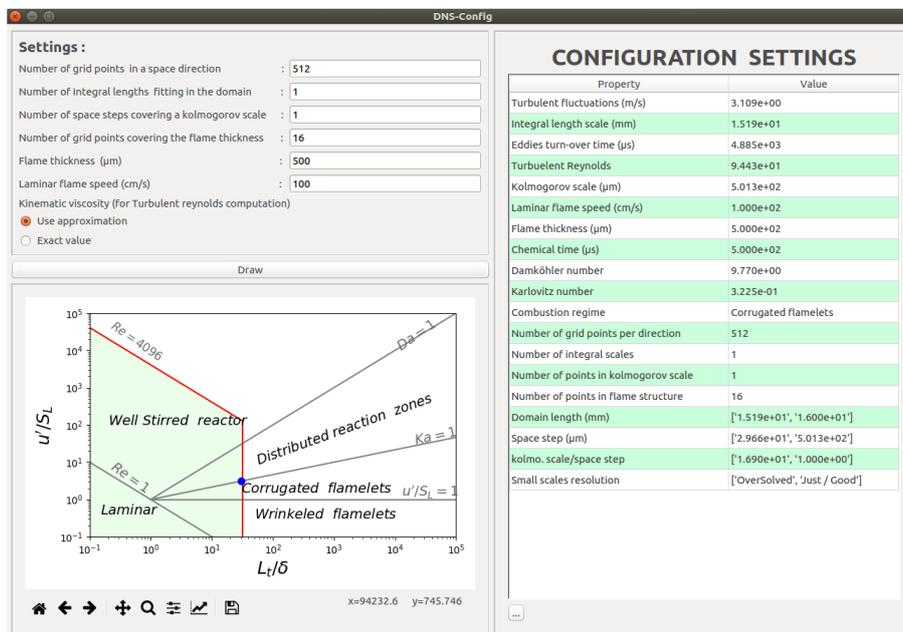


Figure 2.7 – Exemple de configuration de calcul généré par l'outil de dimensionnement

2.9 Outils d'analyse de la combustion turbulente stratifiée

2.9.1 Approches d'analyse de la combustion turbulente

La combustion turbulente résulte de l'interaction de la chimie et de la turbulence. Lorsqu'une flamme interagit avec un écoulement turbulent, la turbulence est modifiée par la combustion en raison des fortes accélérations de l'écoulement, induites par le dégagement de chaleur à travers le front de flamme, mais aussi du fait des grandes variations de la viscosité associées aux changements de température. Ce mécanisme peut produire de la turbulence (turbulence générée par la flamme) ou la dissiper (relaminarisation due à la combustion). D'autre part, la turbulence modifie la structure de la flamme, ce qui peut améliorer la réactivité mais aussi, dans des cas extrêmes, l'inhiber complètement, ce qui entraîne des plissements de la flamme. Analyser, comprendre et estimer l'influence respective de chacun des phénomènes élémentaires requiert l'introduction d'un certain nombre d'outils d'analyse.

L'objectif de cette section est de présenter les outils utilisés dans le cadre de ces travaux ainsi que décrire les démarches adoptées. Pour ce faire, une description générique des principaux concepts liés à la description et la modélisation d'une flamme turbulente prémélangée est proposée. Les relations entre les différentes approches sont également soulignées.

Afin de modéliser le taux de dégagement de chaleur moyen et la vitesse de consommation des espèces chimiques, différentes techniques ont été développées. Ces dernières sont généralement développées à partir d'analyses physiques comparant les échelles caractéristiques chimiques et turbulentes. D'après [Veynante et Vervisch \[50\]](#), la plupart de ces techniques sont dérivées d'une des trois approches suivantes illustrées sur la [Figure 2.8](#) :

► **Analyses géométriques :**

Dans la mesure où les hypothèse de flammelettes sont valables, c'est-à-dire que la flamme étudiée est mince par rapport à toutes les échelles de l'écoulement, la flamme peut être identifiée à une surface géométrique très fine et mobile dans l'espace physique. Dans cette approche, certains champs scalaires sont étudiés en termes de dynamique et de propriétés physiques des surfaces représentées par leurs iso-valeurs. Ces dernières sont considérées comme des surfaces de flamme. En particulier, une flamme prémélangée est décrite comme une interface entre les gaz frais et brûlés.

Parmi les méthodes basées sur cette approche, on mentionnera la G-equation [\[51, 52\]](#) et les analyses associées à la densité de surface de flamme [\[53, 54, 55\]](#).

► **Analyses basé sur le mélange turbulent :**

Il est courant, dans la modélisation de la combustion, de supposer que les échelles de temps caractéristiques des réactions chimiques sont plus faibles devant celles de la turbulence. Cela permet de considérer que la conversion des réactifs en produits est contrôlée par les taux de mélange turbulent. L'objectif des analyses basées sur le mélange scalaire consiste, alors, à modéliser ces taux de mélange turbulent généralement exprimés en termes du taux de dissipation scalaire [\[56\]](#).

► **Analyses statistiques en un point :**

Les informations relatives aux champs scalaires sont collectées en chaque point de

l'écoulement, les valeurs moyennes et les corrélations sont ensuite extraites par la connaissance de la fonction de densité de probabilité (PDF). La restriction de ce genre d'analyse à une valeur particulière du champ scalaire est liée à l'étude des statistiques conditionnées par cette valeur. Cela permet d'établir un lien avec les analyses géométriques où les surfaces de flamme considérées coïncident avec les iso-surfaces de la valeur de conditionnement.

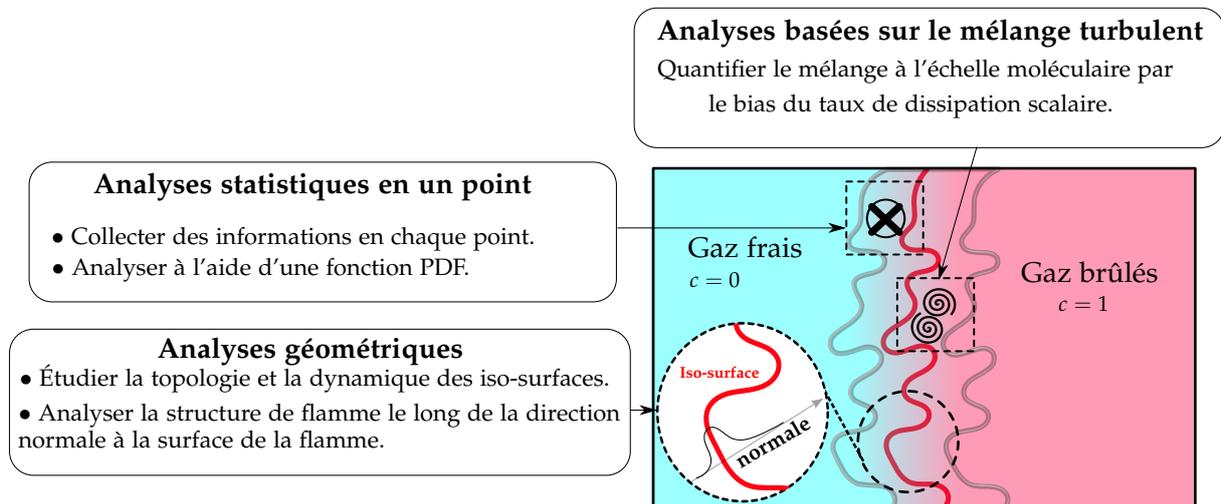


Figure 2.8 – Récapitulatif des différentes techniques servant à modéliser et analyser la combustion turbulente.

Les analyses réalisées dans cette thèse s'inscrivent dans les deux premières approches. Cependant, qu'il s'agisse de l'une ou de l'autre, les deux approches se basent sur les informations relatives à un champ scalaire. La quantité représentée par ce dernier doit être donc définie. Une description détaillée de telles quantités est fournie dans la section suivante.

2.9.2 Variables de composition pour la combustion prémélangée hétérogène

La combustion prémélangée dans les conditions hétérogènes en composition peut être décrite en fonction de deux variables de composition : une variable pour décrire la composition du mélange et une autre pour décrire le progrès des réactions chimiques. Une variable de progrès modifiée est nécessaire pour tenir compte de la variation de la composition du mélange [57, 58, 59]. Cependant, la modification de la variable de progrès est souvent liée à la définition de la fraction de mélange. Une variable de composition supplémentaire sous forme de richesse locale est également définie dans les simulations de la combustion prémélangée des réactifs hétérogène. La richesse est souvent définie en fonction de la fraction de mélange.

2.9.2.1 Fraction de mélange

La fraction de mélange est souvent exprimée en utilisant à la fois les fractions massiques de combustible et de comburant. Pour une DNS utilisant une chimie simple, la fraction de mélange est définie comme :

$$\bar{\zeta} = \frac{Y_F - Y_O/r_s + 1/(r_s + r_s\gamma)}{1 + 1/(r_s + r_s\gamma)} \quad (2.81)$$

où Y_F et Y_O sont respectivement la fraction massique du combustible et du comburant, r_s est le rapport massique stœchiométrique, et γ est le rapport massique azote-oxygène. Dans les simulations faisant appel à une description détaillée de la cinétique chimique, l'équation (2.81) est modifiée pour inclure les radicaux. La fraction de mélange des éléments chimiques est souvent utilisée pour définir la fraction de mélange d'un système multi-espèces. La fraction de mélange élémentaire est obtenue à partir de [60] :

$$\bar{\zeta}_\beta = \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} n_{\beta,\alpha} \frac{W_\beta}{W_\alpha} \quad (2.82)$$

où β fait référence aux éléments (C, H et O), N_{sp} désigne le nombre total d'espèces considérées, W_β la masse atomique de l'élément β et $n_{\beta,\alpha}$ le nombre d'atomes de l'élément β dans l'espèce α . Dans ce cadre la fraction de mélange est définie comme :

$$\bar{\zeta} = \bar{\zeta}_C + \bar{\zeta}_H \quad (2.83)$$

où $\bar{\zeta}_C$ et $\bar{\zeta}_H$ sont les fractions du mélange élémentaire de carbone et d'hydrogène respectivement. Avec les fractions de mélange définies, la richesse locale est donnée par [60, 57, 58] :

$$\Phi = \frac{\bar{\zeta}}{1 - \bar{\zeta}} \frac{1 - \bar{\zeta}^{st}}{\bar{\zeta}^{st}} \quad (2.84)$$

où l'indice st indique une valeur associée à un mélange stœchiométrique. La valeur de $\bar{\zeta}^{st}$ est obtenue en additionnant $\bar{\zeta}_C^{st}$ et $\bar{\zeta}_H^{st}$. En particulier, pour un hydrocarbure C_nH_m , la richesse locale s'exprime comme suit :

$$\Phi = \frac{\bar{\zeta}_C/W_C + \bar{\zeta}_H/4W_H}{2\bar{\zeta}_O/W_O} \quad (2.85)$$

Dans le cas d'un mélange hétérogène, la richesse locale Φ et les fractions de mélange élémentaires $\bar{\zeta}_\beta$ sont des fonctions de l'espace et du temps. L'équation de transport de la fraction de mélange s'écrit :

$$\frac{\partial \rho \bar{\zeta}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k \bar{\zeta}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_{\bar{\zeta}} \frac{\partial \bar{\zeta}}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_{\bar{\zeta}_C} \frac{\partial \bar{\zeta}_C}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_{\bar{\zeta}_H} \frac{\partial \bar{\zeta}_H}{\partial x_k} \right) \quad (2.86)$$

où $D_{\bar{\zeta}}$ est le coefficient de diffusion de la fraction de mélange et $D_{\bar{\zeta}_C}$ et $D_{\bar{\zeta}_H}$ sont les coefficients de diffusion pour les fractions de mélange élémentaires de carbone et d'hydrogène. Le terme de diffusion pour la fraction de mélange peut être séparé en deux termes de diffusion des de carbone et d'hydrogène, mais le coefficient de diffusion pour la fraction de mélange n'est pas la combinaison linéaire des coefficients de diffusion carbone et hydrogène. $D_{\bar{\zeta}} \neq D_{\bar{\zeta}_C} + D_{\bar{\zeta}_H}$.

2.9.2.2 Variable de progrès

Dans l'analyse des flammes prémélangées, qu'elles soient laminares ou turbulentes, il est commode de suivre l'évolution de diverses quantités en utilisant la variable de progrès

de la combustion. La variable de progrès, qui est une fonction de l'espace et du temps, suit de façon monotone l'évolution de la flamme prémélangée de zéro dans les réactifs à l'unité dans les produits. Pour conserver la signification physique de la variable de progrès pour l'analyse quantitative, elle doit être définie en utilisant des quantités physiques comme les fractions massiques des espèces, la température ou encore la masse volumique (volume spécifique). Il existe plusieurs définitions de la variable de progrès dans la littérature, qui sont principalement basées sur la température normalisée ou sur la fraction massique des espèces normalisées.

Étant donné que, dans le présent travail, les calculs DNS permettent d'évaluer les fractions de mélange élémentaires et que cela porte sur la variation de la composition des réactifs, la variable de progrès basée sur les fractions massiques des espèces et de la fraction de mélange est préférée à celle basée sur la température.

Dans cette optique, la variable de progrès c est définie à l'aide des fractions massiques de certaines espèces présentes dans les produits brûlés et de leurs valeurs à l'équilibre sous la forme :

$$c = \frac{\sum_{k \in \mathcal{S}} Y_k}{\sum_{k \in \mathcal{S}} Y_k^{eq}(\xi)} \quad (2.87)$$

où \mathcal{S} est l'ensemble des espèces choisies pour construire la variable de progrès c et $Y_k^{eq}(\xi)$ la fraction massique de l'espèce k à l'équilibre.

Lorsque la variable de progrès c est définie sous la forme donnée par l'équation (2.87), son équation de transport peut être écrite comme ⁸ :

$$\rho \frac{Dc}{Dt} = \nabla \cdot (\rho D_c \nabla c) + \dot{\omega}_c + \mathcal{A}_\xi c \chi_\xi + 2\mathcal{B}_\xi \chi_{c,\xi} + \frac{\mathcal{B}_\xi c}{\rho} \nabla \cdot [\rho (D_c - D_\xi) \nabla \xi] \quad (2.88)$$

avec :

$$\dot{\omega}_c = \frac{\sum_{k \in \mathcal{S}} \dot{\omega}_k}{\sum_{k \in \mathcal{S}} Y_k^{eq}}, \quad \mathcal{A}_\xi = \frac{\rho}{\sum_{k \in \mathcal{S}} Y_k^{eq}} \sum_{k \in \mathcal{S}} \frac{d^2 Y_k^{eq}}{d\xi^2}, \quad \mathcal{B}_\xi = \frac{\rho}{\sum_{k \in \mathcal{S}} Y_k^{eq}} \sum_{k \in \mathcal{S}} \frac{dY_k^{eq}}{d\xi}$$

et D_c est le coefficient de diffusion, défini de manière à ce qu'il vérifie la condition :

$$D_c = \sum_{k \in \mathcal{S}} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_k} \left(\sum_{k \in \mathcal{S}} \frac{\partial Y_k}{\partial x_k} \right)^{-1} \quad (2.89)$$

χ_ξ et $\chi_{c,\xi}$ sont respectivement les termes de dissipation scalaire pour la fraction de mélange et le terme de dissipation scalaire croisée de la variable de progrès et de la fraction de mélange. Ils sont donnés par :

$$\chi_\xi = D_c \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \quad (2.90a)$$

$$\chi_{c,z} = D_c \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \frac{\partial c}{\partial x_k} \quad (2.90b)$$

8. cf. Annexe A pour les détails de son élaboration

Le rôle de ces termes de dissipation scalaire en tant que termes puits ou sources dépend des dérivées partielles des fractions massiques des espèces par rapport à la fraction de mélange.

L'élaboration de l'équation de transport de la variable de progrès fournie dans l'équation (2.88) suit une démarche similaire à celle suivie par Bray *et al.* [61]. En revanche, cette équation propose des termes différents de ceux présents sur l'équation de transport de c élaborée par Bray *et al.* [61]. Le premier et le second terme du membre de droite sont, respectivement, le termes de diffusion et de réaction.

Le terme $\mathcal{A}_\xi \chi_\xi$ est associé aux flammelettes de diffusion, et le terme de dissipation croisée $\mathcal{B}_\xi \chi_{c,\xi}$ pourrait s'écrire également :

$$\mathcal{B}_\xi \chi_{c,\xi} = \mathcal{B}_\xi D_c \mathbf{n}_\xi \cdot \mathbf{n}_c \|\nabla c\| \|\nabla \xi\| = \mathcal{B}_\xi \mathbf{n}_\xi \cdot \mathbf{n}_c (\chi_c \chi_\xi)^{1/2} \quad (2.91)$$

où \mathbf{n}_ξ et \mathbf{n}_c sont des vecteurs unitaires normaux aux isosurfaces de ξ et c , respectivement. Ainsi $\chi_{c,\xi}$ est nulle lorsque ces isosurfaces sont perpendiculaires l'une à l'autre et elle est égale à $(\chi_c \chi_\xi)^{1/2}$ lorsqu'elles sont parallèles. Le terme de dissipation croisée permet de tenir compte des variations de la fraction de mélange à la traversée d'une flamme partiellement prémélangée.

Le dernier terme sur les second membres de l'équation (2.88) résulte de la différence entre les coefficients de diffusion. La contribution de ce terme deviendra plus grande lorsque (i) la différence entre les coefficients de diffusion est suffisamment importante ou (ii) le gradient spatial de la fraction de mélange est de magnitude non négligeable.

Il faut souligner ici que l'équation de transport c exprimée dans l'équation (2.88) est applicable également à la combustion prémélangée, ce qui permettra son utilisation pour les cas homogènes de référence.

2.9.3 Approche géométrique

Comme mentionné plus haut, dans l'approche géométrique, la flamme est identifiée comme une iso-surface mobile en espace et en temps. Dans ce cadre, la densité de surface de la flamme Σ est introduite comme mesure de la surface de flamme disponible δA par unité de volume δV . De ce point de vue, le taux de réaction moyen d'une espèce k peut être modélisé comme suit [62, 63] :

$$\bar{\omega}_k = \bar{\Omega}_k \Sigma \approx \rho_u S_c \Sigma \quad (2.92)$$

où $\bar{\Omega}_k$ est la moyenne du taux de réaction local par unité de surface de flamme intégrée le long de la direction normale à la surface de la flamme et S_c la vitesse de consommation du front de flamme. Cette dernière est liée à la vitesse de déplacement du front de flamme S_d .

Les quantités $\bar{\Omega}_k$ et ρS_d sont liées aux propriétés du front de flamme local, tandis que les effets de convection, diffusion, courbure et étirement par le champ de vitesse turbulent régissent l'évolution de la densité de surface de flamme. Il s'ensuit donc que le principal avantage de cette formulation est de découpler la description chimique de l'interaction flamme/turbulence. Dans ce qui suit, les grandeurs associées à cette formulation seront introduites. Il s'agit de la vitesse de déplacement du front de flamme et de la densité de surface de

flamme.

2.9.3.1 Vitesse de déplacement du front de flamme

La vitesse de déplacement S_d est couramment utilisée pour mesurer la vitesse d'un scalaire réactif-diffusif. La vitesse de déplacement peut être utilisée lorsqu'un champ scalaire correctement défini est disponible. En utilisant le cadre de la méthode *level-set*, la forme cinématique de l'équation de la fraction massique du combustible sur une iso-surface déterminée peut être exprimée comme :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + V_{f,k} \frac{\partial c}{\partial x_k} = 0 \quad (2.93)$$

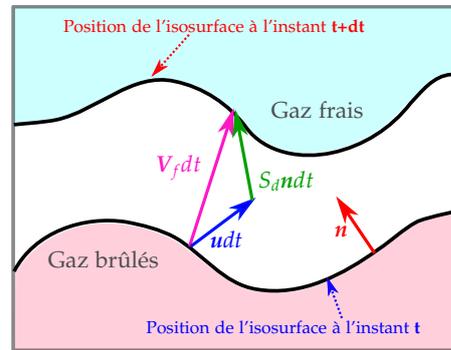
où $V_{f,k}$ est la vitesse absolue de l'iso-surface, qui est la somme de la composante convective u_k et de sa vitesse de propagation par rapport au gaz $S_d n_k$:

$$V_{f,k} = u_k + S_d n_k \quad (2.94)$$

Ici, n_k représente chacune des trois composantes du vecteur normal unitaire aux iso-contours de c dirigé vers les gaz frais :

$$n_k = \frac{-1}{\|\nabla c\|} \frac{\partial c}{\partial x_k} \quad (2.95)$$

Figure 2.9 – Une illustration en deux dimensions de la vitesse de déplacement



En exprimant le terme de diffusion moléculaire comme la somme de ses composantes tangentielle et normale :

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_c \frac{\partial c}{\partial x_k} \right) = -n_k \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho D_c \|\nabla c\|) - \rho D_c \frac{\partial n_k}{\partial x_k} \quad (2.96)$$

une expression de la vitesse de déplacement de la flamme peut être obtenue en substituant l'équation (2.88) dans les équations (2.93) et (2.94) :

$$S_d = \frac{-n_k}{\rho \|\nabla c\|} \frac{\partial (\rho D_c \|\nabla c\|)}{\partial x_k} - D_c \frac{\partial n_k}{\partial x_k} + \frac{\dot{\omega}_c}{\rho \|\nabla c\|} \quad (2.97)$$

$$+ \frac{\mathcal{A}_{\xi} c \chi_{\xi}}{\rho \|\nabla c\|} + \frac{2\mathcal{B}_{\xi} \chi_{c,\xi}}{\rho \|\nabla c\|} + \frac{\mathcal{B}_{\xi} c}{\rho^2 \|\nabla c\|} \nabla [\rho (D_c - D_{\xi}) \nabla \xi] \quad (2.98)$$

La vitesse de déplacement S_d est composée de six contributions. Les trois premiers termes, qui se retrouvent également dans le cas du prémélange homogène, sont les composantes normale, tangentielle et de réaction S_n , S_t et S_r respectivement. Les trois derniers termes proviennent du couplage avec la fraction de mélange et sont associés au terme de dissipation scalaire de la fraction de mélange $S_{\chi_{\xi}}$, à celui de dissipation scalaire croisée S_{cd} et à un terme de diffusion supplémentaire $S_{\text{diff},\xi}$.

- La composante normale S_n peut être également exprimée en :

$$S_n = -n_k \left[\frac{\partial D_c}{\partial x_k} + D_c \frac{\partial \ln(\rho)}{\partial x_k} + D_c \frac{\ln(\|\nabla c\|)}{\partial x_k} \right] \quad (2.99)$$

- La composante tangentielle est liée à la courbure locale κ comme :

$$S_t = -2D_c \kappa \quad (2.100)$$

où la courbure moyenne locale κ est définie comme la moyenne arithmétique des deux courbures principales pour l'iso-surface :

$$\kappa = \frac{1}{2} \frac{\partial n_k}{\partial x_k} \quad (2.101)$$

- Le terme de dissipation croisée peut être exprimé comme suit :

$$S_{cd} = \frac{2\mathcal{B}_{\xi} \chi_{c,\xi}}{\rho \|\nabla c\|} = \frac{2\mathcal{B}_{\xi} (D_c \chi_{\xi})^{1/2}}{\rho} \mathbf{n}_{\xi} \cdot \mathbf{n}_c \quad (2.102)$$

- Le terme de diffusion supplémentaire est lié au terme de diffusion moléculaire de la fraction de mélange par :

$$S_{\text{diff},\xi} = \frac{\mathcal{B}_{\xi} c}{\rho^2 \|\nabla c\|} \nabla [\rho (D_c - D_{\xi}) \nabla \xi] = \frac{\mathcal{B}_{\xi} c}{\rho^2 \|\nabla c\|} \left(\nabla [\rho D_c \nabla \xi] - \frac{D \rho \xi}{Dt} \right) \quad (2.103)$$

Ceci montre que le terme de diffusion supplémentaire est couplé avec la dérivée totale de la fraction de mélange. La contribution de ce terme à S_d devient faible lorsqu'il est évalué sur une iso-surface située à proximité des gaz frais. Si la fraction de mélange est définie de telle sorte que $D_c - D_{\xi}$ soit grand ou que son gradient spatial devienne grand ou les deux, ce terme de diffusion supplémentaire devient non trivial.

2.9.3.2 Densité de surface de flamme

Bien que leurs équations de transport sont similaires, la densité de surface de flamme Σ et la fonction densité de surface σ (ou encore densité de surface de flamme généralisée) sont deux quantités distinctes. Cette différence est explicitée dans ce qui suit.

La fonction de densité de surface (SDF) est introduite comme la quantité de surface par unité de volume [55]. Elle est définie comme :

$$\sigma = \|\nabla c\| \quad (2.104)$$

L'équation de bilan pour la fonction de densité de surface peut être obtenue en multipliant l'équation cinématique (2.94) par ∇c , puis en divisant par la fonction de densité de surface $\|\nabla c\|$. L'équation de transport pour σ est donnée comme suit :

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\sigma) = \underbrace{(\nabla \cdot \mathbf{u} - \mathbf{nn} : \nabla \mathbf{u})\sigma}_{\text{étirement}} + \underbrace{S_d \nabla \mathbf{n}\sigma}_{\text{courbure}} - \underbrace{\nabla (S_d \sigma \nabla \mathbf{n})}_{\text{propagation}} \quad (2.105)$$

La densité de surface de flamme (FSD) est définie, quant à elle, comme la surface de flamme par unité de volume [64] :

$$\Sigma(c^*, t) = \overline{\|\nabla c\| \delta(c - c^*)} = \langle \|\nabla c\| | c^* \rangle \bar{P}(c^*, t) \quad (2.106)$$

où c^* est la valeur de c associée à l'iso-surface prescrite, $\langle \|\nabla c\| | c^* \rangle$ est la moyenne conditionnée de $\|\nabla c\|$ par $c = c^*$, $\bar{P}(c^*, t)$ est la probabilité de trouver $c(\mathbf{x}, t) = c^*$ à une position donnée \mathbf{x} , et $\delta(c - c^*)$ est une mesure locale de la probabilité définie comme :

$$\delta(c(\mathbf{x}, t) - c^*) = \begin{cases} 1/\Delta c^* & \text{si } |c(\mathbf{x}, t) - c^*| < \Delta c^*/2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.107)$$

avec Δc^* le pas de discrétisation suivant c^* . Par définition, la moyenne de la mesure locale de la probabilité $\delta(c(\mathbf{x}, t) - c^*)$ est la probabilité $\bar{P}(c^*, t)$:

$$\bar{P}(c^*, t) = \overline{\delta(c(\mathbf{x}, t) - c^*)} \quad (2.108)$$

L'équation de transport pour Σ a été obtenue par Pope [64] en s'appuyant sur des principes de la géométrie différentielle. Candel et Poinso [54] présentent une variante de démonstration utilisant le théorème de transport du flux d'un rapport surface/volume de flamme élémentaire ($\delta A / \delta V$)

Elle est donnée par :

$$\underbrace{\frac{\partial \Sigma}{\partial t}}_{\mathcal{T}_1} + \underbrace{\nabla \cdot (\langle \mathbf{u} \rangle_s \Sigma)}_{\mathcal{T}_2} = \underbrace{\langle \nabla \cdot \mathbf{u} - \mathbf{nn} : \nabla \mathbf{u} \rangle_s \Sigma}_{\mathcal{T}_3} - \underbrace{\nabla \cdot (\langle S_d \mathbf{n} \rangle_s \Sigma)}_{\mathcal{T}_4} + \underbrace{\langle S_d \nabla \mathbf{n} \rangle_s \Sigma}_{\mathcal{T}_5} \quad (2.109)$$

où chaque terme \mathcal{T}_k représente un effet physique, notamment :

- \mathcal{T}_1 : Effets instationnaires.
- \mathcal{T}_2 : Convection de la surface de flamme.
- \mathcal{T}_3 : Étirement tangentielle sur la surface de flamme.
- \mathcal{T}_4 : Convection du front de flamme due à la propagation normale.
- \mathcal{T}_5 : Effets combinés de propagation et de courbure .

Bien que les équations de transport FSD et SDF soient similaires, l'équation de bilan de FSD est valide sur l'iso-surface $c = c^*$, alors que l'équation de transport de la SDF est une équation de champ pour les régions où $\|\nabla c\| \neq 0$.

2.9.4 Approche basée sur le mélange turbulent

Pope [65] en déduit que la FSD Σ d'une iso-surface $c = c^*$ peut s'écrire en introduisant le taux de dissipation scalaire χ_c sous la forme :

$$\Sigma(c^*, t) = \sqrt{\frac{\chi_c}{D_c}} \bar{P}(c^*, t) \quad (2.110)$$

Compte tenu de l'équation (2.92), il en résulte que le taux de dissipation scalaire (SDR) est également une quantité qui peut être directement liée au taux de réaction moyen.

En effet, le taux de dissipation scalaire mesure directement la vitesse de décroissance des fluctuations par micromélange turbulent. Or, la vitesse de combustion dépend du contact entre les réactifs, ce qui implique une présence directe ou indirecte du taux de dissipation scalaire dans l'expression du taux de réaction moyen. En particulier, dans un écoulement contenant une flamme prémélangée, le mélange turbulent se produit entre les gaz frais et brûlés. On peut alors s'attendre à un très fort couplage entre les phénomènes de mélange et la réaction chimique. Dans un cas extrême où la chimie est supposée infiniment rapide, la combustion est limitée par le mélange et ce couplage se manifeste sous la forme d'une relation de proportionnalité entre le taux de réaction moyen et le taux de dissipation scalaire.

Cette analyse préliminaire montre que le taux de dissipation des scalaires est un concept essentiel pour la combustion turbulente et, directement ou indirectement, χ_c apparaît dans tous les outils utilisés pour modéliser les flammes. La principale pierre d'achoppement dans la modélisation de la combustion turbulente et les ponts entre les différents concepts de modélisation émergent à travers le taux de dissipation scalaire. De ce fait, l'approche ayant pour base cette quantité est également considérée dans le cadre de cette thèse. Ainsi, l'équation de transport du taux de χ_c est d'abord considérée et servira de point de départ pour introduire les rudiments de cette approche.

Dans le contexte des flammes prémélangées, à partir de l'équation de transport de la variable de progrès dans des cas homogènes en composition c'est à dire :

$$\rho \frac{Dc}{Dt} = \dot{\omega}_c + \nabla \cdot (\rho D_c \nabla c) \quad (2.111)$$

l'équation de transport du SDR a été dérivée. Plusieurs formes de cette dernière existent dans la littérature on en cite plus particulièrement celles de Borghi [66], Mantel et Borghi [67], Mura et Borghi [68] et Swaminathan et Bray [69], qui peuvent se mettre sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \rho \frac{D\chi_c}{Dt} &= \nabla \cdot (\rho D \nabla \chi_c) - 2D_c \frac{Dc}{Dt} \nabla \rho \cdot \nabla c - 2\rho D_c \nabla c \nabla c : \nabla(\mathbf{u}) + 2D_c \nabla \dot{\omega}_c \cdot \nabla c \\ &\quad - 2\rho D_c^2 \text{tr} \left[(\nabla \otimes \nabla c)^T (\nabla \otimes \nabla c) \right] + \mathcal{T}_D \end{aligned}$$

avec :

$$\mathcal{T}_D = 2D_c \nabla c \cdot \nabla (\rho D_c) \Delta c + 2D_c \nabla c \cdot \nabla c : (\nabla \otimes \nabla (\rho D_c))$$

$$-\nabla(\rho\chi_c\nabla D_c) - 2\rho D_c\nabla D_c \cdot \nabla(|\nabla c|^2) + \rho|\nabla c|^2\frac{D(D_c)}{Dt}$$

Cependant, ces équations ne prennent pas en compte les hétérogénéités de composition : les termes supplémentaires liés aux variations de composition des réactifs dans l'équation de la variable de progrès sont négligés. À partir de l'équation de transport généralisée de c donnée par l'équation (2.88), il est également possible d'obtenir une équation de transport du SDR prenant en compte les effets de la variation locale de la composition. Par contre, cela mène à l'introduction de plusieurs termes supplémentaires dans cette dernière, la rendant très complexe aussi bien du point de vue analytique que celui de l'interprétation physique.

Dans le cadre de la modélisation du SDR pour des flammes prémélangées homogènes, [Chakraborty et al. \[70\]](#) ont introduit une autre forme pour l'équation de transport du SDR, qui repose sur l'introduction de la vitesse de déplacement S_d et de la SDF $\|\nabla c\|$:

$$\begin{aligned} \rho\frac{D\chi_c}{Dt} = & -2\rho D_c\nabla c\nabla c : \nabla\mathbf{u} + 2\rho S_d\nabla\cdot\mathbf{n}\chi_c - 2D_c\nabla(\rho S_d\|\nabla c\|\mathbf{n}) + 2\rho S_d\mathbf{n} \cdot \nabla\rho\chi_c \\ & + \rho\|\nabla c\|^2\frac{D(D_c)}{Dt} \end{aligned} \quad (2.112)$$

Un des avantages de cette formulation est le fait qu'elle est valide également pour des flammes prémélangées stratifiées⁹ puisque les termes associés aux hétérogénéités de composition sont inclus dans la vitesse de déplacement du front de flamme. Cette équation peut se réarranger sous la forme suivante :

$$\rho\frac{D\chi_c}{Dt} = \underbrace{-2\rho D_c\nabla c\nabla c : \nabla\mathbf{u}}_{\mathcal{T}_1} + \underbrace{4\rho S_d\kappa\chi_c}_{\mathcal{T}_2} + \underbrace{2S_d\mathbf{n} \cdot \nabla\rho\chi_c}_{\mathcal{T}_3} - \underbrace{\frac{2}{\sigma}\nabla(\rho S_d\sigma\mathbf{n})\chi_c}_{\mathcal{T}_4} + \underbrace{\rho\frac{D\ln(D_c)}{Dt}\chi_c}_{\mathcal{T}_5} \quad (2.113)$$

où chaque terme \mathcal{T}_k représente un effet physique, notamment :

- \mathcal{T}_1 : Effets d'interaction turbulence scalaire.
- \mathcal{T}_2 : Effets combinés de propagation et de courbure.
- \mathcal{T}_3 : Effets d'expansion ou de dilatation thermique.
- \mathcal{T}_4 : Convection du front de flamme due à la propagation normale.
- \mathcal{T}_5 : Effets de variation de la diffusivité moléculaire.

2.10 Récapitulatif

Ce chapitre a permis d'introduire les notions relatives à l'aérothermochimie et les relations constitutives des phénomènes de transport. Le formalisme général de la simulation numérique des écoulements réactifs à faible nombre de Mach implémenté dans le code *Asphodele* a été également exposé. *Asphodele* a été brièvement décrit avec ses méthodes numériques, en mettant l'accent sur l'optimisation de la résolution de l'équation de Poisson. Ensuite, les régimes

9. Une démonstration de l'obtention de cette équation est rapportée sur l'Annexe B

et les échelles de combustion turbulente ont été présentés afin de pouvoir introduire les critères de résolution d'une configuration représentative telle que celle utilisée dans cette étude. Enfin, quelques outils d'analyse des flammes stratifiées turbulentes ont été présentés et adaptés pour leur utilisation sur les configurations DNS de flammes laminaires et turbulentes en présence d'hétérogénéités de composition.

Revue des analyses de flammes en propagation dans un milieu stratifié

Sommaire

3.1	Introduction	50
3.2	Terminologie et structure des flammes stratifiées	52
3.2.1	Flammes hétérogènes, partiellement prémélangées et stratifiées	52
3.2.2	Structure de flamme partiellement prémélangée	52
3.3	Propagation des flammes stratifiées	53
3.3.1	Variations de la vitesse de la flamme locale et de la limite d'inflammabilité	53
3.3.2	Impact sur la structure de la flamme et de la topologie	57
3.3.3	Variation du taux de réaction local et global	63
3.4	Conclusion	67

3.1 Introduction

LES flammes peuvent être définies comme des ondes auto-entretenues par une série de réactions chimiques exothermiques et endothermiques entre un combustible et un comburant. Traditionnellement, elles sont classées en deux grandes catégories suivant que les réactifs sont mélangés à l'échelle moléculaire (ou non) avant l'allumage. Nous parlons de flammes non prémélangées ou de diffusion lorsque le combustible et le comburant sont initialement séparés et se rencontrent sur le front de réaction, où les réactions se produisent simultanément avec l'inter-diffusion continue des espèces. En revanche, dans les flammes prémélangées, les réactifs sont complètement mélangés au niveau moléculaire avant toute réaction chimique significative. Si ce mélange homogène de combustible et de comburant est allumé et que le rapport des quantités de carburant et de comburant se situe dans les limites d'inflammabilité, une flamme se propage dans le mélange. La flamme qui se propage sépare alors deux états stables : (i) réactifs frais et (ii) produits brûlés.

Les définitions classiques des flammes prémélangées et non prémélangées représentent des cas extrêmes et idéalisées. Dans de nombreux dispositifs pratiques, les flammes fonctionnent dans un régime intermédiaire dans lequel les réactifs sont partiellement prémélangés ou stratifiés. Dans ce cas, la flamme se propage à travers un mélange de réactifs où la composition varie localement, modifiant à la fois le comportement global du système de combustion (*i.e.* à l'échelle de la flamme ou du domaine) ainsi que les propriétés de la zone de réaction le long du front de flamme (à l'échelle de l'épaisseur de flamme instantanée).

En particulier, c'est le cas des chambres de combustion des turbines à gaz et des dispositifs de propulsion hypersonique [71, 72, 73, 74], ainsi que des moteurs à charge stratifiée [75, 76, 77, 78]. Dans ces dispositifs, le carburant est directement injecté dans la chambre de combustion et l'allumage et la propagation des fronts réactifs se font pendant le processus de mélange. Cet état de fait est attribuable à la présence de variations spatiales importantes de la richesse, où la stratification à grandes et petites échelles se produisent simultanément. Alors que les variations de richesse à petites échelles sont dues à la turbulence et à la vaporisation incomplète du combustible liquide, les gradients spatiaux à grandes échelles (*i.e.* dans le jet de carburant) sont utilisés pour réduire les émissions de polluants et la consommation de carburant [79].

Il a été démontré que l'approche par combustion stratifiée engendre une pression effective moyenne supérieure et une meilleure efficacité thermique, avec des limites d'inflammabilité inférieures à celles du cas homogène présentant la même richesse moyenne. Comme corollaire de cela, des réductions de la consommation de carburant et des émissions polluantes (gaz à effet de serre, oxydes d'azote (NOx) et suie), ont été réalisées. En outre, des gains significatifs de performances des moteurs ont été obtenus.

Parmi les premiers examens détaillés de la combustion stratifiée, on note les travaux de Cho et Santavicca [80] et Zhou *et al.* [81], qui ont spécifiquement examiné l'effet de l'hétéro-

généité des réactifs (l'amplitude des fluctuations spatiales et temporelles de la composition du mélange) sur les propriétés des flammes. Ils ont conclu que le degré et l'amplitude des homogénéités affectent les propriétés globales de combustion et modifient les caractéristiques des flammes locales lorsque des poches voisines de concentrations différentes de réactifs interagissent. Cette dernière observation a des implications significatives, car elle suggère que le comportement attendu des flammes locales, ou flammes locales, ne pouvait être prédit uniquement à partir des propriétés locales du milieu réactif et des caractéristiques de l'écoulement turbulent, contrairement à la théorie des flammes généralement admise [82], sur laquelle sont basés de nombreux modèles numériques.

En effet, les modèles de flammes reposent sur la notion selon laquelle, pour des valeurs élevées du nombre de Damköhler et des valeurs faibles du nombre de Karlovitz, une flamme turbulente peut être considérée comme une suite de flammes laminaires asymptotiquement minces [83] pouvant être étirées et/ou contraintes par des structures turbulentes dans un champ d'écoulement [84]. Cela implique que pour un ensemble donné de caractéristiques de turbulence et de propriétés des scalaires réactifs, le comportement des flammes prémélangées peut être prédit. Une telle prédiction se base sur l'hypothèse stipulant que les interactions entre les régions de flammes voisines sont négligeables. Cependant, les études de [Cho et Santavicca](#) [80] et [Zhou et al.](#) [81] et d'autres études récentes ont remis en question cette hypothèse.

En dépit de l'importance du prémélange partiel pour les dispositifs de combustion pratiques ainsi que l'optimisation potentielle qu'offre un tel procédé, peu de travaux fondamentaux ont tenté de quantifier les effets de la stratification sur les propriétés locales des flammes turbulentes. En particulier, d'un point de vue expérimental, la difficulté réside dans la mise en œuvre d'une expérience capable de reproduire avec précision le prémélange partiel et de le coupler aux diagnostics nécessaires pour évaluer ces flammes complexes. D'un point de vue numérique, des difficultés liées aux modèles ont été présentées et des corrections ont été proposées pour la combustion stratifiée, mais elles souffrent d'un manque de généralité.

Un certain nombre de travaux se sont intéressés à cette thématique. En dépit des conclusions, parfois contradictoires, trois effets de la stratification sur le comportement de la flamme sont communément répertoriés et acceptés. Il s'agit de la : (i) variation de la vitesse de la flamme locale et de la limite d'inflammabilité, (ii) modification de la structure et de la topologie de la flamme et (iii) variation de la vitesse de réaction locale et globale. Ce chapitre a pour objectif de synthétiser les principales conclusions des recherches récentes conduites sur ce sujet plutôt qu'un examen détaillé de littérature. D'abord, quelques notions de base relatives à la stratification seront introduites, ensuite, les trois effets évoqués ci-dessus seront discutés à la lumière des résultats de la littérature considérée en s'inspirant de la revue réalisée par [Lipatnikov](#) [85].

3.2 Terminologie et structure des flammes stratifiées

3.2.1 Flammes hétérogènes, partiellement prémélangées et stratifiées

Tout au long de ce manuscrit de thèse, le terme *hétérogène* fait référence à l'existence de gradients de composition (plutôt que de vitesse).

Le terme *partiellement prémélangée* réfère ici à des situations dans lesquelles un point de l'écoulement fluide est hétérogène sur le plan de la composition couvrant une large gamme de fractions de mélange comprenant une zone inflammable ainsi qu'une zone non inflammable. Dans ce type d'écoulement, le mélange continue à se produire dans ce point de l'écoulement de sorte que des zones réactionnelles de type diffusion pouvant coexister avec des couches de propagation prémélangées à leur proximité étroite.

En particulier, ce terme (*i.e.* "partiellement prémélangée") est utilisé dans le contexte du "pré-mélange partiel hétérogène" impliquant l'existence de gradients de composition et/ou de température et, pour simplifier, les deux termes "hétérogénéité" et "pré-mélange partiel" seront utilisés ici de manière interchangeable.

Les flammes stratifiées peuvent être considérées comme un cas particulier de flamme de pré-mélange partiel où les échantillons de fluide associés se situent dans les limites d'inflammabilité de sorte que le front de réaction se propage dans une plage de richesse.

3.2.2 Structure de flamme partiellement prémélangée

Dans la section introductive, les flammes stratifiées et plus généralement les flammes partiellement prémélangées sont décrites comme des flammes de nature *intermédiaire* entre les deux régimes classiques de prémélange et de diffusion. Ceci suggère que la flamme partiellement prémélangée aura une structure qui combine à la fois certaines caractéristiques d'une flamme prémélangée et d'autres d'une flamme non prémélangée.

Des travaux antérieurs ont mis en évidence un tel prédicat, en réalisant des flammes laminaires partiellement prémélangées dans un environnement de laboratoire en réunissant deux courants de fluide :

- un courant riche C_r , contenant du combustible avec un peu d'oxydant ;
- un courant pauvre C_l , portant principalement un oxydant avec un peu de combustible.

Les courants riche et pauvre C_r et C_l créent un champ partiellement prémélangé caractérisé par la présence d'une large gamme de richesses. Dans le cas où la richesse stœchiométrique se situe incluse dans cette gamme, la propagation de la flamme résultante génère une structure appelée flamme triple (*cf.* Figure 3.1).

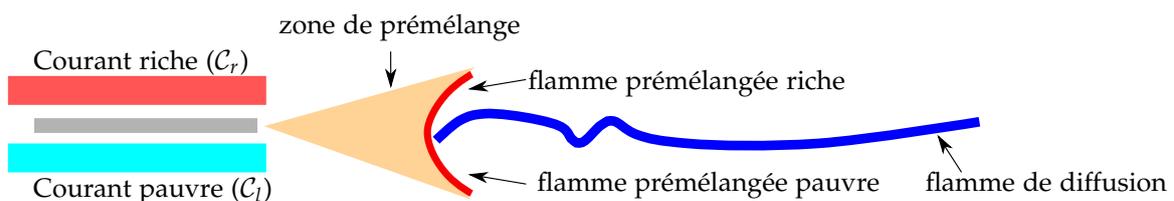


Figure 3.1 – Schéma générique d'une flamme triple

Le bord d'attaque de la flamme, appelé point triple, se propage le long d'une surface proche du mélange stœchiométrique. Sur le côté pauvre (riche) de cette surface, se propage une branche de flamme prémélangée pauvre (riche). Les deux branches se propagent avec une vitesse de combustion inférieure à celle du point stœchiométrique. Derrière le point triple, une flamme de diffusion se développe. Au sein de cette dernière, des espèces intermédiaires ou des radicaux tels que H_2 et CO diffusent à partir de la branche de la flamme prémélangée riche, alors que l'oxygène restant diffuse depuis la branche de flamme prémélangée pauvre.

La flamme triple a été abondamment étudiée dans la littérature, car elle constitue un bloc élémentaire dans la compréhension et la modélisation de la combustion partiellement prémélangée. En particulier, elle a permis d'aboutir à une première caractérisation de la structure de cette dernière. Une telle caractérisation pourrait être illustrée par une représentation monodimensionnelle d'une flamme partiellement prémélangée dans l'espace de la fraction de mélange (cf. Figure 3.2).

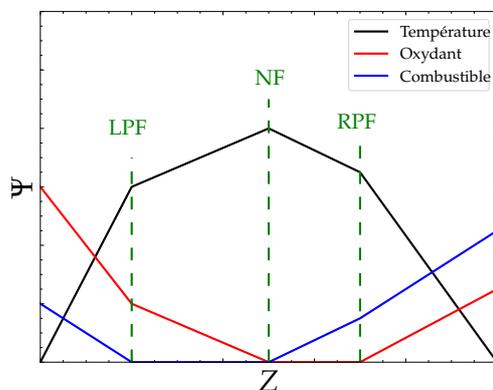


Figure 3.2 – Représentation d'une structure de flamme partiellement prémélangée dans l'espace de fraction de mélange. L'axe vertical (Ψ) représente la température ou la fraction massique des principales espèces de produits (telles que H_2O ou CO_2). Le LPF et le RPF désignent respectivement des flammes prémélangées pauvres et riches, alors que NF désigne une flamme non prémélangée.

3.3 Propagation des flammes stratifiées

La structure générale d'une flamme stratifiée, présentée dans la section précédente, met en évidence la complexité de la structure de ce type de flamme par rapport à celles rencontrées dans les cas classiques idéalisés de prémélange ou de diffusion. Les études de la propagation d'une flamme dans un milieu stratifié sont toujours d'actualité puisqu'elles restent moins avancées que celles réalisées sur des flammes prémélangées ou de diffusion. Ces vingt dernières années, la compréhension et la maîtrise des flammes stratifiées ont suscité la curiosité d'un grand nombre de chercheurs dans la communauté de la combustion. Dans cette section, on se propose d'exposer quelques résultats de la littérature quant aux effets de la stratification sur la propagation de flamme.

3.3.1 Variations de la vitesse de la flamme locale et de la limite d'inflammabilité

3.3.1.1 Extension des limites d'inflammabilité

Les limites d'inflammabilité délimitent la gamme de richesse dans laquelle une réaction de combustion est possible lorsqu'une source d'inflammation externe est introduite. Ces limites sont souvent données en termes de deux richesses de mélange (riche et pauvre) à une

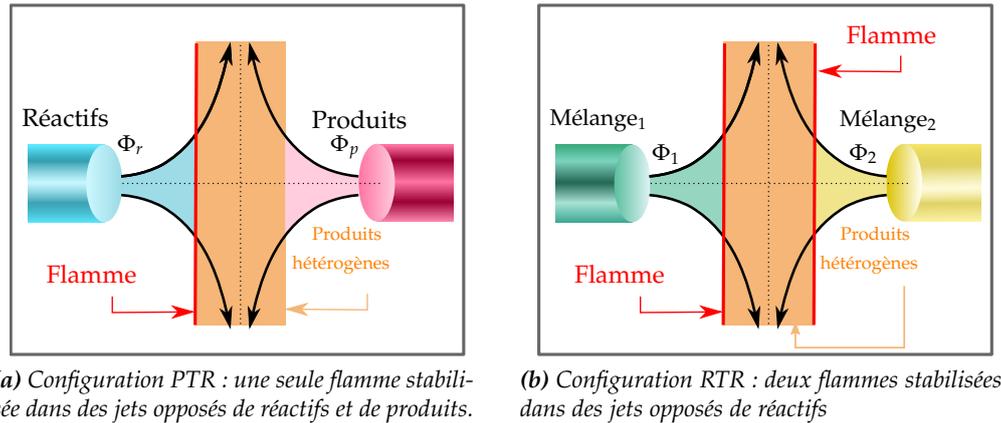


Figure 3.3 – Configurations de flammes à contre-courant : (a) PTR (Products To Reactants) et (b) RTR (Reactants To Reactants)

pression et une température spécifiées. Les limites d'inflammabilité ne sont pas absolues, mais dépendent aussi du comburant impliqué (par exemple, les limites sont beaucoup plus larges dans l'oxygène pur que dans l'air), de la pression et de la température du mélange. Dans cette optique, l'introduction des hétérogénéités de composition ou de température est susceptible d'induire des modifications : un éventuel rétrécissement mais aussi dans certains cas une extension des limites d'inflammabilité.

L'extension des limites d'inflammabilité sous l'effet de la stratification a été très tôt observée et documentée dans plusieurs travaux de recherche antérieurs. En effet, en étudiant la croissance d'un noyau de flamme hémisphérique laminaire dans un mélange pauvre de propane-air et d'hydrogène-air stratifiés, [Girard et al. \[86\]](#) ont mis en évidence une extension de la limite d'inflammabilité pauvre pour l'hydrogène dans les cas stratifiés.

Cet effet pourrait se manifester par une stabilisation de la flamme même dans des conditions de richesse défavorables, comme par exemple, dans le brûleur hétérogène de Sydney où les hétérogénéités du mélange amélioreraient la stabilité de la flamme [87, 88]. De même, [Lauvergne et Egolfopoulos \[89\]](#) et [Sankaran et Im \[90\]](#) ont étudié numériquement, en utilisant des mécanismes chimiques détaillés, des flammes mono-dimensionnelles stationnaires de propane-air et de méthane-air respectivement et stabilisées en s'appuyant sur la configuration à contre-courant RTR (*reactant to reactant*) (cf. [Figure 3.3b](#)). À l'issue de ces études, [Lauvergne et Egolfopoulos \[89\]](#) et [Sankaran et Im \[90\]](#) ont souligné que la flamme peut se maintenir, même si la richesse se situe bien au-dessous de la limite d'inflammabilité.

Il convient tout de même de noter que l'introduction d'une stratification n'est pas nécessairement accompagnée d'une extension des limites d'inflammabilité. En effet, [Sweeney et al. \[91, 92\]](#) n'ont pas observé d'extension de la limite d'inflammabilité pauvre dans leurs expériences avec des flammes turbulentes stratifiées globalement pauvres stabilisées en utilisant le brûleur de Cambridge.

3.3.1.2 Comportement de la vitesse de propagation

La vitesse de flamme est très sensible à la composition et à la température du milieu au sein duquel la flamme se propage, qu'il soit laminaire ou turbulent, ou encore homogène ou hétérogène. À ce titre, l'étude de la sensibilité de la vitesse de flamme dans des milieux hétérogènes a suscité la curiosité de plusieurs chercheurs. Les premières investigations dans ce sujet ont été menées par [Ishikawa \[93\]](#). Dans les études rapportées dans les références [\[93, 94\]](#), [Ishikawa](#) a construit une chambre de combustion où une couche de mélange, caractérisée par un gradient mono-dimensionnel de richesse, se développe entre les couches du combustible (CH_4) et de l'oxydant. L'allumage de l'écoulement donne lieu à la propagation d'une flamme laminaire stratifiée. La flamme se propage principalement au voisinage de la couche stœchiométrique et la surface moyenne de la flamme atteint une forme incurvée en raison des différences des vitesses locales de la flamme. En effet, les vitesses locales de flamme sont directement liées aux richesses locales, de sorte que la flamme se propage plus rapidement au voisinage de la stœchiométrie et qu'à partir de ce point la vitesse diminue jusqu'à l'extinction.

Ainsi, sous certaines conditions, introduire une stratification résulte en une augmentation ou une réduction de la vitesse de propagation. En particulier,, [Pires Da Cruz et al. \[95\]](#) ont simulé la propagation d'une flamme méthane-air adiabatique mono-dimensionnelle soumise à un changement progressif du rapport d'équivalence $\Phi(x, t = 0)$ dans les gaz frais. Les quatre cas suivants ont été étudiés ;

1. $0.35 \leq \Phi \leq 1.0$ avec $d\Phi/dx < 0$.
2. $1.0 \leq \Phi \leq 2.5$ avec $d\Phi/dx > 0$.
3. $1.0 \leq \Phi \leq 1.5$ avec $d\Phi/dx < 0$.
4. $\Phi = \begin{cases} 1.0 \leq \Phi \leq 2.5 \text{ avec } d\Phi/dx > 0, \text{ pour } x \in [0, x_1]. \\ 0.0 \leq \Phi \leq 2.5 \text{ avec } d\Phi/dx < 0, \text{ pour } x \in [x_1, x_2]. \\ 0.0 \leq \Phi \leq 1.0 \text{ avec } d\Phi/dx > 0, \text{ pour } x \in [x_2, x_3]. \end{cases}$

où x_1, x_2 et x_3 sont des positions spatiales déterminées. En raison des processus de la diffusion moléculaire, les discontinuités de $\Phi(x, t = 0)$ sont lissées lorsque la flamme atteint la région hétérogène en Φ . Les calculs ont été effectués en utilisant un mécanisme chimique détaillé qui comprend 32 espèces et 177 réactions. Afin de caractériser la composition du mélange instantanée, la richesse $\Phi^*(t)$, évaluée au point correspondant au dégagement de chaleur maximal, est utilisée. Les résultats calculés à chaque instant t ont été comparés aux résultats obtenus dans les cas homogènes caractérisés par $\Phi = \Phi^*(t)$; c'est-à-dire à deux instants différents, deux cas de référence différents ont été choisis.

Quand la richesse $\Phi(x, t = 0)$ est réduite de l'unité à 0.35 (cette valeur est inférieure à la limite d'inflammabilité), on observe à la fois une augmentation de $S_L[\Phi^*(t)]$ par rapport au cas homogène, caractérisé par $\Phi = \Phi^*(t)$, et une extension de la limite d'inflammabilité pauvre. Ces effets sont attribués à une augmentation de la température et des fractions massiques locales de H et H_2 .

Lorsque $\Phi(x, t = 0)$ est réduite de 1.5 à 1.0, la vitesse de propagation $S_L[\Phi^*(t)]$ stratifiée est également plus élevée que son équivalent homogène en raison de l'augmentation des concentrations locales de H et de H_2 dans le cas stratifié. En effet, le flux de H_2 frais prove-

nant de produits plus riches (cf. Figure 3.4) a tendance à augmenter les valeurs des fractions massiques de H et de H₂.

Cependant, quand $\Phi(x, t = 0)$ est augmentée de 1.0 à 2.5, $S_L[\Phi^*(t)]$ reste inférieure à son homologue homogène S_L . Cet effet est attribué à une concentration significativement plus élevée de H₂ dans la zone de réaction de la flamme homogène.

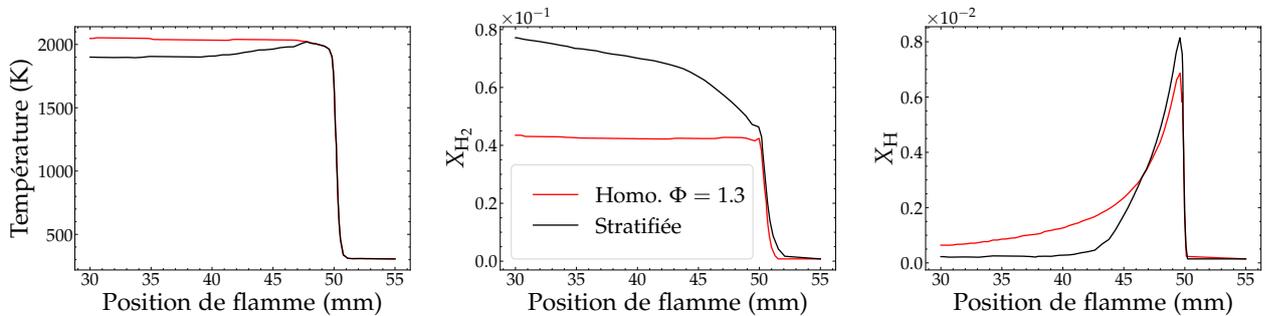


Figure 3.4 – Profils de température et de fractions molaires de H₂ et H, calculées par Pires Da Cruz et al. [95] pour les flammes prémélangées (lignes rouges) et stratifiées (lignes noires). La flamme dans le cas stratifié se propageant d'un mélange riche de méthane-air à un mélange stœchiométrique. Dans les deux cas, le pic du taux de dégagement de chaleur (TDC) est calculé à $\Phi^* = 1.3$. Adapté de Pires Da Cruz et al. [95]

Par le biais des mesures des vitesses de flamme en fonction des richesses locales dans des flammes de propane-air homogènes ou stratifiées se propageant dans une chambre à volume constant, Pasquier et al. [79] soulignent une amélioration de la propagation de la flamme grâce à la stratification à grande échelle par rapport au cas homogène. De plus, dans les cas stratifiés, les PDFs mesurées de la vitesse locale de la flamme sont décalées vers des valeurs environ deux fois plus élevées que dans les cas prémélangés homogènes.

Un autre point intéressant réside dans le fait que la modification de la vitesse locale de propagation dépend non seulement de l'étendue de la plage de richesse ou de température résultant de la stratification, mais aussi des caractéristiques du mélange tel que le gradient de richesse. Cela a été étudié par Galizzi et Escudié [96] qui se sont intéressés à des flammes obliques stabilisées dans un mélange stratifié de méthane-air. Dans les conditions de cette expérience, les différentes branches du front de flamme subissent différents types de stratification, c'est-à-dire non seulement suivant la direction localement normale au front de flamme, mais aussi dans la direction localement parallèle au front. En particulier, Galizzi et Escudié [96] ont noté le support de la propagation de la flamme stratifiée par le gradient de richesse parallèle à la direction de la propagation.

En dépit des progrès réalisés, caractériser une relation entre la vitesse de propagation d'une flamme stratifiée et le gradient de la richesse locale n'est pas une tâche simple. Kang et Kyritsis [97, 98, 99] ont étudié expérimentalement la propagation de flammes laminaires planes mono-dimensionnelles à travers des mélanges méthane-air caractérisés par un gradient spatial stationnaire de la richesse. Il a été montré, à l'issue de ces expériences, que les vitesses de flammes obtenues à partir de mélanges stratifiés sont généralement plus élevées que celles des flammes homogènes caractérisées par la même richesse Φ . De plus, cet effet devient plus

prononcé avec l'augmentation du gradient de richesse $|d\Phi/dx|$.

Kang et Kyritsis [98, 99] attribuent les résultats expérimentaux obtenus au flux thermique des produits de combustion dont la composition est plus proche de la stœchiométrie et dont la température est donc plus élevée. Ainsi, Kang et Kyritsis [100] ont étendu la théorie classique de la flamme prémélangée laminaire [82] en supposant que «la stratification de composition est équivalente à une température de flamme adiabatique variant spatialement» et ont montré que la connaissance de la richesse locale est insuffisante pour prédire quantitativement la vitesse locale de la flamme dans un mélange stratifié. L'accord quantitatif entre les résultats théoriques et expérimentaux [98, 99] a été significativement amélioré en prenant en compte l'historique de propagation de la flamme stratifiée. Cependant, cette méthode ne permet pas d'établir une relation précise entre la vitesse de la flamme et les valeurs locales de la richesse et de son gradient spatial, car elle implique un paramètre d'ajustement qui est propre à la configuration de combustion considérée [100]. En effet, lorsqu'une flamme se propage de mélanges riches vers des mélanges pauvres, les radicaux excédentaires de la zone de réaction alimentent le mélange en amont du front de propagation de la flamme, et augmentent sa résistance à l'extinction. De telles flammes stratifiées sont qualifiées de flammes "supportées par l'arrière" (*back-supported*). Elles sont également considérées comme des flammes à "effet mémoire" dans la mesure où la combustion, et plus précisément la vitesse de la flamme laminaire, n'est pas strictement déterminée par les propriétés du réactif comme le suggère le modèle de flamelette, mais aussi par la composition et la température des produits.

Le travail numérique de Pires Da Cruz *et al.* [95] a soutenu les résultats expérimentaux de Kang et Kyritsis [98, 99], et a montré que l'augmentation de la vitesse de flamme et la diminution de la limite inférieure d'inflammabilité ont été causées par l'augmentation de la température des gaz brûlés derrière le front de réaction. Inversement, pour les cas où une flamme se propage de mélanges pauvres vers des mélanges plus riches, Kang et Kyritsis [99] ont trouvé un comportement de flamme similaire à celui discuté ci-dessus. Ils ont signalé que dans les flammes se propageant de mélanges stœchiométriques vers des mélanges riches, la vitesse de flamme augmente également en raison de la chaleur due à la température élevée en aval de la flamme. Ils ont également suggéré que la résistance à l'extinction était améliorée par la production de l'hydrogène. Pires Da Cruz *et al.* [95] ont confirmé que la production et la consommation de l'hydrogène contrôlaient la propagation des flammes dans un mélange stratifié riche. Une telle conclusion a été également obtenue par Stahler *et al.* [101] qui ont souligné un rôle important joué par la diffusion moléculaire des espèces légères telles que H_2 dans les conditions de leurs expériences.

3.3.2 Impact sur la structure de la flamme et de la topologie

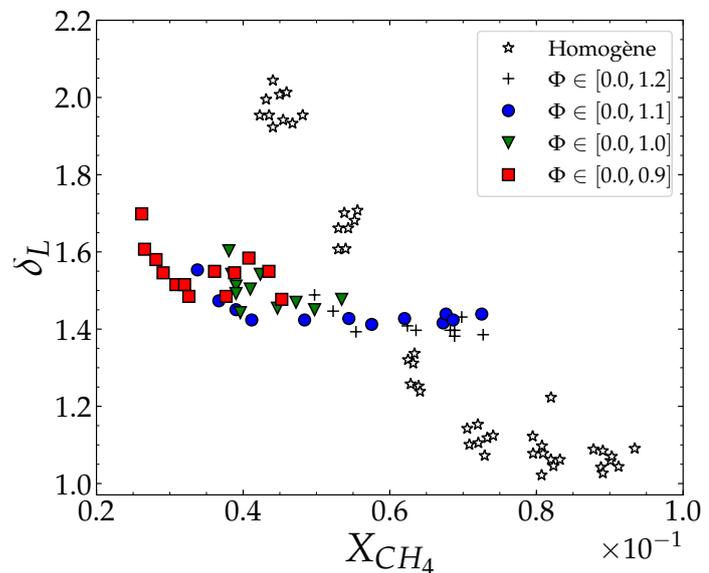
3.3.2.1 Épaisseur de flamme

Degardin *et al.* [102] ont observé une augmentation de la température derrière une flamme oblique se propageant vers un mélange méthane-air plus pauvre dans des expériences avec des flammes laminaires en V stratifiées. Les résultats de leurs travaux ont permis d'obtenir une relation entre l'épaisseur $\delta_L = (T_b - T_u) / \max |\nabla T|$ de la flamme laminaire thermique et

la fraction molaire locale du méthane X_{CH_4} , reportée ici sur la Figure 3.5. Degardin *et al.* [102] ont noté que l'épaisseur de flamme diminue avec la croissance de X_{CH_4} dans le cas homogène. Cette tendance est également visible dans les cas stratifiés, en présentant toutefois, une pente plus faible en comparaison aux conditions homogènes. Par conséquent, ils concluent que l'épaisseur de flamme et la fraction molaire du combustible ne peuvent être directement corrélées.

En introduisant la turbulence dans la configuration réalisée par Degardin *et al.* [102], Robin *et al.* [103] ont étudié expérimentalement et numériquement une flamme en forme de V stratifiée. Les auteurs ont pu obtenir, dans des conditions homogènes, un lien entre l'épaisseur de la flamme et son étirement, en soulignant que la propagation de la flamme homogène est accompagnée d'une forte corrélation entre ces deux propriétés. En revanche, cette tendance est altérée en présence de stratifications. Robin *et al.* [103] ont constaté également un étirement supplémentaire non négligeable, induit par les fluctuations de richesse, qui engendre une diminution notable de l'épaisseur de la flamme.

Figure 3.5 – Épaisseur thermique de la flamme laminaire en fonction de la fraction molaire locale du méthane X_{CH_4} . Chaque symbole montre une moyenne de 100 épaisseurs de flammes instantanées mesurées à une distance donnée d'un obstacle qui stabilise la flamme. Dans les cas stratifiés, X_{CH_4} a été mesurée à $T = 500$ K. Dans des cas prémélangés homogènes, X_{CH_4} a été mesurée dans les gaz frais. Adapté de Degardin *et al.* [102]



3.3.2.2 Surface de flamme

Cho et Santavicca [80] ont étudié expérimentalement la croissance d'un noyau de flamme faiblement turbulent dans un mélange stratifié de propane-air stœchiométrique en moyenne. La croissance du noyau de flamme a été quantifiée par traitement des images de Schlieren, sur lesquelles le rayon de flamme équivalent R_f a été évalué comme $R_f = \sqrt{A_f/\pi}$, où A_f est la surface du noyau de la flamme. À partir des résultats de ces mesures, Cho et Santavicca [80] ont constaté qu'une augmentation de l'amplitude des fluctuations de richesse $\overline{\Phi^2}$ augmentait le plissement de la surface du noyau de flamme par rapport au cas homogène. Néanmoins, les fluctuations affectent faiblement le taux de croissance du noyau dR_f/dt (proportionnel à la vitesse de flamme turbulente) à l'exception du cas caractérisé par la valeur maximale de $\overline{\Phi^2}$ où le taux de croissance atteint son minimum. Ainsi, dans les conditions de ces expériences,

la modulation de la vitesse de consommation locale semble soit (i) compensatrice ou (ii) destructrice (lorsque $\overline{\Phi^2}$ est élevée) de la production de la surface de la flamme induite par les hétérogénéités du mélange.

Cette étude a été complétée par des travaux similaires de Zhou *et al.* [81, 104], dans lesquelles la richesse moyenne $\overline{\Phi}$ varie entre 0.7 et 1.6. Les images de Schlieren obtenues montrent clairement le plissement de la surface du front de la flamme dû aux hétérogénéités du mélange. En conséquence, une augmentation substantielle de la vitesse de la flamme turbulente observée par le degré de l'hétérogénéité du mélange a été trouvée dans les mélanges riches ($\overline{\Phi} = 1.6$) et, surtout, pauvres ($\overline{\Phi} = 0.7$) (cf. Figure 3.6). Cette augmentation de dR_f/dt est associée à l'accélération de la combustion induite par la production de surface de flamme due aux hétérogénéités du mélange, alors que l'influence des fluctuations modérées dans la composition du mélange sur la vitesse de flamme semble être plus modérée dans ces deux cas car les fluctuations positives et négatives se compensent en moyenne.

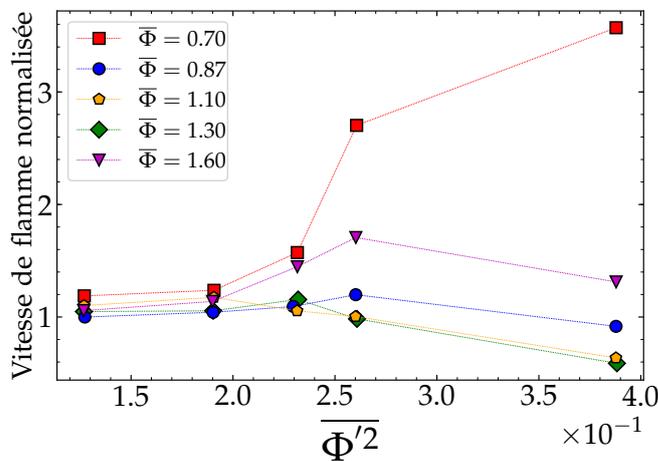


Figure 3.6 – Vitesses de propagation de la flamme mesurées par Zhou *et al.* [81, 104] à divers degrés d'inhomogénéité du mélange, divers $\overline{\Phi}$ spécifiées dans les légendes et $u_{rms} = 0.13$ m/s. Les vitesses de flamme sont normalisées en utilisant leurs valeurs obtenues à partir des flammes prémélangées caractérisées par $\Phi = \overline{\Phi}$. Adapté de Zhou *et al.* [104]

A contrario, dans un mélange quasi-stœchiométrique caractérisé par $\overline{\Phi} = 1.1$, les deux fluctuations positives et négatives de Φ réduisent la vitesse de la flamme. Comme ce mécanisme semble compenser l'augmentation de surface des flammes, l'influence globale des hétérogénéités de mélange sur la vitesse de flamme normalisée est faible, à condition que le degré de l'hétérogénéité du mélange reste suffisamment faible. Une augmentation du degré de l'hétérogénéité du mélange entraîne une diminution significative de la vitesse de flamme. De plus, si le degré de l'hétérogénéité du mélange est suffisamment élevé à $\overline{\Phi} = 1.6$, la production de la surface de la flamme induite par les hétérogénéités du mélange est compensée par le mécanisme évoqué ci-dessus. Cette tendance est associée à une réduction significative de la vitesse de consommation des réactifs en raison d'une augmentation de la probabilité de trouver un mélange ininflammable.

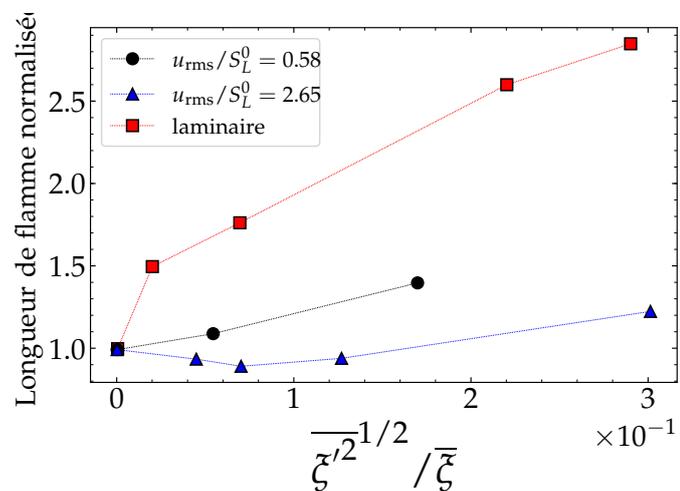
En revanche, dans certaines études numériques telles que celles de Haworth *et al.* [60] et Jiménez *et al.* [105], les effets de la stratification sur la surface de la flamme ont été limités. En effet, Haworth *et al.* [60] ont réalisé une étude numérique basée sur une DNS bidimensionnelle de flammes de propane-air modérément turbulentes ($u_{rms}/S_L^0 = 4.7$ à $t = 0$), sujettes à des variations spatiales harmoniques de richesse (de 0.5 à 2.7 avec $\Phi = 1.0$) dans le sens transversal à l'entrée du domaine. Les calculs ont été effectués en utilisant un mécanisme chimique

semi-détaillé qui contenait 29 espèces et 73 réactions. Les résultats de la DNS dans le flux entrant indiquent une faible influence de telles hétérogénéités de mélange sur la longueur de la flamme.

D'autre part, Jiménez *et al.* [105] ont réalisé des DNS bidimensionnelles de flammes de propane-air statistiquement planes et qui se propagent dans un écoulement THI fortement turbulent ($u_{rms}/S_L^0 = 11.6$ à $t = 0$) hétérogène en richesse. Les hétérogénéités du mélange ont été introduites en prescrivant des variations spatiales de Φ . L'échelle d'amplitude et de longueur de ces hétérogénéités a été variée. Les calculs ont été effectués en utilisant un mécanisme chimique semi-détaillé qui contenait 28 espèces et 73 réactions. Jiménez *et al.* [105] n'ont pas trouvé d'effet notable sur des hétérogénéités de mélange ($0.03 \leq \Phi \leq 2.06$ et $\bar{\Phi} = 0.6$) sur la longueur de la flamme.

Pour isoler les effets potentiels de la stratification de ceux associés à la turbulence, Garrido-Lopez et Sarkar [106] ont réalisé une étude basée sur des DNS bidimensionnelles de flammes statistiquement planes pauvres ($\bar{\Phi} = 0.8$). Dans les deux conditions laminaires et turbulentes, les flammes ont été soumises à des fluctuations de fraction-mélange prescrites en utilisant un spectre de scalaire. Les cas considérés correspondent à des variations de (i) l'amplitude des fluctuations de la fraction de mélange $\overline{\zeta'^2}^{1/2} / \bar{\zeta}$ entre 0 et 0.3 (ii) le rapport de u_{rms}/S_L^0 ($\bar{\Phi} = 0.8$) entre 0 et 2.67. La chimie de la combustion a été réduite à une seule réaction irréversible entre un combustible générique et de l'oxygène. Dans le cas laminaire, les fluctuations considérées augmentaient significativement la longueur moyenne de la flamme instantanée, mais leur effet était nettement réduit avec l'augmentation de $u_{rms}/S_L(\bar{\Phi})$ (cf. Figure 3.7).

Figure 3.7 – Longueur de flamme moyenne normalisée en fonction de l'intensité des fluctuations de la fraction de mélange, calculées par Garrido-Lopez et Sarkar [106] à différentes valeurs de $u_{rms}/S_L(\bar{\Phi})$



Il convient de souligner que Garrido-Lopez et Sarkar [106] ont simulé non seulement des flammes de chimie en considérant une seule étape avec des variations de chaleur et de masse volumique, mais aussi la progression d'une réaction dans le cas d'une masse volumique constante. Dans ce dernier cas, un effet beaucoup plus faible des hétérogénéités de mélange sur la longueur de la flamme et la vitesse de combustion a été trouvé et le front de flamme instantané ressemblait à une surface faiblement plissée, presque plane, contrairement au cas de densité volumique variable où les distorsions à grande échelle du front étaient bien plus prononcées. Ces distorsions augmentent significativement la longueur de la flamme (cf. Figure 3.8).

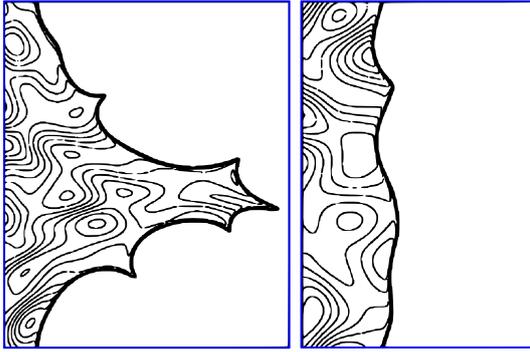


Figure 3.8 – Champs instantanés des isocontours de la fraction massique du combustible, simulés par [Garrido-Lopez et Sarkar \[106\]](#) dans des écoulements laminaires réactifs dans le cas de masse volumique (a) variable et (b) constante.

De la même manière, [Grout et al. \[107\]](#) ont effectué une DNS tridimensionnelle d’une flamme méthane-air stratifiée ($0.4 \leq \Phi \leq 1.2$, $\bar{\Phi} = 0.74$) qui se propage dans un écoulement faiblement turbulent ($u_{rms} = S_L^0(\Phi = 0.74) = 0.7$). Ils ont rapporté que la stratification du mélange a augmenté la surface de la flamme et, par conséquent, la vitesse de combustion.

L’influence des hétérogénéités de mélange sur la densité de surface de flamme (FSD) $\bar{\Sigma}$ a été également documentée par [Anselmo-Filho et al. \[108\]](#) et par [Sweeney et al. \[109\]](#). La [Figure 3.9](#) montre qu’une augmentation du degré de la stratification se traduit par une augmentation de $\bar{\Sigma}$. Ces auteurs ont également rapporté une augmentation du taux de dissipation scalaire (SDR) $\bar{\chi}_c$ par stratification. En revanche, [Böhm et al. \[110\]](#), contrairement à [Anselmo-Filho et al. \[108\]](#), n’ont pas trouvé d’effet notable des hétérogénéités du mélange sur le plissement de flamme à petite échelle dans les flammes pauvres stratifiées de CH_4 -air et stabilisées dans des turbulences beaucoup plus intenses.

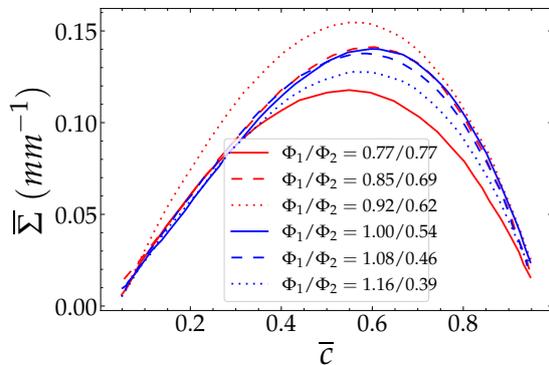
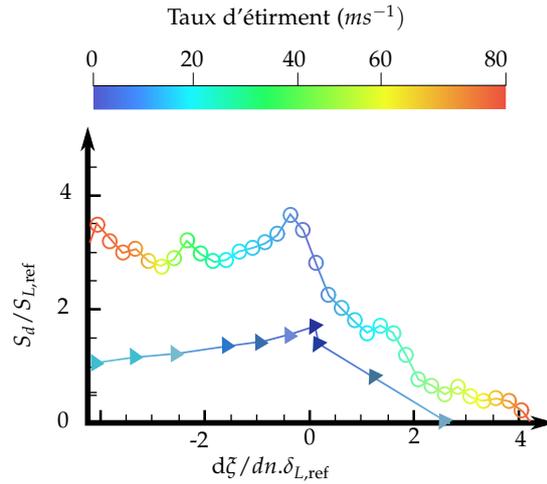


Figure 3.9 – Mesure de la densité de surface de flamme moyenne $\bar{\Sigma}$ en fonction de la variable de progrès moyenne. Adapté de l’article de [Anselmo-Filho et al. \[108\]](#)

En outre, en étudiant des flammes turbulentes stabilisées avec le brûleur de Cambridge caractérisé par $u_{rms}/S_L = \mathcal{O}(10)$, [Sweeney et al. \[91, 92\]](#) n’ont pas trouvé d’effet notable de la stratification sur les diagrammes de dispersion de la densité de surface (FSD) locale $|\nabla c|$ ou du taux de dissipation scalaire χ_c en fonction de la variable de progrès c . De même, dans les conditions de ces expériences, la stratification n’affecte que faiblement la PDF de la courbure locale κ du front de flamme. De plus, [Sweeney et al. \[111\]](#) ont mis en évidence des dépendances très similaires de la FSD moyenne en fonction de c pour des flammes prémélangées et stratifiées soumises à une turbulence intense. L’effet notable (négligeable) de la stratification sur les FSD dans les turbulences faibles (intenses) est cohérent avec le fait que les plissements de la surface de flamme induits par les turbulences intenses l’emporte sur celui résultant des hétérogénéités du mélange.

Figure 3.10 – Vitesse de déplacement $\rho S_d / \rho_u(\Phi)$ conditionnée par $\Phi = 0,7$, $c = 0,65$; et la valeur locale $d\xi/dn$ du gradient de fraction de mélange normal $\mathbf{n} \cdot \nabla Z$, où $\mathbf{n} = -\nabla c / |\nabla c|$. Les cercles et les triangles correspondent aux données obtenues par *Richardson et Chen* [112] en simulant une flamme turbulente stratifiée et une flamme laminaire à contre-courant RTR, respectivement. Les symboles sont colorés par le taux d'étirement tangentiel conditionné $\langle a_t | \Phi = 0,7, c = 0,65; d\xi/dn \rangle$. Adapté de *Richardson et Chen* [112]



Il est à noter que $\bar{\Sigma}(\bar{c})$ évolue d'une manière non monotone en fonction du niveau de la stratification d'après la *Figure 3.9*. Le pic le plus élevé de $\bar{\Sigma}$ est observé à un niveau de stratification moyen (courbe $\Phi_1/\Phi_2 = 0,92/0,62$). Le pic le plus bas de $\bar{\Sigma}$, dans les cas stratifiés, est observé au niveau de stratification le plus élevé (courbe $\Phi_1/\Phi_2 = 1,16/0,39$), la composition du mélange étant inflammable dans les courants air-combustible les plus pauvres. Ces résultats peuvent en partie s'expliquer en supposant que, dans le cas $\Phi_1/\Phi_2 = 1,16/0,39$, l'augmentation de la FSD due à la stratification du mélange est limitée parce que la flamme ne peut entrer dans les volumes où la composition du mélange local est en dehors de la limite d'inflammabilité.

Richardson et Chen [112] ont analysé trois flammes *Bunsen* tridimensionnelles stratifiées ouvertes stabilisées dans un écoulement turbulent à la sortie d'un canal rectangulaire, obtenues par une approche DNS. La stratification de la composition du mélange méthane-air a été introduite en imposant des variations spatiales mono-dimensionnelles de richesse à la base du brûleur, avec le gradient local de Φ étant :

- soit tangent à une iso-surface de c ;
- soit normal à l'iso-surface de c avec Φ plus élevée dans les produits ;
- ou normal à l'iso-surface de c avec Φ plus élevée dans les réactifs.

Les calculs ont été effectués en utilisant un mécanisme chimique réduit qui contenait 13 espèces et 9 étapes. Les données DNS obtenues par *Richardson et Chen* [112] dans le cas de stratification tangentielle par rapport à la flamme moyenne indiquent que la vitesse de déplacement des zones ($d\xi/dn < 0$) et $c(x;t) = 0,65$ est statistiquement plus élevée que la vitesse des surfaces caractérisées par ($d\xi/dn > 0$) (cf. *Figure 3.10*).

3.3.2.3 Courbure du front de flamme

Renou et al. [113] ont étudié l'expansion de noyaux de flamme faiblement turbulents dans un mélange hétérogène de propane-air. Des images 2D de noyaux de flamme en expansion ont été obtenues en utilisant la tomographie laser. En traitant de telles images, le rayon de la flamme et la courbure locale κ du contour de la flamme ont été évalués. *Renou et al.* [113] ont rapporté une augmentation de la moyenne quadratique de la courbure locale du front

de flamme sous l'effet de la stratification. Ils ont attribué cette constatation à un plissement supplémentaire de la surface de la flamme en raison des fluctuations locales de la fraction de mélange. Les PDFs de courbure ont été évaluées, et un élargissement de ces dernières a été observé. Cet effet a été également documenté dans des flammes stratifiées faiblement turbulentes stabilisées à l'aide du brûleur de Cambridge [109], mais la stratification des mélanges a faiblement affecté les PDFs de courbure obtenues à partir de flammes fortement turbulentes stabilisées par le brûleur de Cambridge. Ces résultats supportent une hypothèse selon laquelle la génération de la surface de la flamme due à la stratification du mélange n'affecte les quantités moyennes que pour les faibles turbulences.

Dans le cas de flammes de méthane-air pauvres stabilisées, **Bonaldo et Kelman** [114] ont rapporté une augmentation modérée de la vitesse de combustion turbulente due à la stratification de la composition. Ils ont attribué l'effet au plissement de la surface de flamme induit par la stratification. Ils ont également noté que la formation de fronts de flamme présentant un petit rayon de courbure positif est plus probable avec des flammes stratifiées.

Ramaekers et al. [115] ont réalisé une étude DNS tridimensionnelle de trois flammes *Bunsen* stratifiées, faiblement turbulentes ($u_{rms}/S_L^0 = 1.6$) stabilisées à la sortie d'un canal rectangulaire. La stratification de la composition du mélange méthane-air préchauffé ($T_u = 800$ K) a été simulée en imposant des variations spatiales périodiques mono-dimensionnelles de richesse au niveau de la buse du brûleur, avec deux amplitudes et deux longueurs d'onde. La chimie de la combustion a été modélisée en utilisant la méthode FGM (*Flamelet Generated Manifold*) [116, 117]. En revanche, **Ramaekers et al.** [115] n'ont observé aucun effet des variations spatiales à grande échelle imposées sur la richesse Φ sur la structure locale de la flamme.

3.3.3 Variation du taux de réaction local et global

Hélie et Trouvé [59] ont effectué une étude DNS tridimensionnelle de flammes statistiquement planes turbulentes ($u_{rms}/S_L^0 = 7.5$ à $t = 0$) en propagation dans une turbulence homogène isotrope en décroissance temporelle. Afin de reproduire les hétérogénéités du mélange, le champ initial de $\Phi(x, t = 0)$ a été caractérisé via (i) la PDF initiale $P(\Phi, t = 0)$ qui est la somme de deux fonctions de Dirac ayant pour maximum à $\bar{\Phi} \pm \Phi'$ et (ii) une échelle intégrale de ce champ égale à L_Φ . Dans les conditions des simulations, $\bar{\Phi} = 1.0$, $L_\Phi = L = 1.0$ ou 2.0 , et $\Phi' = 0.06$, 0.3 ou 0.6 . La chimie de combustion a été réduite à une seule réaction irréversible entre un combustible générique et de l'oxygène. **Hélie et Trouvé** [59] ont rapporté que les fluctuations réduisent la vitesse de combustion, l'effet étant considéré comme une conséquence directe des variations non linéaires du taux de dégagement de chaleur (TDC) avec la composition du mélange.

Lauvergne et Egolfopoulos [89] ont souligné que, dans le cas où la fréquence des oscillations est suffisamment élevée, *i.e.*, si la période des oscillations est significativement plus courte que le temps nécessaire pour qu'une perturbation se propage à travers une couche de flamme, la réponse d'une flamme RTR (*cf.* **Figure 3.3b**) aux oscillations de richesse à l'entrée est considérablement atténuée par la diffusion moléculaire. Par conséquent, ils ont conclu que les dépendances calculées de la consommation totale de combustible en fonction de Φ^*

sont faiblement affectées par les oscillations de $\Phi(t)$, où Φ^* est la richesse évaluée au point correspondant au taux de consommation maximal du combustible. **Lauvergne et Egolfopoulos [89]** ont aussi conclu que les propriétés instantanées de la flamme peuvent être dérivées de l'histoire temporelle de la flamme et des bibliothèques de flammelettes stables calculées en pré-mélange cas utilisant les richesses égales à $\Phi^*(t)$.

En étudiant de petites régions à l'intérieur de flammes en V stratifiées faiblement turbulentes ($0.5 < u_{rms}/S_L < 1.1$). **Vena et al. [118, 119, 120]** ont rapporté les éléments suivants :

- une diminution de la moyenne du TDC local avec l'augmentation des valeurs positives du gradient transversal de la richesse moyenne d'environ 3.5% et 5.2 % dans les régions quasi-stœchiométriques ($0.95 \leq \Phi \leq 1.05$) et les régions riches ($1.15 \leq \Phi \leq 1.25$) respectivement ;
- une augmentation de la moyenne du TDC local par l'amplitude des valeurs négatives du gradient transversal de la richesse moyenne avec une magnitude d'effet d'environ 10.1 % et 3.8 % dans les régions riches et les zone pauvres ($0.85 \leq \Phi \leq 0.95$) respectivement.

Richardson et al. [121] ont simulé une combustion stratifiée de méthane-air dans la configuration du point de stagnation PTR (cf. **Figure 3.3a**). Deux cas : (i) $\Phi_r < \Phi_p < 1$ et (ii) $\Phi_p < \Phi_r < 1$ sont considérés. La richesse locale Φ^* est évaluée au maximum du taux de dégagement de chaleur de sorte qu'elle soit la même dans les flammes stratifiées et prémélangées. Dans le premier (second) cas, le TDC était supérieur (inférieur) à celui de la flamme prémélangée homogène. Cet effet a été attribué aux modifications locales des concentrations des espèces hautement réactives (H, H₂ et OH) en raison des flux des radicaux provenant (allant vers) des produits plus riches (plus pauvres), alors que flux les provenant (allant vers) des produits jouent un rôle secondaire. En raison de ces changements locaux dans les concentrations des radicaux, la connaissance des valeurs locales de Φ et de la variable de progrès de la combustion c n'est plus suffisante pour évaluer le TDC local, *i.e.* les dépendances de $\dot{\omega}_c$ au couple (c, Φ) différent de celles obtenues à partir des flammes laminaires stratifiées et prémélangées.

Malkeson et Chakraborty [122, 123, 124, 125, 126, 127, 128, 129] et enfin **[130]** ont effectué l'étude par DNS tridimensionnelle de quatre flammes stratifiées statistiquement planes qui se propagent dans une turbulence à petite échelle en décroissance temporelle, avec un rapport de u_{rms}/S_L^0 sensiblement supérieur à l'unité à $t = 0$. Les hétérogénéités de composition des réactifs ont été prescrites en utilisant une méthode pseudo-spectrale, basée sur (i) une PDF de $P(\Phi)$ bimodale de Φ , (ii) sa valeur moyenne $\bar{\Phi} = 0.7$ ou 1.0 , (iii) le niveau de fluctuation $\left[\overline{(\Phi - \bar{\Phi})^2} \right]^{1/2}$ et (iv) une échelle de longueur intégrale L_Φ des variations spatiales de la richesse. La description cinétique est réduite à une seule réaction irréversible entre un combustible générique et de l'oxygène.

Dans le cas de $\bar{\Phi} = 1.0$, **Malkeson et Chakraborty [122]** n'ont observé aucun effet notable des fluctuations sur le taux de dégagement de chaleur et donc sur la vitesse de propagation cf. **Figure 3.11**, alors que le taux de réaction global était augmenté par les fluctuations lorsque $\bar{\Phi} = 0.7$. À première vue, ce dernier résultat pourrait être associé à une augmentation de la surface de la flamme due aux hétérogénéités de mélange, alors que cet effet devrait être

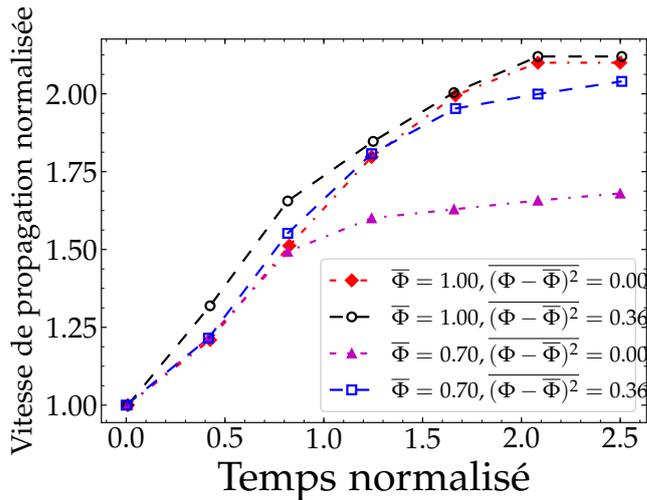


Figure 3.11 – Évolution temporelle des vitesses de flammes turbulentes normalisées en utilisant $S_L(\bar{\Phi})$. Adapté de Malkeson et Chakraborty [122]

compensé par une diminution de la vitesse de consommation des réactifs $\overline{u_c(\Phi)}$ dans le cas de $\bar{\Phi} = 1.0$. En effet, dans le cas où la richesse moyenne correspond à la condition "idéale" du point de vue de la propagation (*i.e.* la condition stœchiométrique) les fluctuations de composition ne contribuent qu'à diminuer la valeur moyenne de la vitesse de consommation locale.

stœchiométrique en moyenne, les hétérogénéités de mélange ont réduit la valeur moyenne de la vitesse de déplacement local, alors qu'un tel effet était moins prononcé à $\bar{\Phi} = 0.7$ [123]. De plus, les dépendances de la FSD moyenne $|\overline{\nabla c}|$ en fonction \tilde{c} , reportée dans [129], indiquent une augmentation de $|\overline{\nabla c}|$ en raison des hétérogénéités de mélange dans le cas ($\bar{\Phi} = 0.7, u_{rms}/S_L(\bar{\Phi}) = 8$).

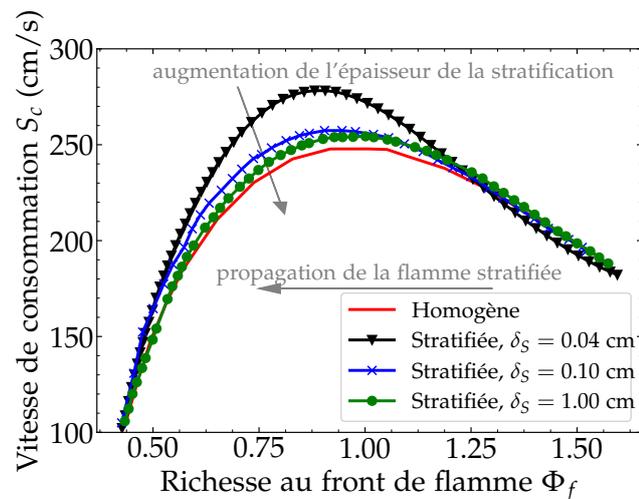
Pera *et al.* [24] ont réalisé une étude basée sur des DNS bidimensionnelles de l'influence des variations de température et de composition du mélange sur la croissance d'un noyau de flamme dans un mélange stœchiométrique iso-octane/air sous des températures et des pressions élevées associées à la combustion dans un moteur à allumage commandé conventionnel sous faible charge. Des conditions à la fois laminaires et faiblement turbulentes ont été simulées. Il convient de souligner que, pour tenter de reproduire l'influence des gaz résiduels (EGR) sur la croissance du noyau de la flamme, la composition moyenne du mélange était homogène, mais les fluctuations de la composition et de la température du mélange local étaient générées avec une amplitude et une taille caractéristiques égale à l'échelle de longueur intégrale des fluctuations de vitesse [24]. Les calculs ont été effectués en utilisant un mécanisme chimique semi-détaillé qui contenait 29 espèces et 48 réactions. Pera *et al.* [24] ont noté que la composition du mélange et les hétérogénéités de température augmentaient le plissement de la surface de la flamme dans une faible turbulence, les hétérogénéités de température jouant un rôle plus important. Cependant, l'influence des hétérogénéités sur la croissance du noyau de flamme était beaucoup plus faible que l'influence de la turbulence même dans le cas de $u_{rms}/S_L < 1$, considérée par Pera *et al.* [24]. En particulier, les TDC intégrés sur l'intégralité du domaine de calcul et moyennés sur un ensemble d'essais statistiquement équivalents étaient pratiquement identiques. Néanmoins, les hétérogénéités (principalement, les hétérogénéités de température), augmentent, d'environ 10%, les valeurs moyennes des fluctuations du

TDC global.

Vena *et al.* [120] n'ont pas souligné un effet notable de la stratification du mélange sur la dépendance du TDC local à la courbure de la flamme locale. Néanmoins, ils ont noté que les données expérimentales obtenues dans les régions riches indiquent qu'une augmentation de l'amplitude des valeurs négatives du gradient transversal de la richesse moyenne entraîne une augmentation du pic du TDC dans les zones de réaction caractérisées par la courbure locale négative.

Vena *et al.* [119] ont étudié des événements d'extinction locale dans de petites régions quasi-stœchiométriques d'une flamme stratifiée au degré d'hétérogénéité de mélange le plus élevé qui puisse être obtenu dans les expériences, soit celui présentant le plus fort gradient transversal. En appliquant les mêmes outils de diagnostic à une région significativement plus large de la flamme, où Φ variait de 0.74 à 1.2, un effet de réduction assez prononcé (jusqu'à 22.5 %) du gradient transversal sur le TDC moyen par unité de longueur de la flamme est mesuré, mais l'effet a été partiellement compensé par une augmentation (jusqu'à 17,2%) de la longueur moyenne des contours de flamme extraits des images bidimensionnelles instantanées du TDC [119]. Ces résultats impliquent que, dans les conditions de ces expériences, à la fois une réduction de la vitesse de consommation locale et une augmentation de la surface de la flamme dues aux hétérogénéités du mélange jouent un rôle, mais le premier mécanisme l'emporte sur le dernier.

Figure 3.12 – Vitesses locales de consommation de combustible calculées par Shi *et al.* [131] pour différentes épaisseurs locales de stratification $\delta = S = |\Phi_2 - \Phi_1| / \max(|\nabla T|)$. La flamme se propage de mélanges riches ($\Phi_1 = 2.0$ et $\Phi_{f,1} = 1.6$) vers des mélanges pauvres ($\Phi_2 = 0.5$ et $\Phi_{f,2} = 0.4$) d'hydrogène-air. L'indice f fait référence aux conditions à la position du maximum du TDC. Adapté de Shi *et al.* [131]



Shi *et al.* [131] ont réalisé des simulations de flammes laminaires planes mono-dimensionnelles se propageant à partir d'un mélange homogène d'hydrogène-air caractérisé par $\Phi_1 = 1.0$ ou 2.0 vers un mélange homogène d'hydrogène-air caractérisé par $\Phi_2 = 2.0$ ou 0.5, respectivement. Les calculs ont été effectués en utilisant un mécanisme chimique détaillé comportant 9 espèces. Deux séries de simulations ont été effectuées en fixant le nombre de Lewis $Le_k = 1$ pour toutes les espèces k ou en faisant appel à une approximation de diffusivité moyenne dans le mélange considéré. Dans le cas où une approximation des diffusivités moyennes du mélange est retenue, Shi *et al.* [131] ont calculé une vitesse locale de consommation de combustion plus élevée que dans le mélange homogène caractérisé par le même Φ^* (cf. Figure 3.12).

Ainsi, la combustion était soutenue par les hétérogénéités dans un tel cas. L'effet inverse a été simulé dans le cas de $\nabla\Phi \cdot \nabla c < 0$, c'est-à-dire lorsque la flamme s'est propagée d'un mélange pauvre à un mélange riche. Les amplitudes des deux effets ont été augmentées par la magnitude du gradient de la richesse locale $|\nabla\Phi|$ et se sont avérés principalement contrôlés par les variations locales de la fraction molaire de H "effet chimique" en raison de sa forte diffusivité. De tels effets n'ont pas été observés dans le cas à $Le_k = 1$ est imposé pour toutes les espèces.

3.4 Conclusion

Les résultats rassemblés dans ce chapitre illustrent certains des effets potentiels d'une stratification de composition, que ce soit en richesse ou en température. En effet, en terme de limites d'inflammabilité, une flamme dans un mélange hétérogène peut se propager dans des zones pauvres voire ininflammables pour mélange homogène équivalent grâce à son effet mémoire. Il a été également montré que toutes les caractéristiques sont modifiées en présence des stratifications, notamment la vitesse de propagation, le taux de dégagement de chaleur, l'épaisseur de flamme, la surface de la flamme et plus généralement sa topologie. Cela peut résulter de la présence des flux diffusifs de chaleur/masse provenant des zones plus riches ou plus pauvres, mais également plus chaudes (ou plus froides) en aval qui peuvent impacter la zone de réaction principale et altérer la combustion, de sorte que le comportement local des flammes ne peut plus être prédit uniquement sur la base des seules propriétés initiales (richesse, température et pression). De plus, quantifier les interactions des hétérogénéités de composition ou de température avec les flammes turbulentes est intrinsèquement plus complexe, car les effets généraux de la stratification sur le comportement global de la flamme doivent être découplés de ceux associés au caractère turbulent de l'écoulement.

Un certain nombre de conclusions quelquefois contradictoires ont aussi été recensées dans les travaux réalisés dans cette thématique. Par exemple, certaines études reportent une amélioration de l'efficacité de la combustion (taux de dégagement de chaleur) en présence de stratifications tandis qu'une seconde catégorie de travaux montre un effet opposé voire une insensibilité de l'efficacité de la combustion aux hétérogénéités de composition. En pratique, il est effectivement assez difficile de tirer des conclusions générales en matière de combustion stratifiée. La compréhension des phénomènes physiques engendrés par la stratification reste aujourd'hui encore un champ de recherche à explorer.

Les travaux effectués au cours de cette thèse s'inscrivent dans ce cadre. Cependant, tous les effets présentés dans ce chapitre ne pourront pas être analysés. Les études se concentreront sur une configuration de noyau de flamme en expansion similaire à celle étudiée précédemment par [Pera et al. \[24\]](#) où les effets dus à la stratification et ceux associés à la turbulence seront découplés en considérant des cas stratifiés laminaires dans un premier temps avant de s'intéresser à des cas turbulents. Pour les deux catégories d'écoulements considérés, l'accent sera mis sur les propriétés spatiales et statistiques mais aussi sur la nature de la stratification considérée.

Base de données de simulations numériques directes

Sommaire

4.1	Caractéristiques d'un mélange de réactifs hétérogène	70
4.2	Configuration typique	73
4.2.1	Initialisation du champ de vitesse fluctuant	73
4.2.2	Initialisation du champ scalaire	74
4.2.3	Établissement du noyau de flamme	76
4.3	Base de données DNS	78
4.3.1	Conditions opératoires	78
4.3.2	Caractéristiques de la distribution des gaz frais	79
4.3.3	Caractéristiques de la turbulence	80
4.3.4	Récapitulatif des configurations	81
4.3.5	Convergence statistique des calculs	82
4.4	Récapitulatif	85

4.1 Caractéristiques d'un mélange de réactifs hétérogène

Les recherches dans le domaine de la combustion partiellement prémélangée ont révélé non seulement des effets des hétérogénéités de composition sur les propriétés de la flamme mais également des résultats contradictoires concernant la vitesse de propagation et le taux de dégagement de chaleur d'une flamme dans des conditions prémélangées hétérogènes par rapport à leurs équivalents dans des conditions parfaitement prémélangées de même richesse globale. Par exemple, les résultats expérimentaux de *Zhou et al.* [104] suggèrent que le taux de dégagement de chaleur global peut varier d'un facteur trois avec des hétérogénéités de réactifs pour la même quantité totale de combustible et de comburant, et qu'il existe un niveau d'hétérogénéité "optimale" qui conduit à un taux de dégagement de chaleur maximal. D'autre part, les simulations numériques prédisent un comportement différent dans lequel le mélange hétérogène entraîne une combustion moins efficace (en terme de dégagement de chaleur) [59] ou une efficacité essentiellement similaire [60]. L'une des motivations de notre étude est de lever ces contradictions par le biais de simulations numériques directes qui s'appuient sur une description représentative de la cinétique chimique et couvrant une large gamme de variations locales des propriétés du mélange.

Lorsqu'une flamme se propage dans un mélange hétérogène de réactifs, quatre effets principaux peuvent contribuer à modifier le taux de dégagement de chaleur :

- Tout d'abord, les différences des taux de réaction locaux dus aux variations locales de la richesse produisent une déformation du front de flamme, car des segments de flamme se propageant initialement à une vitesse uniforme commencent à se propager à des vitesses différentes. Cet effet produira dans tous les cas une augmentation de la surface de la flamme (ou de la longueur en 2D) par rapport à celle obtenue une flamme se propageant dans un mélange homogène. L'ampleur de cette augmentation devrait dépendre de la distribution spatiale et de l'amplitude des hétérogénéités, ainsi que des propriétés de propagation des flammes laminaires.
- Deuxièmement, les différences des taux de réaction locaux entraînent des variations locales du taux de dégagement de chaleur par unité de surface de flamme. Cela peut contribuer à une augmentation ou à une diminution du taux de dégagement de chaleur global par rapport au cas homogène, en fonction de la distribution des hétérogénéités de richesse et des propriétés de propagation de flamme.
- Troisièmement, les effets de la turbulence tendront principalement de diminuer localement la vitesse de réaction, car la surface de la flamme a tendance à s'aligner sur la contrainte tangentielle [132], ce qui a pour effet de réduire localement la vitesse de réaction. Cela peut affecter différemment les flammes homogènes et hétérogènes car les formes des fronts de flamme diffèrent dans les deux cas, comme décrit ci-dessus.
- Enfin, contrairement à une flamme homogène, des niveaux de températures et de concentrations de radicaux localement fluctuants existent au sein des flammes stratifiées. La diffusion, la conduction et le mélange turbulent auraient alors tendance à diminuer ou à augmenter la température et les concentrations moyennes au niveau du front de flamme, entraînant des taux de réaction inférieurs/supérieurs aux valeurs basées sur la stœchio-

métrie et les contraintes locales. Par exemple, une température localement supérieure à celle des réactifs frais pourrait permettre de brûler à des richesses locales au-delà des limites d'inflammabilité.

En fonction des propriétés de l'écoulement hétérogène, la compétition entre ces quatre effets peut, en principe, entraîner une augmentation ou une diminution du taux de dégagement de chaleur. Parmi ces quatre effets, le troisième et le quatrième dépendent des caractéristiques temporelles de la turbulence, tandis que le premier et le second sont principalement contrôlés par les propriétés des hétérogénéités et de température.

Par ailleurs, en adoptant un raisonnement basé sur l'évolution de la vitesse de flamme laminaire moyenne $\overline{S_L^0(\Phi)}$ en présence des hétérogénéités de richesse, on peut recenser trois scenarii distincts (cf. Figure 4.1) :

- la valeur moyenne de la richesse est égale à $\Phi_{S_L, \max}$ associée au pic de $S_L^0(\Phi)$ cf. Figure 4.1a : les fluctuations positives ou négatives de la richesse locale Φ dégradent le dégagement de chaleur local. Par conséquent, $\overline{S_L^0(\Phi)}$ est diminué avec l'augmentation de $\Delta\Phi$.
- la valeur moyenne de la richesse est nettement différente de $\Phi_{S_L, \max}$ et l'amplitude des fluctuations de Φ est si élevée que la probabilité de trouver un mélange très riche/pauvre en dehors des limites d'inflammabilité est significative, cf. Figure 4.1b et Figure 4.1c alors, une augmentation de $\Delta\Phi$ réduit $\overline{S_L^0(\Phi)}$ en raison de l'augmentation de la probabilité de trouver des zones d'extinction.
- l'amplitude des fluctuations de Φ est suffisamment petite et la richesse moyenne $\overline{\Phi}$ est suffisamment éloignée de $\Phi_{S_L, \max}$ et des limites d'inflammabilité, cf. Figure 4.1d, alors, la relation entre $S_L^0(\Phi)$ et Φ peut être considérée comme une fonction linéaire et l'influence des fluctuations positives et négatives de Φ sur $\overline{S_L^0(\Phi)}$ se résume à un écart négligeable de cette dernière par rapport à $S_L^0(\overline{\Phi})$ même si l'amplitude des fluctuations de $S_L^0(\Phi)$ est significative. Dans de telles conditions, une dépendance de $S_L^0(\Phi)$ de $\Delta\Phi$ est relativement modérée. Toutefois, les différences locales de $S_L^0(\Phi)$ font que les éléments du front de flamme se propagent à différentes vitesses ce qui plisse le front de la flamme et augmente ainsi sa surface avec l'augmentation de $\Delta\Phi$. Ainsi, le taux de dégagement de chaleur intégré sur toute la surface du front de flamme augmente avec $\Delta\Phi$.

Il convient cependant de rappeler que la discussion des trois scenarii ci-dessus est simplifiée et que l'influence de la stratification du mélange sur $\overline{S_L^0(\Phi)}$ et le taux de dégagement de chaleur moyen peuvent dépendre non seulement de $\overline{\Phi^2}$ et $\overline{\Phi}$; mais également d'autres caractéristiques de mélange et d'écoulement, comme par exemple les gradients des fractions massiques de réactifs.

D'après ce qui précède, cinq paramètres principaux peuvent être retenus pour compléter les études précédentes. Ces derniers peuvent être répartis en deux grandes catégories : (i) les grandeurs caractérisant la distribution spatiale et statistique du champ hétérogène de réactifs et (ii) les quantités liées à la turbulence. En particulier, afin de jauger l'impact potentiel des

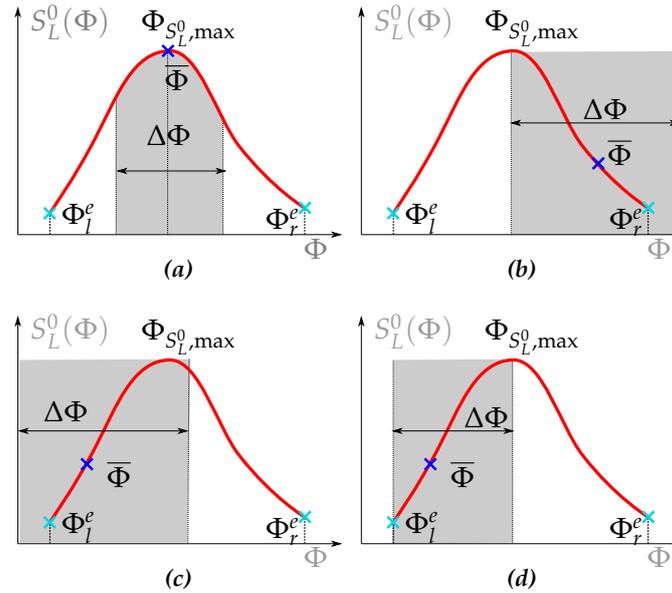


Figure 4.1 – Scénarii probables de variations des richesses locales autour de la moyenne. Les croix bleues correspondent à la richesse moyenne et l’étendu des variations est représenté par les zones grises, Φ_l^e et Φ_r^e représentent les limites d’inflamabilité pauvre et riche respectivement.

hétérogénéités de composition sur la flamme, il est judicieux de considérer des cas laminaires dans lesquelles les effets de la turbulence sont omis, ainsi que des cas turbulents, en faisant varier les caractéristiques associées la turbulence.

D’autre part, il a été mis en évidence précédemment que les caractéristiques de la distribution du mélange hétérogène initial ont une influence potentielle considérable. Ces derniers sont : la moyenne, la variance (pouvant être représentée en terme de taux de ségrégation) et l’échelle spatiale caractéristique.

Pour finir, dans les chambres de combustion, les hétérogénéités de richesse et celles de la température sont couplées et peuvent avoir des effets opposés. Les poches chaudes, susceptibles d’augmenter la vitesse de propagation, correspondant à des zones pauvres où le front de flamme est décéléré, et les zones froides correspondent à des zones riches en combustible où l’effet opposé se produit. Ainsi, ces deux effets doivent être séparés afin de quantifier leurs contributions respectives. Par conséquent, des cas indépendants de stratification de richesse et de température doivent être considérés.

Ces différents paramètres sont récapitulés sur le schéma conceptuel de la [Figure 4.2](#). Une étude paramétrique est conduite sur l’ensemble de ces paramètres en analysant une base de données DNS générée à cette fin.

Cette base de données, dont les entrées seront présentées dans la suite, a été construite sur la base d’une configuration typique. La section suivante a pour objectif d’explicitier la procédure retenue pour la mettre en place.

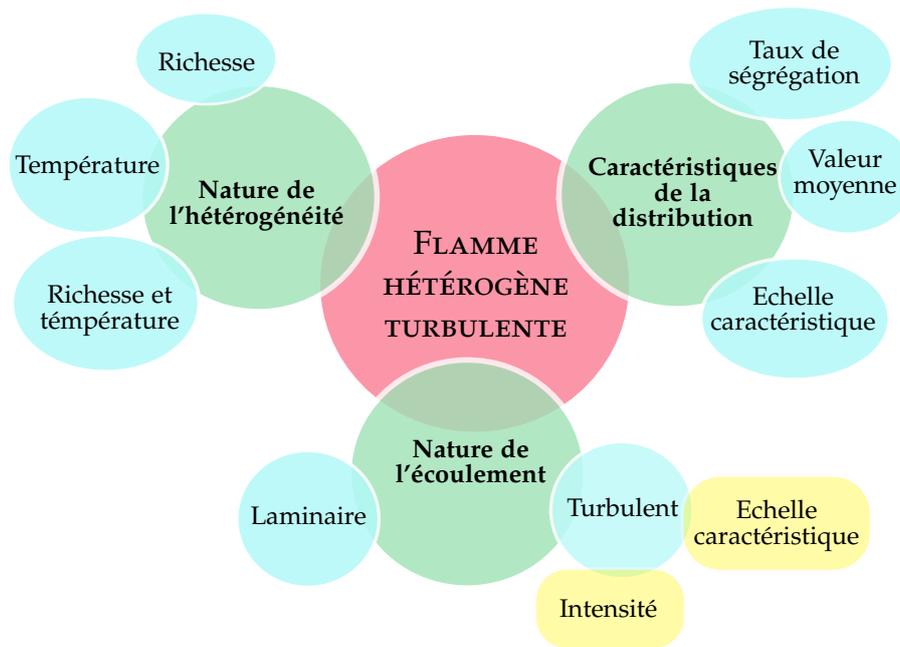


Figure 4.2 – Récapitulatif des entrées de l'étude paramétrique

4.2 Configuration typique

Parce que les ressources informatiques sont limitées, la considération d'une chimie représentative détaillée nous contraint à effectuer des simulations d'écoulements réactifs en deux dimensions, ignorant ainsi tous les effets tridimensionnels spécifique de la turbulence. Cette approximation n'est généralement pas adaptée aux écoulements non réactifs. Pour la combustion prémélangée, cependant, des simulations directes [133] montrent que la probabilité de trouver des topologies de flammes localement cylindriques bidimensionnelles est plus élevée que la probabilité de trouver des surfaces de flammes sphéroïdales tridimensionnelles. Les flammes bidimensionnelles semblent alors plus probables même si le champ d'écoulement devant ces flammes est bien tridimensionnel. De plus, *Veynante et al.* [134] ont comparé des simulations bidimensionnelles et tridimensionnelles dans leur étude du transport turbulence-scalaire dans les flammes prémélangées. En termes de transport turbulent, aucune différence significative n'a été mise en évidence et le critère proposé pour délimiter les régimes du 'gradient' et du 'contre-gradient' est en très bon accord dans les deux DNS. Dans cette optique, la configuration de la présente étude sera, dans un premier temps, bi-dimensionnelle et correspond à une flamme d'iso-octane et d'air statistiquement circulaire se propageant dans un domaine carré de dimension $L_x = L_y = L = 4$ mm avec des conditions aux limites périodiques dans les deux directions, en présence de fluctuations de vitesse et/ou d'hétérogénéités de composition. Les paragraphes suivants visent à présenter les différentes étapes de l'établissement d'une telle configuration.

4.2.1 Initialisation du champ de vitesse fluctuant

Afin d'initialiser les champs de vitesse initiaux au sein de la configuration considérée, le cadre de la turbulence homogène isotrope (THI) est adopté. Par sa simplicité, la THI permet

d'étudier certains aspects de la turbulence. En effet, le caractère isotrope rend possibles les analyses théoriques des grandeurs caractéristiques de la turbulence, statistiquement indépendantes de la position spatiale d'un point de l'écoulement. Pour une turbulence incompressible ou s'opérant dans un approximation de faibles nombres de Mach, seule la vitesse doit être initialisée puisque la pression est déterminée par la condition d'une divergence nulle du champ de vitesse.

Pour générer le champ initial des fluctuations de vitesse, un spectre d'énergie est utilisé afin de prescrire le niveau d'énergie cinétique turbulente de tous les modes dans l'espace spectral. Les phases sont ensuite obtenues par tirage aléatoire pour garantir le caractère homogène de l'écoulement. Une telle procédure a été initialement proposée par Rogallo [135] et a été largement utilisée dans la littérature depuis.

Dans la cas de la présente configuration, le spectre choisi est celui de Passot et Pouquet [136]. Le spectre d'énergie $E(k)$ est principalement caractérisé par le nombre d'onde le plus énergétique k_0 et par u_{rms} qui représente l'écart type des fluctuations de vitesses :

$$E(k) = A \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{u_{rms}}{k_0} \left(\frac{k}{k_0}\right)^4 \exp\left(-2 \left(\frac{k}{k_0}\right)^2\right) \quad (4.1)$$

où le paramètre A dépend de la dimension de la configuration dim (2 en 2D et 3 en 3D) :

$$A = \frac{16}{3} dim$$

Le spectre d'énergie résultant $E(k)$ a une forme symétrique par rapport à k_0 et concentre l'essentiel de l'énergie autour de k_0 (cf. Figure 4.3.a), ce qui signifie qu'il n'y a initialement quasiment pas de zone inertielle. Toutefois, il permet de générer un champ suffisamment turbulent pour agir sur la dynamique du développement initial d'un noyau de flamme.

En pratique, un tel spectre est initialisé par le biais d'un couple de paramètres : u_{rms} et l_t . La relation entre l_t et k_0 se déduit de la définition de l'échelle de longueur intégrale de la turbulence en fonction du spectre de la densité spectrale de l'énergie dans une THI :

$$l_t = \frac{B^2}{u_{rms}} \int_0^\infty \frac{E(K)}{K} dK = \frac{C}{k_0} \quad (4.2)$$

avec :

$$B = \frac{\pi}{2} (dim - 2) + 2(3 - dim)$$

$$C = \left[(dim - 2) + \frac{8}{3}(3 - dim) \right] \sqrt{\frac{2}{\pi}}$$

4.2.2 Initialisation du champ scalaire

Il est à rappeler que la vocation d'une telle configuration est d'étudier l'influence des hétérogénéités de composition sur la propagation d'un noyau de flamme en présence de fluctuations de vitesse, en se focalisant sur les valeurs moyennes, les niveaux de ségrégation et les échelles de longueurs caractéristiques associées à une distribution d'hétérogénéités.

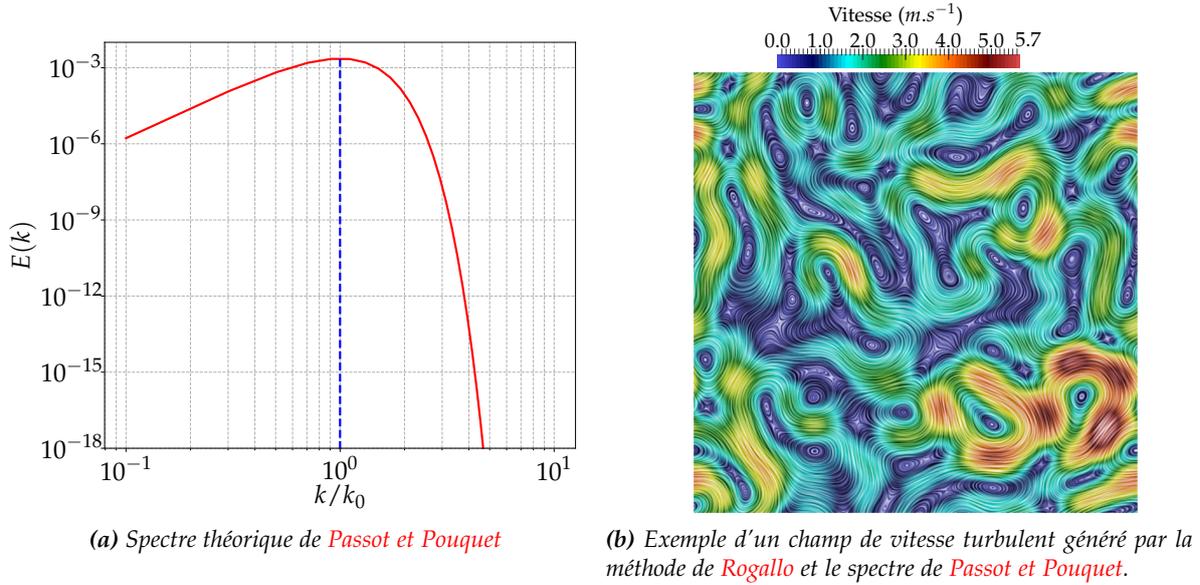


Figure 4.3 – Illustration du spectre théorique de *Passot et Pouquet* [136] et exemple de champ de vitesse turbulent initial.

Un champ scalaire hétérogène Ψ (pouvant être la richesse Φ ou la température) peut être caractérisé, sous sa forme normalisée $\zeta \in [0, 1]$, par :

- sa valeur moyenne $\bar{\zeta}$,
- son niveau de fluctuation (i.e variance) $\overline{\zeta'^2}$, et
- son échelle de longueur caractéristique L_ζ associée.

Les deux premières caractéristiques permettent de définir le taux de ségrégation :

$$S_\zeta = \frac{\overline{\zeta'^2}}{\bar{\zeta}(1 - \bar{\zeta})} \quad (4.3)$$

De manière similaire à la méthode utilisée pour générer un champ de vitesse turbulent, la méthode spectrale décrite par *Reveillon* [137] permet, en se basant sur une fonction densité de probabilité (PDF), de générer un champ scalaire ζ borné entre 0 et 1 en prescrivant sa valeur moyenne, sa variance et une échelle de longueur caractéristique associée :

- la PDF de composition est approximée ici par une distribution bêta :

$$\mathcal{B}(\zeta; \alpha, \beta) = \frac{\zeta^{\alpha-1}(1 - \zeta)^{\beta-1}}{\int_0^1 x^{\alpha-1}(1 - x)^{\beta-1} dx} \quad (4.4)$$

la moyenne et la variance du scalaire prescrites permettent de fixer les valeurs de α et

β^1 :

$$\begin{cases} \alpha = \bar{\zeta} \left(\frac{\bar{\zeta}(1 - \bar{\zeta})}{\bar{\zeta}'^2} - 1 \right) \\ \beta = (1 - \bar{\zeta}) \left(\frac{\bar{\zeta}(1 - \bar{\zeta})}{\bar{\zeta}'^2} - 1 \right) \end{cases}$$

- le nombre d'onde k_ζ associé à l'échelle de longueur caractéristique du scalaire correspond au maximum de son spectre d'énergie turbulente $E_\zeta(k)$. Le passage entre les deux grandeurs se fait par le biais de la relation : $L_\zeta = 2\pi/k_\zeta$.

Le scalaire ζ ainsi obtenu est remis à l'échelle pour représenter le champ de composition considéré $\Psi = \Psi_{\min} + (\Psi_{\max} - \Psi_{\min})\zeta$.

La [Figure 4.4](#) fournit des exemples de scalaires générés pour différents taux de ségrégation et échelles caractéristiques.

4.2.3 Établissement du noyau de flamme

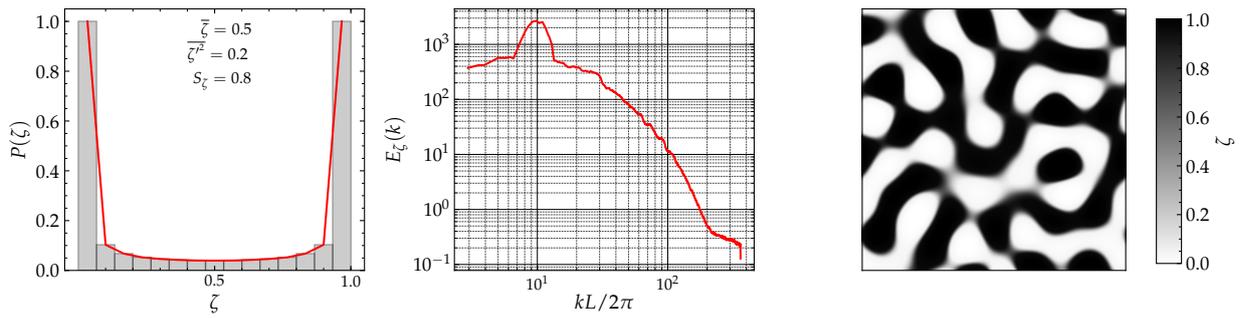
Cette étude est réalisée sur la période de propagation de la flamme qui suit l'allumage. Par conséquent, l'étape d'allumage est ignorée et un noyau de flamme d'iso-octane/air est initialisé au centre du domaine de calcul. Avec son indice d'octane maximal, l'iso-octane est un combustible peu auto-inflammable. Cette propriété permet, dans le cadre de cette étude, de se concentrer uniquement sur les phénomènes de propagation de flamme.

Par ailleurs, à l'opposé d'un noyau de flamme se propageant dans un milieu homogène et stationnaire, où la procédure suivie pour l'initialisation de ce dernier a une influence minime sur son évolution, l'initialisation d'un noyau de flamme dans un milieu hétérogène et instationnaire revêt une importance capitale. Dans un tel milieu, les conditions initiales imposées sur le noyau de flamme ainsi que la nature du mélange dans lequel il évolue influencent fortement son développement. En effet, les effets diffusifs qui dominent le développement du noyau de flamme après son allumage [138] sont accentués par les hétérogénéités du milieu.

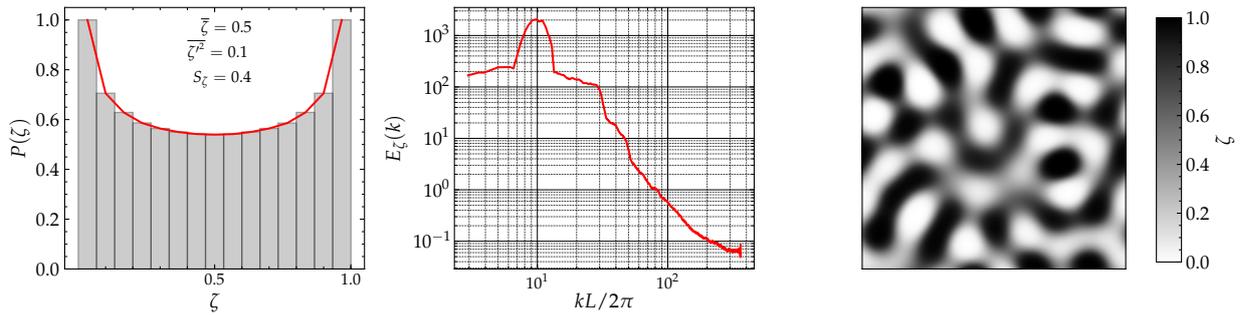
Dans ce travail, la chimie de l'iso-octane est décrite avec le mécanisme développé par [Hasse et al.](#) [139] qui comporte 29 espèces chimiques et 48 réactions élémentaires et qui a été largement validé avec des données expérimentales [140]. Par exemple, les résultats obtenus avec le mécanisme correspondant se comparent bien avec la corrélation des données expérimentales fournies par [Marshall et al.](#) [141].

La présence de multiples espèces dans la description thermo-chimique de la combustion de l'iso-octane implique que les fractions massiques des espèces impliquées doivent être renseignées lors de l'initialisation réalisée par le biais de données préliminaires sur le mélange. Les fractions massiques des espèces et les profils de température correspondants sont donc déduits d'un calcul préliminaire de flamme laminaire prémélangée unidimensionnelle non étirée réalisé avec [Cantera](#) [142]. Le calcul des termes sources étant intrinsèque à la simulation. Le noyau se réduit à un dépôt de gaz brûlés à une température élevée (*cf.* [Figure 4.5a](#)).

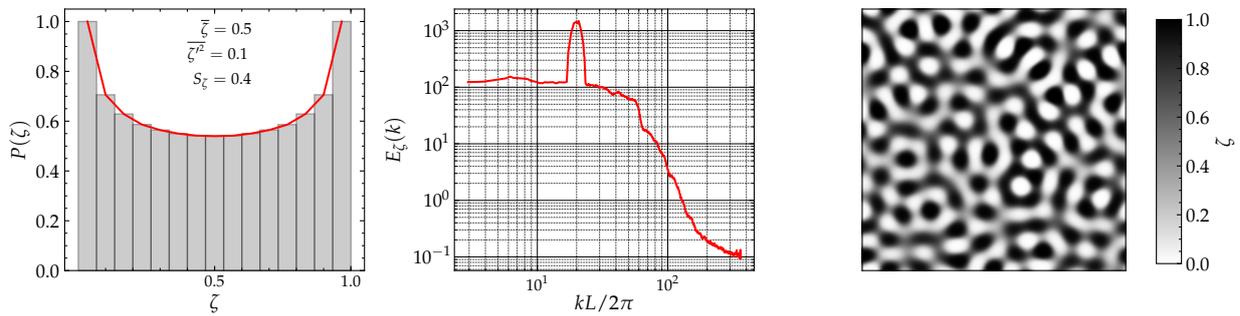
1. Notons que les expressions proposées sont écrites dans le formalisme de Reynolds. On peut néanmoins passer aisément de l'un à l'autre connaissant $\rho(\zeta)$.



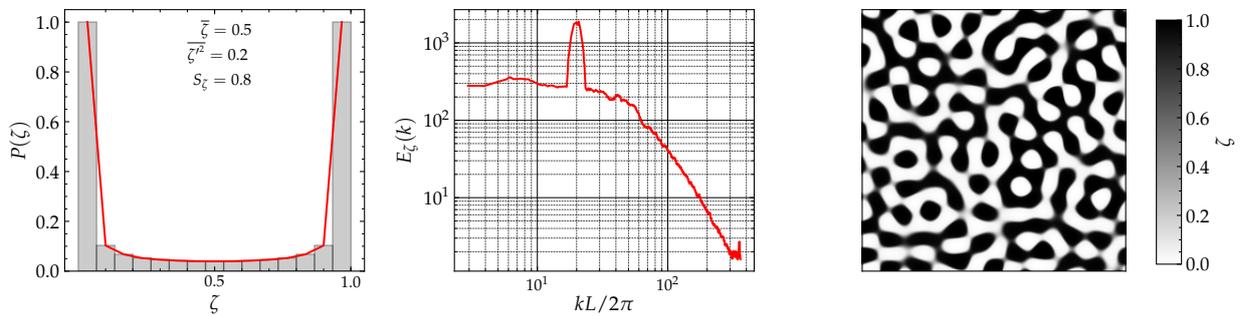
(a) Taux de ségrégation élevé, grande échelle caractéristique



(b) Taux de ségrégation faible, grande échelle caractéristique



(c) Taux de ségrégation faible, petite échelle caractéristique



(d) Taux de ségrégation élevé, petite échelle caractéristique

Figure 4.4 – Exemple de scalaires unitaires générés pour différents taux de ségrégation et échelles caractéristiques : PDF du scalaire (gauche), spectre de l'énergie turbulente du scalaire (milieu) et champ du scalaire (droite)

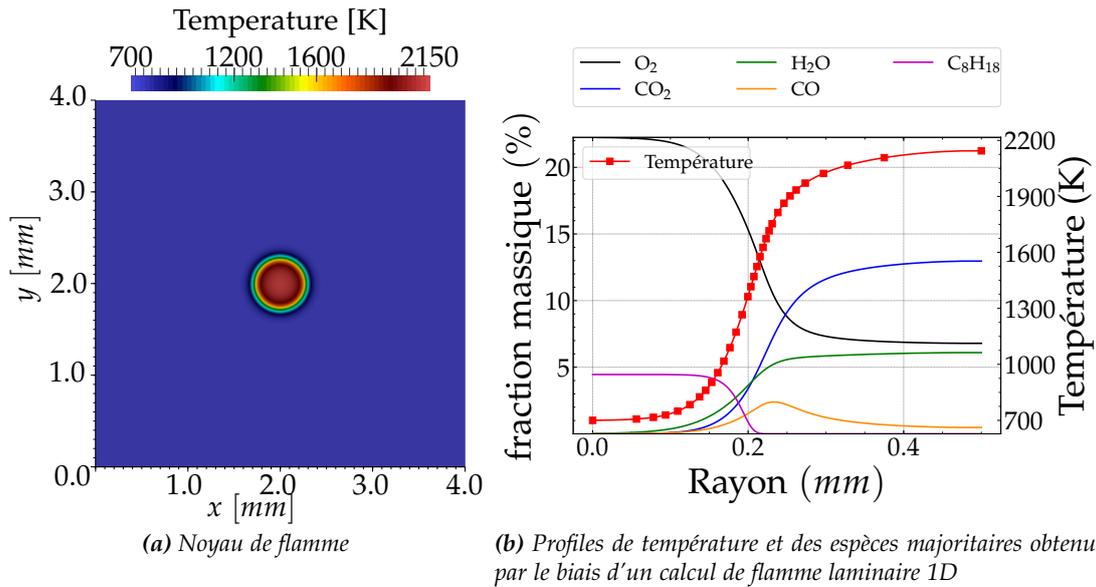


Figure 4.5 – Initialisation du noyau de flamme (gauche) à partir des profils de température et d'espèces (droite).

Des travaux antérieurs (cf. Gruselle [144, 143] et Albin et D'Angelo [145]) ont montré que la taille du noyau est également un paramètre crucial lors de l'initialisation. En effet, d'après des simulations bi-dimensionnelles de propagation en milieu homogène, si le rayon du noyau est plus petit qu'une valeur certaine critique $r_f^c \approx 0.4$ mm, les processus diffusifs, qui ont tendance à homogénéiser la zone du noyau, l'emportent sur les processus réactifs et, par conséquent, le noyau s'éteint progressivement. *A contrario*, un noyau de dimension plus importante perturberait la stratification de composition et le front de flamme atteindrait rapidement les frontières du domaine sans que les mécanismes de turbulence et de stratification disposent du temps nécessaire pour se mettre en place. Lorsque le rayon du noyau est en dehors des deux cas extrêmes cités précédemment, la présence de chaleur et du couple combustible/comburant amorce les réactions et donc la propagation du noyau. Dans ce cas, le noyau commence, d'abord, par se rétrécir sous l'effet des processus diffusifs avant de se développer sous l'effet des réactions chimiques ayant lieu au niveau de l'interface gaz frais/gaz brûlés.

4.3 Base de données DNS

4.3.1 Conditions opératoires

Les conditions opératoires thermodynamiques sont choisies de manière à ce que la configuration soit la plus représentative possible d'un cas de la chambre de combustion CVC. L'ordre de grandeur associé à ces conditions est représentatif des travaux expérimentaux présentés dans la référence [146] et réalisés sur la même thématique². En supposant, que l'air préchauffé et l'iso-octane gazeux sont injectés à des température de 800 K et 300 K respectivement, sous une pression de 5 bars, la température du mélange frais sera aux alentours de 700 K pour des richesses autour de la stœchiométrie. Ces valeurs (700 K et 5 bars) seront retenues

2. Travaux conduits au laboratoire Pprime dans le cadre de la chaire CAPA

comme valeurs de la température moyenne et de la pression des gaz frais.

4.3.2 Caractéristiques de la distribution des gaz frais

4.3.2.1 Moyenne et domaine de variation

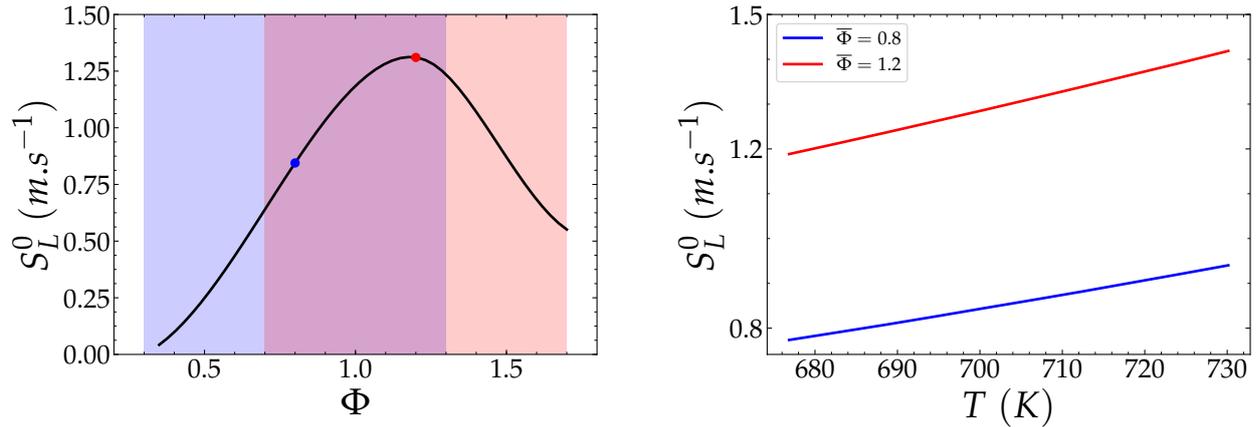
La [Figure 4.1](#) présente trois scénarii pouvant se développer suivant la valeur moyenne de la distribution de la richesse. Dans notre étude, seuls les cas ([Figure 4.1a](#)) et ([Figure 4.1c](#)) sont considérés. En effet, les cas ([Figure 4.1b](#)) et ([Figure 4.1c](#)) sont similaires, de telle sorte que les comportements obtenus dans ces deux cas sont *pratiquement* symétriques, en raison de la forme en cloche de la vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse. En outre, les conditions pauvres en moyenne se rapprochent des conditions de fonctionnement de la majorité des chambres de combustion, notamment de celles du dispositif CVC. Ainsi, le cas ([Figure 4.1c](#)) a été préféré à son “symétrique” riche en moyenne. D’autre part, dans un mélange globalement pauvre, si (i) la distribution de la richesse locale est symétrique par rapport à la moyenne, (ii) la vitesse de propagation dépend quasi linéairement de la richesse et (iii) toutes les richesses sont dans les limites d’inflammabilité alors le taux de dégagement de chaleur moyen par unité de longueur de flamme doit être similaire dans les cas homogènes et hétérogènes. Pour cette raison, ce cas n’est pas considéré. Enfin, le scénario ([Figure 4.1a](#)) a été abondamment étudié dans la littérature et peut constituer une base de comparaison et de validation des analyses.

En résumé, deux niveaux de richesse moyenne sont considérés. Le premier correspond à un mélange proche de la stœchiométrie où la richesse égale à la valeur $\Phi_{S_L^0, \max} (\approx 1.2)$ associée au pic de $S_L^0(\Phi)$, tandis que le second correspond à un mélange pauvre en moyenne $\bar{\Phi} = 0.8$.

Afin d’éviter de biaiser l’identification des tendances, les fluctuations du champ de richesse hétérogène ont été prises identiques de part et d’autre de la valeur moyenne avec une valeur de $\pm\Delta\Phi = 0.5$, cf. [Figure 4.6](#). Un exemple d’un tel déséquilibre est celui d’un cas d’une richesse moyenne pauvre présentant des hétérogénéités asymétriques, avec des excursions plus profondes à partir de la moyenne vers une zone plus riche (pauvre). Pour cet exemple, la probabilité d’avoir une vitesse locale de propagation supérieure (inférieure) à celle associée à la valeur moyenne est plus grande devant celle correspondant à des valeurs inférieures (supérieures). Par conséquent, en moyenne, les hétérogénéités auront tendance à accélérer (ralentir) le front de flamme.

4.3.2.2 Taux de ségrégation

Le taux de ségrégation peut être interprété comme un indicateur du degré d’hétérogénéité et il est la signature de l’amplitude des gradients de la fraction massique combustible ou de la température qui le maintienne. Afin d’étudier l’influence de ce paramètre sur la dynamique de la propagation de la flamme, deux valeurs du taux de ségrégation ont été considérés. La première valeur est 0.8 correspondant à une ségrégation forte du mélange réactif, tandis que la seconde, fixée à 0.4, correspond à une ségrégation modérée. Les figures [4.4a](#) et [4.4b](#) illustrent deux champs scalaires ayant des taux de ségrégation égaux à chacune de ces deux valeurs.



(a) Vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse avec les valeurs moyennes et domaines des fluctuations de richesse retenues. Le point rouge (bleu) et l'aire ombrée rouge (bleue) correspond au cas proche stœchiométrie $\bar{\Phi} = 1.2$ (pauvre $\bar{\Phi} = 0.8$) en moyenne

(b) Vitesse de flamme laminaire en fonction de la température pour les valeurs moyennes de richesse retenues.

Figure 4.6 – Vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse (à gauche) et de la température (à droite) dans les domaines de variation considérés.

4.3.2.3 Échelle caractéristique

La quantité de plissement du front de flamme produit par les hétérogénéités dépend de leur taille. Dans la présente base de données, les échelles de longueur caractéristiques sont imposées en fonction d'un critère basé sur l'épaisseur de la flamme. *A priori*, il est attendu que les poches de tailles supérieures à l'épaisseur de la flamme δ_L^0 introduisent des déformations plus notables du front de flamme que les poches de tailles inférieures à δ_L^0 .

Les épaisseurs de flamme obtenues pour les deux valeurs de richesse moyenne $\bar{\Phi} = 0.8$ et $\bar{\Phi} = 1.2$ sont $\delta_L^0 = 86\mu\text{m}$ et $\delta_L^0 = 69\mu\text{m}$ respectivement, le critère d'efficacité est, *a priori*, validé dans les deux cas si les longueurs caractéristiques sont supérieur ou de l'ordre de $100\mu\text{m}$. Toutefois, il est important de rappeler que la diffusion moléculaire et le mélange turbulent ayant lieu dans les gaz frais ont tendance à homogénéiser le mélange, de sorte que les échelles de longueur "efficace" sur le front de flamme sont plus petites que celles initialement imposées. Ainsi, deux valeurs ont été retenues pour la longueur caractéristique des hétérogénéités : $400\mu\text{m}$ et $200\mu\text{m}$. Les figures 4.4a et 4.4d illustrent des champs scalaires correspondants à ces deux valeurs.

4.3.3 Caractéristiques de la turbulence

Comme précisé précédemment, un écoulement THI est considéré en adoptant un spectre de Passot-Pouquet. Ce dernier est caractérisé par une échelle de longueur qui peut être exprimée en fonction de l'échelle intégrale l_t et de la moyenne quadratique des fluctuations de vitesse u_{rms} pouvant être interprétée en terme d'intensité turbulente. L'échelle intégrale dans les conditions du dispositif expérimental CVC étudié au laboratoire [146] est de l'ordre du millimètre. Ainsi, dans les configurations réalisées dans cette étude l_t a été fixée à 0.4 mm . En outre, les moyennes quadratiques des fluctuations de vitesse turbulentes sont initialisées de

$\bar{\Phi}$	0.8	1.2
Turbulence modérée	1.0	1.5
Turbulence Intense	5.0	7.5

Tableau 4.1 – Récapitulatif des moyennes quadratiques des fluctuations de vitesse u_{rms} en fonction de la richesse moyenne

sorte à parcourir des régimes de combustion qui présentent un intérêt pour les applications pratiques. En fonction de la valeur de la richesse moyenne de la distribution qui définit la vitesse laminaire de flamme, deux valeurs de u_{rms} sont choisies, afin que le régime de combustion associé (en moyenne) se positionne au voisinage de (i) la limite des flammes plissées et des flammes plissées avec poches, et de (ii) celle délimitant le régime du réacteur parfaitement agité et la zone des flammes épaissies. Ces valeurs sont récapitulées dans le [Tableau 4.1](#) et les diagrammes de combustion turbulente associés sont représentés sur la [Figure 7.1](#) pour le cas proche stœchiométrie en moyenne $\bar{\Phi} = 1.2$. Il est à noter en particulier, que la combustion en présence des hétérogénéités de richesse dans une telle configuration est susceptible de s’opérer localement sous différents régimes.

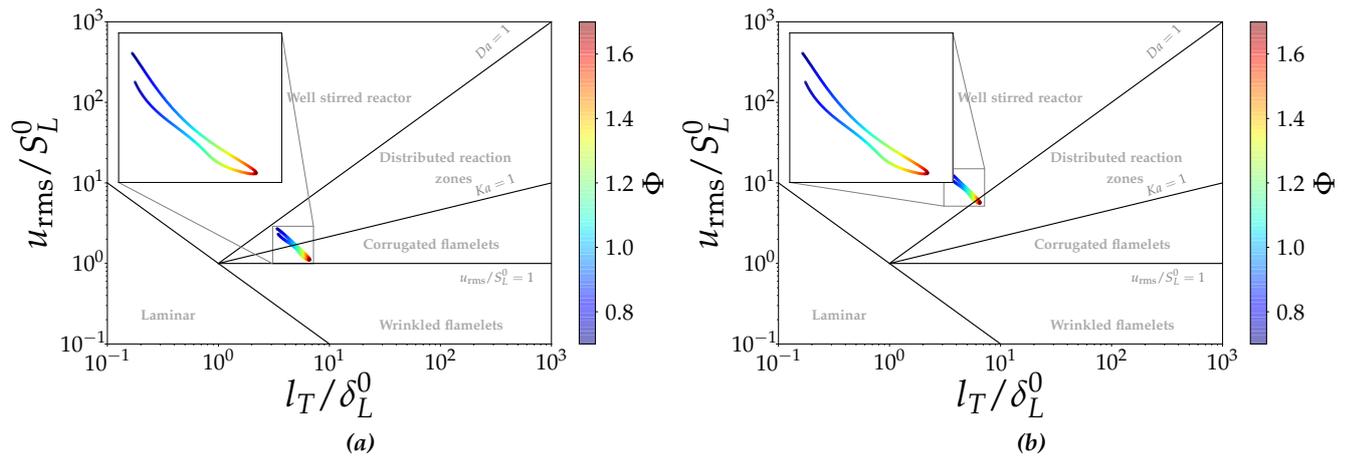


Figure 4.7 – Diagramme de la combustion turbulente pour les deux conditions turbulentes considérées pour le cas $\bar{\Phi} = 1.2$. À gauche : turbulence modérée. À droite : turbulence intense

4.3.4 Récapitulatif des configurations

Pour l’ensemble des cas constituant la présente base de données DNS, le domaine est discrétisé en un maillage de 256×256 points. Cette discrétisation a été fixée en se basant sur les critères de résolution spatiale mentionnés dans le chapitre 2. Le [Tableau 4.2](#) récapitule l’ensemble des caractéristiques ainsi que les entrées de la base de données générée. De plus, les paramètres associés à la distribution des hétérogénéités sont récapitulés dans le [Tableau 4.3](#).

En considérant les cas homogènes de référence, la base de données compte 78 configurations. Ces dernières sont identifiables grâce à une nomenclature qui renvoie vers les valeurs des paramètres étudiés. Chaque configuration sera désignée par un identifiant sous la forme $WXYZ-\alpha-\beta$. La signification de cette nomenclature est présentée sur la [Tableau 4.4](#).

Conditions opératoires	\bar{T}_u (K)	700.00			
	$\bar{\Phi}_u$	0.80		1.20	
	P (bar)	5.00			
	$\Delta\Phi_u$	0.50			
	ΔT_u (K)	90		86	
Turbulence	l_t (mm)	0.40			
	u_{rms} (m.s ⁻¹)	1.00	5.00	1.50	7.50
	Re_t	28.91	144.54	43.22	223.56
	τ_t (μ s)	381.07	76.21	262.81	50.81
Combustion	S_L^0 (m.s ⁻¹)	0.98		1.42	
	δ_L^0 (μ m)	86.09		72.39	
	τ_F (μ s)	79.11		44.37	
	Da	4.82	0.96	5.92	1.15
	Ka	1.11	12.52	1.11	13.00

Tableau 4.2 – Caractéristiques des simulations de la base de données DNS. Les paramètres de turbulence et les nombre adimensionnés (Da , Ka et Re_t) sont donnés pour les champs initiaux. Les valeurs en rouge et bleu correspondent aux configurations de $\bar{\Phi} = 1.2$ et $\bar{\Phi} = 0.8$ respectivement.

Taux de ségrégation S_Φ	0.4	0.8
Échelle de longueur caractéristique (μ m)	400	200

Tableau 4.3 – Caractéristiques des distributions des hétérogénéités considérées dans les simulations de la base de données DNS.

4.3.5 Convergence statistique des calculs

Les grandeurs physiques fournies par la résolution des configuration DNS en chaque point du maillage, représentent, d'un point de vue statistique, une réalisation individuelle. Compte tenu du caractère aléatoire de la turbulence, une multiplication des réalisations est nécessaire afin d'obtenir des statistiques qui convergent et que les tendances observées soient représentatives des phénomènes physiques. Or, en pratique, cette multiplication de réalisations est impossible à réaliser en raison du coût onéreux des ressources numériques nécessaires pour sa mise en œuvre. Néanmoins, il est possible d'accélérer la convergence des statistiques en s'appuyant sur des considérations physiques et numériques. Dans cette optique, le caractère périodique de la présente configuration permet de "simuler" le dépôt du noyau de flamme dans différents endroits du champ de vitesse turbulent. En effet, à partir d'un seul tirage du champ de vitesse, trois autres champs sont générés en divisant le champ initial en quatre quadrants qui sont intervertis par symétrie autour de l'axe x_1 , x_2 ainsi que la combinaison des deux. Ce processus a été mis en œuvre par [Chevillard \[147\]](#) à des fins de modélisation RANS avec l'approche CFM des flammes de prémélange. Une schématisation de ce procédé est donnée sur la [Figure 4.8](#) et une illustration de son application est rapportée sur la [Figure 4.9](#).

D'autre part, dans la présente étude, chaque distribution a été utilisée pour deux calculs complémentaires : le premier calcul utilisait directement le champ d'hétérogénéité généré, le second calcul a été réalisé en s'appuyant sur la distribution complémentaire par rapport à la valeur moyenne fixée. Ceci a été réalisé dans le but de s'assurer que la moyenne des

Lettre	Signification	Valeurs		
W	Richesse moyenne initiale du mélange $\overline{\Phi}_u$	L	Cas pauvre en moyenne $\overline{\Phi} = 0.8$	
		S	Cas proche stœchiométrie en moyenne $\overline{\Phi} = 1.2$	
X	Nature de l'écoulement	L	Écoulement laminaire	
		T	Écoulement turbulent	
Y	Taille caractéristique des poches hétérogènes	B	Poches de taille relativement grande $L_\zeta = 400\mu\text{m}$	
		M	Poches de taille modérée $L_\zeta = 200\mu\text{m}$	
		N	Absence de poches (cas homogène)	
Z	Taux de ségrégation de la distribution	H	Taux de ségrégation élevé $S_\zeta = 0.8$	
		M	Taux de ségrégation modéré $S_\zeta = 0.4$	
		N	Absence d'hétérogénéités (cas homogène)	
α	Nature de l'hétérogénéité considérée	F	Hétérogénéités de richesse	
		T	Hétérogénéités de température	
		FT	Hétérogénéités de richesse et de température	
		N	Absence d'hétérogénéités (cas homogène)	
β	Niveau de turbulence de l'écoulement	H	Turbulence intense	$u_{rms} = 5.0\text{m.s}^{-1}$ pour $\overline{\Phi} = 0.8$ $u_{rms} = 7.5\text{m.s}^{-1}$ pour $\overline{\Phi} = 1.2$
			M	Turbulence modérée
		N		Absence de turbulence, écoulement laminaire

Tableau 4.4 – Nomenclature des différentes configurations considérées dans la base de données DNS.

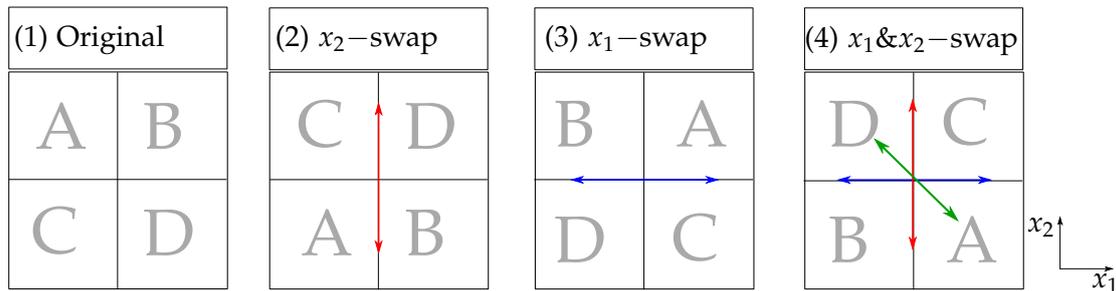


Figure 4.8 – Schématisation du procédé d'interversion des quadrants pour représenter le dépôt du noyau de flamme à différents endroits d'un champ turbulent

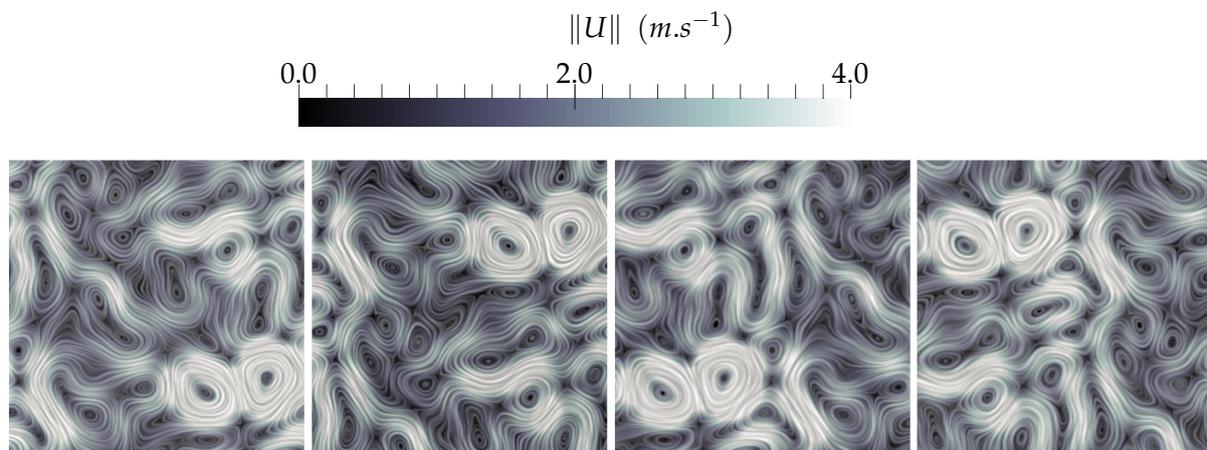


Figure 4.9 – Illustration du procédé d'interversion des quadrants d'un champ de vitesse. Superposition des contours des champs de vorticité et des champs de vitesse générés

deux champs à l'initialisation était strictement la moyenne scalaire correspondant aux configurations homogènes à chaque point de maillage, et par conséquent, éviter que les tendances observées soient biaisées par la distribution spatiale. Un exemple d'un tel couple de distributions complémentaires est fourni dans la [Figure 4.10](#).

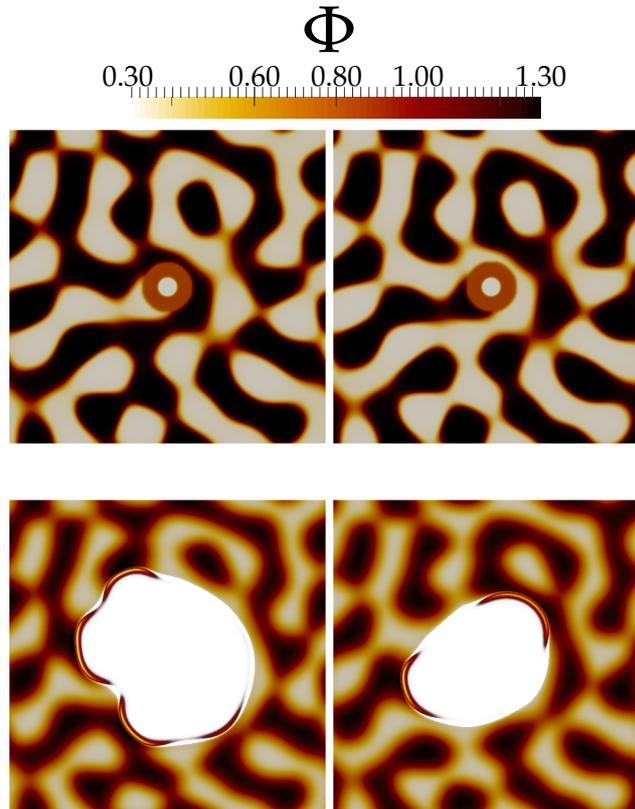


Figure 4.10 – Propagation de flamme laminaire dans des champs de richesses hétérogènes pour un mélange initialement pauvre en moyenne ($\bar{\Phi} = 0.8$). Les cas à gauche et à droite correspondent respectivement à deux distributions de richesse complémentaires (les valeurs de richesse élevées et faibles ont été échangées). En haut : instant initial, en bas $5 \tau_F$.

Ainsi, pour une configuration stratifiée laminaire, deux calculs avec des champs scalaires complémentaires sont réalisés. On différenciera ces deux calculs avec les indices 1 et 2, par exemple pour la configuration laminaire hétérogène en richesse avec une grande échelle caractéristique et un taux de ségrégation élevé, on désignera ces deux calculs par LLBH-F-N-1 et LLBH-F-N-2 respectivement.

Pour les configurations turbulente, la complémentarité des distributions est combinée aux quatre interversions du champ de vitesse ce qui conduit à huit calculs par configuration. À l'instar des calculs laminaires, ces calculs sont indexés par un indice allant de 1 à 8. Les calculs indexés par une valeur entre 1 et 4 sont conduits avec la première distribution du scalaire, tandis que ceux correspondant à une valeur entre 5 et 8 sont conduits sur la base de la distribution scalaire complémentaire. La figure [Figure 4.11](#) illustre cette indexation.

D'autre part, les cas homogènes qui serviront de référence, sont réalisés par le biais d'un seul calcul pour les configurations laminaires et de quatre (correspondant à l'intervention du champ de vitesse) pour les configurations turbulentes.

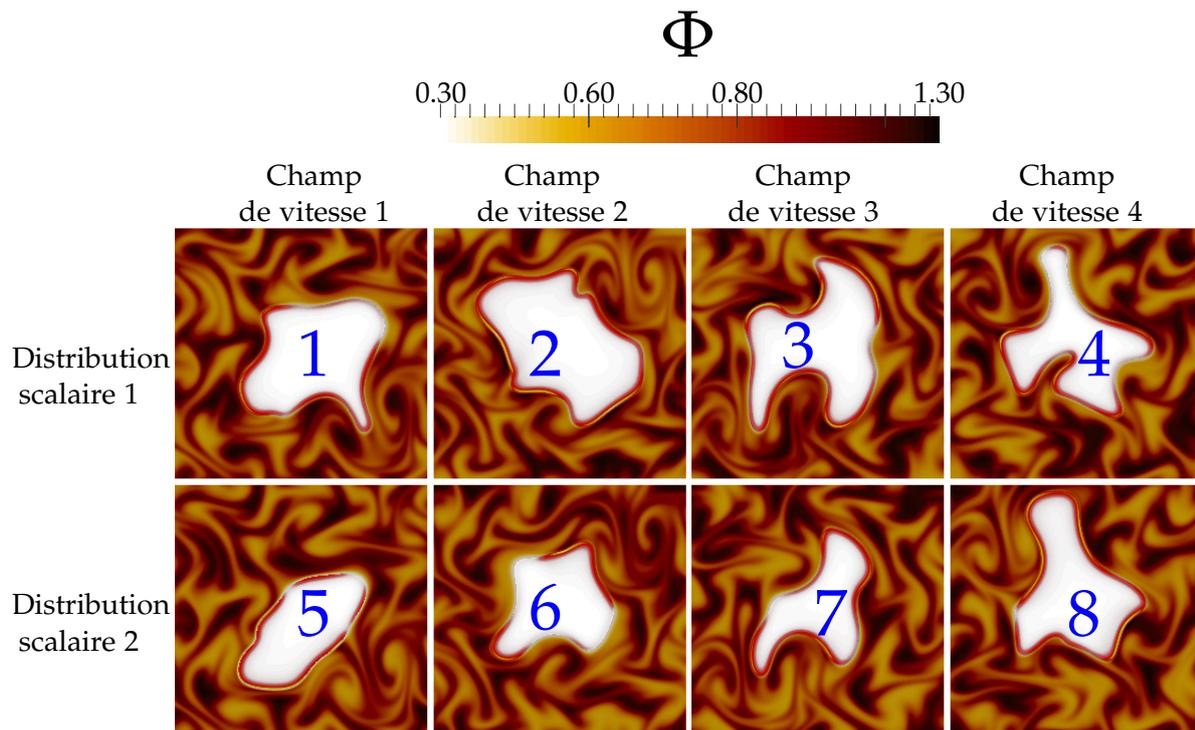


Figure 4.11 – Indexation des calculs turbulents hétérogènes. Champs de dégagement de chaleur superposés sur les champs de la richesse locale pour les huit calculs correspondant au cas LTBH-F-W à l'instant $5\tau_F$.

4.4 Récapitulatif

Enfin, la base de données DNS générée comporte 452 calculs au total, répartis suivant 78 configurations. Ces calculs ont été conduits sur les calculateurs TURING de l'IDRIS et OCCIGEN du CINES. Un calcul 2D parallèle correspond à 9.2k heures CPU (resp. 29.2kh) sur OCCIGEN (TURING) sur un ensemble de 256 processeurs (resp. 512) ce qui constitue un total de 2.5M heures CPU sur OCCIGEN (6M sur TURING). En raison du nombre conséquent des simulations, un outil logiciel a été développé, dans le cadre de cette thèse, en vue de l'automatisation des processus de préparation des configurations, de la soumission des calculs sur les centres de calculs, ainsi que pour la gestion du stockage des données générées.

Propagation d'un noyau de flamme dans un milieu laminaire stratifié

Sommaire

5.1	Introduction	88
5.2	Caractérisation des propriétés fondamentales de la flamme	88
5.3	Propriétés de la variable de progrès	91
5.3.1	Choix de la variable de progrès	91
5.3.2	Coefficient de diffusion de la variable de progrès	93
5.3.3	Taux de production de la variable de progrès	94
5.4	Analyses préliminaires	95
5.5	Influence de la nature de l'hétérogénéité	97
5.6	Influence des caractéristiques de la distribution	99
5.6.1	Échelle de longueur caractéristique	99
5.6.2	Taux de ségrégation	104
5.6.3	Influence relative des paramètres de la distribution	110
5.7	Effets des hétérogénéités sur les propriétés locales de la flamme	112
5.8	Conclusion	115

5.1 Introduction

Comme cela a été évoqué précédemment, la compréhension de la propagation d'un front de flamme dans un milieu turbulent hétérogène en composition nécessite d'isoler et de découpler chaque processus élémentaire impliqué afin de jauger sa contribution à l'ensemble du phénomène de propagation. À ce titre, les effets associés à la turbulence sont, dans un premier temps, omis et on se propose, dans la suite, d'étudier l'évolution d'un noyau de flamme laminaire, aussi bien dans des milieux homogènes que dans des milieux stratifiés. D'une part, dans ces derniers, les hétérogénéités seront découplées en terme de leurs natures (richesse et température), afin d'évaluer leurs influences potentielles respectives et couplés. D'autre part, un accent particulier sera mis sur les effets induits par les caractéristiques du champ hétérogène (*i.e.* richesse et/ou température) sur le développement du noyau de flamme.

Avant de réaliser une telle étude, l'ouverture du présent chapitre sera consacrée à l'introduction des méthodes d'évaluation des propriétés fondamentales de flamme et en particulier à la définition de la variable de progrès. Des analyses préliminaires sur la propagation dans une configuration mono-dimensionnelle seront ensuite détaillées. Puis, une étude de l'influence de la nature de l'hétérogénéité est proposée. Grâce à celle-ci, l'hétérogénéité prédominante sera étudiée en mettant en lumière l'impact des différentes caractéristiques de sa distribution sur les propriétés globales et locales de la flamme.

5.2 Caractérisation des propriétés fondamentales de la flamme

Dans le cadre de l'étude des flammes laminaires, deux variables sont souvent utilisées pour caractériser de manière synthétique les processus de combustion. Il s'agit de la vitesse de flamme et de son épaisseur. Ainsi, une évaluation correcte de ces deux quantités est indispensable pour mener à bien les analyses d'un noyau de flamme en propagation dans un milieu stratifié. Dans cette optique, cette section a pour objectif de rappeler ou d'introduire les méthodes utilisées dans cette étude pour estimer la vitesse de propagation et l'épaisseur de flamme. La définition et la méthode de calcul de la vitesse de propagation ont déjà été explicitées dans le chapitre 2. En revanche, les différentes définitions de l'épaisseur de flamme n'ont pas encore été abordées.

Deux définitions de l'épaisseur de flamme sont couramment utilisées. [Zeldovich \[148\]](#) a été le premier à introduire «l'épaisseur caractéristique» $\delta = \lambda / c_p \rho_u S_L$, où λ est la conductivité thermique, c_p la capacité thermique à pression constante, ρ_u la densité du mélange des gaz frais et enfin S_L la vitesse de flamme. Dans cette définition, δ correspond à une mesure de l'épaisseur dans laquelle le mélange frais est chauffé jusqu'à atteindre la température d'inflammation au niveau de la zone de réaction. [Spalding \[149\]](#), quant à lui, définit l'épaisseur de la flamme comme un rapport entre la différence des températures gaz frais/gaz brûlés et le gradient de température maximal au point d'inflexion de T , *i.e.* $\delta = (T_b - T_u) / \max(|\nabla T|)$. En considérant la variable de progrès basée sur la température, *i.e.* $c = (T - T_u) / (T_b - T_u)$, l'épaisseur de flamme δ devient :

$$\delta = 1 / \max(|\nabla c|) \quad (5.1)$$

L'équation (5.1) introduit une définition plus générale de l'épaisseur de flamme impliquant la variable de progrès c et qui n'est pas nécessairement définie sur la base de la température.

Dans le contexte de flammes monodimensionnelles, de telles définitions sont assez simples à utiliser, puisque les grandeurs impliquées peuvent être aisément calculées. En revanche, pour une flamme de dimension supérieure (*i.e.* bi- ou tridimensionnelle) évoluant dans un mélange hétérogène de gaz frais, les grandeurs telles que l'épaisseur de flamme, les propriétés thermodynamiques (ρ_u , T_u , c_p) et diffusives (λ) dans les gaz frais, varient localement. Il est alors nécessaire d'introduire une approche "locale" pour évaluer l'épaisseur de la flamme.

Une des possibilités consisterait d'appliquer une approche géométrique dans laquelle la valeur de δ , dans un point, correspond à la distance suivant la normale à la ligne d'iso-valeur c_1 et l'iso-contour c_2 de la variable de progrès (cf. Figure 5.1). Les deux valeurs c_1 et c_2 , sont choisis de sorte à ce qu'elles délimitent le domaine de la variable de progrès où le taux de dégagement de chaleur est supérieur à 5% de sa valeur maximale, de manière à ce que leurs iso-lignes définissent un *flame brush*, (cf. Figure 5.2). En d'autres termes, les valeurs de δ représentent une mesure de distances d'une interface Γ_1 (iso-ligne c_1) à une autre, Γ_2 (iso-ligne c_2).

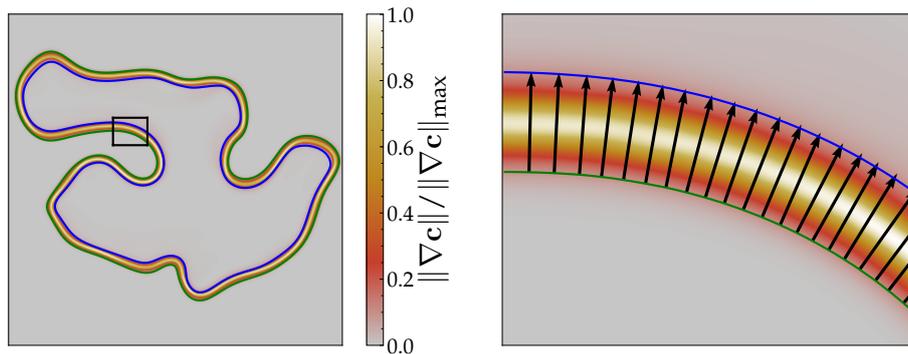


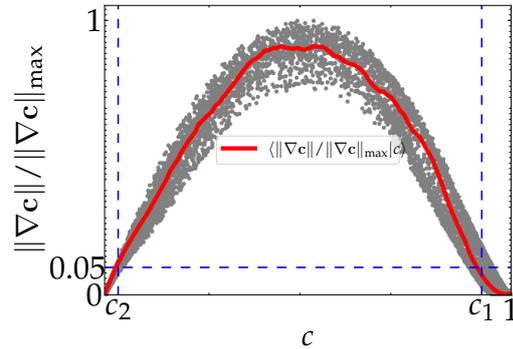
Figure 5.1 – Méthodologie de calcul de l'épaisseur de flamme δ . À gauche, iso-contours c_1 et c_2 de la variable de progrès superposés au champ de la norme du gradient de la variable de progrès. À droite, normales à l'iso-surface c_1 (zoom sur une partie du flame brush définie par le rectangle noir à gauche).

En pratique, une méthode de suivi d'interfaces, telle que la "level-set" [150], pourrait être applicable dans ce contexte. Cependant, les méthodes level-set ont un coût algorithmique relativement élevé. En effet, le calcul est effectué en tous les points du maillage, puisque les level-set sont conçues pour des problèmes dans lesquels l'interface peut avancer dans certains endroits et reculer dans d'autres. Pour les problèmes impliquant des interfaces qui évoluent dans un sens unique, tel que le nôtre, où l'interface initiale Γ_1 ne peut qu'avancer, Osher et Sethian [151] ont pu réduire considérablement le coût des level-set en introduisant la technique de *fast marching*. Cette dernière n'évalue la distance qu'au voisinage de l'interface en déplacement, ce qui réduit la complexité à $\mathcal{O}(n \log n)$, où n est le nombre total de points du maillage. De plus, elle ne suppose pas de représentation paramétrique¹ du contour à suivre,

1. En géométrie, une représentation paramétrique est une équation définissant un ensemble géométrique,

et donc, elle est robuste à des changements de topologie.

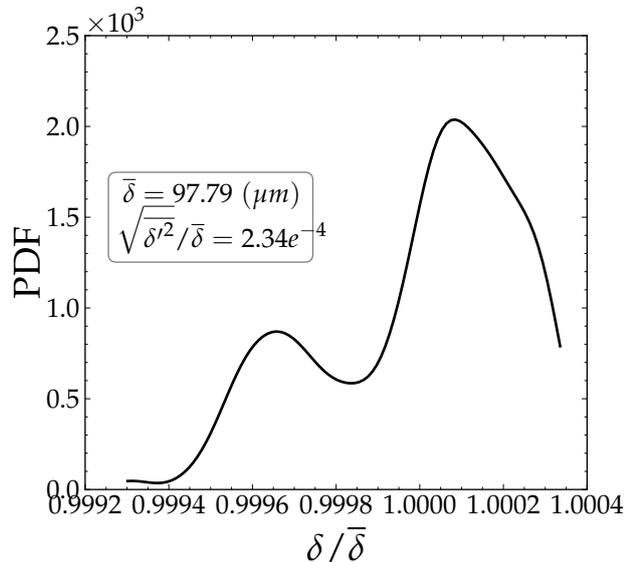
Figure 5.2 – Méthodologie de calcul de l'épaisseur de flamme. Définition des valeurs c_1 et c_2 délimitant le flamme brush à partir du profil de la norme du gradient de c .



Les détails de la méthode *fast marching* ne seront pas présentés ici et le lecteur intéressé pourra, sur ce sujet, consulter la référence [151]. Plusieurs bibliothèques offrant la possibilité d'appliquer les techniques de *fast marching* sont disponibles. Dans le cadre de ce travail de thèse, la bibliothèque *scikit-fmm* [152] a été utilisée dans les programmes de post-traitement pour estimer avec précision l'épaisseur locale des flammes simulées.

Afin de valider la méthode décrite ci-dessus, le cas homogène LLNN-N-N a été considéré. Puisqu'il s'agit d'un cas homogène, il est attendu que l'épaisseur de flamme locale soit constante sur tout les points du front de flamme. L'application de la dite méthode sur ce cas, restitue effectivement une distribution très étroite de l'épaisseur de flamme, avec une RMS normalisée de l'ordre de 0.02% (cf. Figure 5.3) ce qui présente une validation satisfaisante de cette approche et de son implémentation.

Figure 5.3 – PDF de l'épaisseur de flamme obtenue par la méthode géométrique appliqué sur le cas homogène LLNN-N-N à $t = 5\tau_c$.



comme une droite ou un arc géométrique, ou plus généralement un sous-espace affine ou une hypersurface.

5.3 Propriétés de la variable de progrès

Qu'il s'inscrive dans le cadre de l'approche géométrique, du mélange turbulent ou dans celui d'une étude plus globale, l'ensemble des analyses et des post-traitements effectués sur la base de données DNS repose sur la caractérisation de la flamme par la variable de progrès. De ce fait, la définition de cette quantité doit être judicieusement choisie, en tenant compte des critères physiques et numériques qu'une telle variable doit vérifier. Cette section a pour objectif d'introduire une définition adéquate de la variable de progrès. En outre, l'équation de transport de cette dernière implique des termes diffusifs et réactifs faisant appel à un coefficient de diffusion et un terme source. Les propriétés de ces derniers seront également explicités dans cette section.

5.3.1 Choix de la variable de progrès

Dans la sous-section 2.9.2 les variables de composition telles que la variable de progrès ont été introduites et leurs équations de transport respectives ont été développées dans un contexte de combustion stratifiée. En raison de la multitude des choix possibles, la variable de progrès basée sur les fractions massiques des espèces et de la fraction de mélange est préférée à celle basée sur la température. En effet, les calculs constituant la base de données DNS sont conduits à l'aide d'un mécanisme multi-espèces, ce qui permet d'évaluer les fractions de mélange élémentaires. Ainsi, la variable de progrès c est définie à l'aide des fractions massiques de certaines espèces présentes dans les produits brûlés Y_k et de leurs valeurs à l'équilibre sous la forme :

$$c = \frac{\sum_{k \in \mathcal{S}} Y_k}{\sum_{k \in \mathcal{S}} Y_k^{eq}(\xi)} \quad (5.2)$$

où \mathcal{S} est l'ensemble des espèces choisies pour construire la variable de progrès c et $Y_k^{eq}(\xi)$ la fraction massique de l'espèce k à l'équilibre.

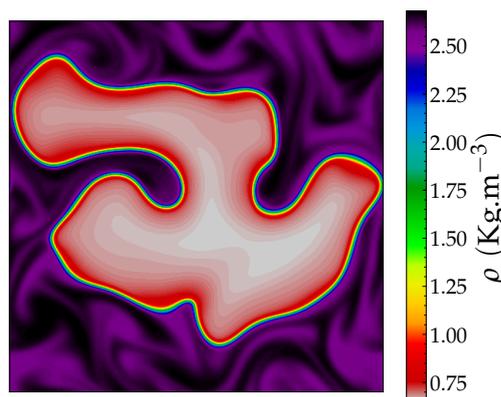


Figure 5.4 – Champ de masse volumique pour le cas proche stœchiométrie en moyenne, modérément turbulent, évoluant dans une stratification de richesse comportant des poches de taille caractéristique relativement importante et un taux de ségrégation élevé STBH-F-W-3.

Parmi les définitions envisageables, on trouve celles basées sur :

- les fractions massiques du couple H_2/H_2O [b] :

$$c = \frac{Y_{H_2O} + Y_{H_2}}{Y_{H_2O}^{eq} + Y_{H_2}^{eq}} , \quad (5.3)$$

- les fractions massiques du triplet $CO/CO_2/H_2O$ [c] :

$$c = \frac{Y_{H_2O} + Y_{CO_2} + Y_{CO}}{Y_{H_2O}^{eq} + Y_{CO_2}^{eq} + Y_{CO}^{eq}} , \quad (5.4)$$

- les fractions massiques du couple CO/CO_2 [d] :

$$c = \frac{Y_{CO_2} + Y_{CO}}{Y_{CO_2}^{eq} + Y_{CO}^{eq}} . \quad (5.5)$$

En plus, dans le cas où les conditions sont pauvre en richesse, il est possible de considérer une variable de progrès basée sur la fraction massique du combustible et la fraction de mélange :

$$c = 1 - \frac{Y_F}{\xi} \quad (5.6)$$

En se basant sur le cas STBH-F-W-3 de notre base de données DNS, dont le champ de masse volumique est illustré sur la [Figure 5.4](#), la [Figure 5.5](#) montre les contours des iso-valeurs de c obtenus en considérant ces quatre définitions.

En adoptant la définition de c basée sur la fraction de mélange et sur la fraction massique du combustible (Eq.(5.6)), on obtient des iso-lignes très proches les unes des autres. Cela est dû au fait que le combustible est la première espèce à réagir et se décompose très rapidement. Ainsi, la variation des valeurs de la variable de progrès s'effectue sur un nombre faible de points du maillage. Par conséquent, les gradients associés sont susceptibles d'être calculés avec une certaine imprécision. Pour cette raison, cette définition n'est pas retenue.

La réalisation DNS considérée est dans un régime où aucune échelle de turbulence ne pénètre dans le front de flamme pour le distordre, ce qui conduit normalement à des iso-lignes de c parallèles entre elles. Les définitions impliquant l'hydrogène (H_2/H_2O) et ($CO/CO_2/H_2O$) respectent cette hypothèse pour toutes les iso-lignes hormis celles au voisinage de l'unité (du côté des gaz brûlés), en l'occurrence $c = 0.99$, qui est relativement éloignée des autres et non parallèle avec elles. En effet, les espèces intermédiaires et les radicaux contenant de l'hydrogène continuent à réagir dans les gaz brûlés. Ainsi, ces définitions sont également rejetées.

Toutefois, en introduisant une variable de progrès basée sur le couple CO/CO_2 , l'iso-ligne $c = 0.99$ se rapproche des autres et le critère de "parallélisme" est respecté. Cette définition pourrait donc être considérée. En effet, elle allie une bonne discrétisation sur le maillage à une monotonie entre 0 et 1 et présente des iso- c bien parallèles les unes aux autres. De plus,

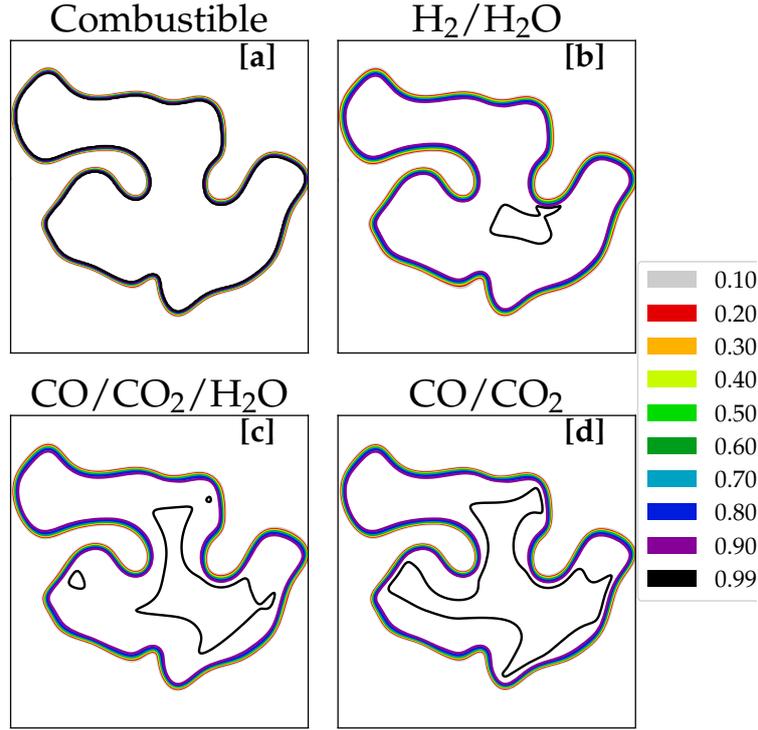


Figure 5.5 – Iso-contours de la variable de progrès pour *STBH-F-W-3* à $8 \tau_F$ calculées avec les définitions basées sur (a) la consommation de combustible Eq.(5.6), (b) le couple H_2/H_2O Eq.(5.3), (c) le triplet $CO/CO_2/H_2O$ Eq.(5.4) et (d) le couple CO/CO_2 Eq.(5.5).

l'équation de transport de la variable de progrès utilisant une telle définition est plus simple à manipuler que celle basée sur le triplet $CO/CO_2/H_2O$.

5.3.2 Coefficient de diffusion de la variable de progrès

Le terme diffusif présent dans l'équation de transport de la variable de progrès Eq. (2.88), \mathcal{T}_D s'écrit :

$$\mathcal{T}_D = \nabla(\rho D_c \nabla c)$$

où D_c est le coefficient de diffusion de la variable de progrès c . Compte tenu de la définition retenue pour c , D_c peut être estimé à partir des coefficients de diffusion D_k , et des gradients des fractions massiques ∇Y_k des espèces CO et CO_2 (cf. A) :

$$D_c = \frac{\sum_{k \in \mathcal{S}} D_k \|\nabla Y_k\|}{\sum_{k \in \mathcal{S}} \|\nabla Y_k\|} \quad \text{avec} \quad \mathcal{S} = \{CO_2, CO\} \quad (5.7)$$

Le coefficient D_c apparaît également dans d'autres termes de l'équation de transport de la variable de progrès. Ces termes sont associés au taux de dissipation scalaire de la fraction de mélange $\chi_{\bar{c}}$, au taux de dissipation scalaire croisée $\chi_{c,\bar{c}}$ et à la diffusion différentielle. Ainsi, une estimation correcte de D_c paraît primordial à la modélisation du transport de c .

La Figure 5.6 illustre l'évolution du coefficient de diffusion D_c en fonction de la variable de progrès pour le cas *SLNN-N-N-1*, ainsi que les coefficients de diffusion des espèces CO et

CO₂. D'après l'équation (5.7), le coefficient D_c est contraint de prendre des valeurs qui sont limitées par celles des coefficients de diffusion des espèces CO et CO₂, comme montré sur la Figure 5.6. En revanche, les gradients des espèces entrant dans la définition de la variable de progrès prennent des valeurs très faibles aux voisinages des gaz frais ($c \approx 0$) et des gaz brûlés ($c \approx 1$) ce qui peut influencer l'estimation de D_c dans ces zones. Pour s'affranchir de cette limitation, l'estimation de D_c se fait conformément à l'équation (5.7) sur le domaine $[\varepsilon, 1 - \varepsilon]$ de la variable de progrès où $\sum_{k \in \mathcal{S}} \|\nabla Y_k\|$ est non négligeable, tandis que sur $[0, \varepsilon]$ et $[1 - \varepsilon, 1]$ les valeurs de D_c sont obtenues par extrapolation. Dans cette procédure ε est de l'ordre de 0.05. Un autre point intéressant pouvant être relevé de la Figure 5.6, réside dans le fait que le coefficient de diffusion de la variable de progrès D_c et celui associée à l'espèce CO₂ sont très proches. Cela est attribué à la prépondérance, en termes des fractions massiques, de CO₂ sur CO. Par conséquent, considérer le coefficient de diffusion de CO₂ en tant que D_c fournit une bonne approximation, dans les conditions de la configuration SLNN-N-N-1. Toutefois, lorsque la riche du mélange est relativement élevée, cette approximation doit être ré-ajustée puisque la fraction massique de CO devient prépondérante.

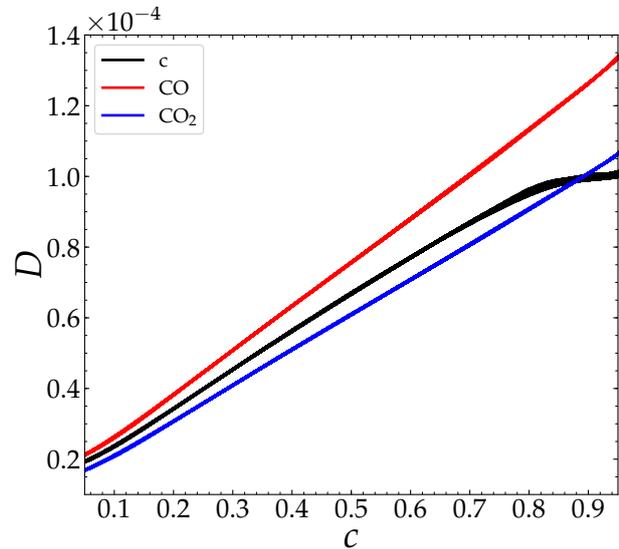


Figure 5.6 – Profils du coefficient de diffusion D_c et ceux des espèces CO et CO₂ en fonction de la variable de progrès c pour le cas SLNN-N-N-1

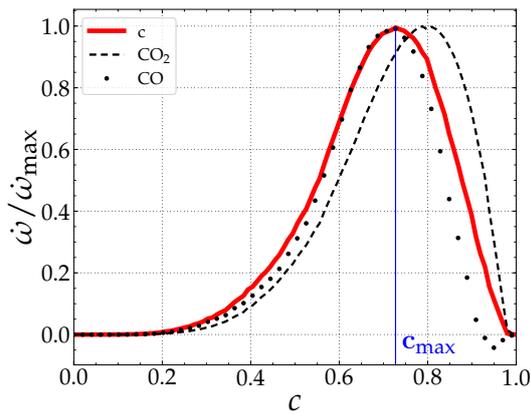
5.3.3 Taux de production de la variable de progrès

Le taux de production s'écrit pour la variable de progrès c (cf. Annexe A) :

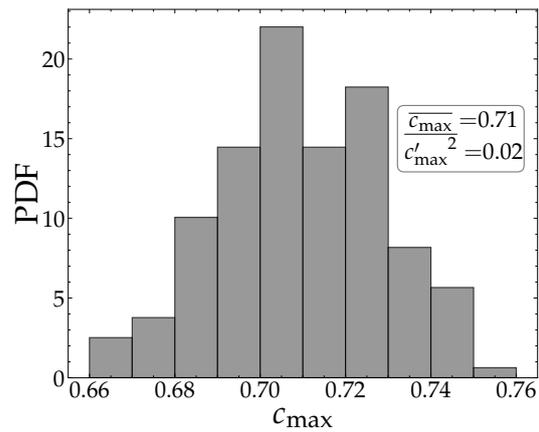
$$\dot{\omega}_c = \frac{\sum_{k \in \mathcal{S}} \dot{\omega}_k}{\sum_{k \in \mathcal{S}} Y_k^{eq}} \quad \text{avec} \quad \mathcal{S} = \{\text{CO}_2, \text{CO}\} \quad (5.8)$$

où $\dot{\omega}_k$ et Y_k^{eq} sont respectivement le taux de production et la fraction massique à l'équilibre de l'espèce k . La Figure 5.7a reporte les profils normalisés du taux de production de la variable de progrès et des espèces CO et CO₂ en fonction de la variable de progrès c pour le cas SLNN-N-N-1. Comme pour le CO₂ et le CO, le maximum du taux de production de la variable de progrès est décalé vers les gaz brûlés et la valeur de c correspondante (c_{\max}) est égale à celle associée au maximum de $\dot{\omega}_{\text{CO}}$. En particulier, l'évolution du profil de $\dot{\omega}_c$ et $\dot{\omega}_{\text{CO}}$ est si-

miliaire sur le domaine des valeurs inférieures à c_{\max} et légèrement différente sur le reste du domaine. Cette propriété a une grande importance particulièrement dans les analyses basées sur l'approche géométrique ou sur la réponse globale de la flamme, qui font appel à la considération d'une iso-surface spécifique sur laquelle le comportement instantané de la flamme est étudié. En effet, cette approche permet, par exemple, de s'affranchir du problème posé par l'ambiguïté de la définition de la vitesse (ou la longueur/surface) d'une flamme instationnaire dans ce genre d'approches. Dans cette optique, il est commun de considérer l'iso-surface correspondant au maximum du taux de production de la variable de progrès c_{\max} .



(a) Profils normalisés du taux de production de la variable de progrès et ceux des espèces CO et CO₂ en fonction de la variable de progrès c pour le cas SLNN- N - N -1.



(b) PDF de la position c_{\max} dans l'ensemble des calculs réalisés dans la base de données DNS.

Dans le contexte de la propagation des flammes stratifiées, les taux de réaction des espèces CO et CO₂ peuvent être modifiés suite à la présence des hétérogénéités locales de mélange. Ces effets influenceront également l'évolution de $\dot{\omega}_c$ compte tenu de sa définition donnée par l'équation (5.8). En particulier, la position du maximum du taux de production de la variable de progrès est susceptible de se déplacer.

Toutefois, ce déplacement est relativement limité dans notre base de données comme le montre la distribution des valeurs de c_{\max} construite à partir de l'ensemble des calculs réalisés (cf. Figure 5.7b). En effet, l'écart-type de cette distribution est de 0.02 pour une valeur moyenne de 0.71. Par conséquent, le choix d'une valeur de $c_{\max} = 0.7$ pour représenter l'iso-surface représentative dans l'ensemble des configurations, paraît cohérent.

Les différents caractéristiques de la variables de progrès introduits dans cette partie de l'exposé permettent à présent de conduire des analyses sur les calculs constituant la base de données DNS, dont certains feront l'objet de la section suivante.

5.4 Analyses préliminaires

L'objectif de cette étude est de se focaliser sur les effets éventuels des hétérogénéités de mélange sur la propagation des fronts de flamme laminaire. Les variations énergétiques locales

ne sont pas considérées et dans les cas présentant des hétérogénéités couplées de température et de richesse l'enthalpie sensible a été maintenue constante en chaque point du domaine :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k h_{s,k}(T) = H_s = cte \quad (5.9)$$

où h_k est l'enthalpie sensible et Y_k est la fraction molaire de l'espèce k et H est l'enthalpie sensible du cas de référence (homogène). La composition du mélange à l'équilibre, Y_k^{eq} , est connue pour les 29 espèces du mécanisme de [Hasse et al. \[139\]](#). Ainsi, la température peut en être déduite par la résolution de l'équation polynomiale suivante :

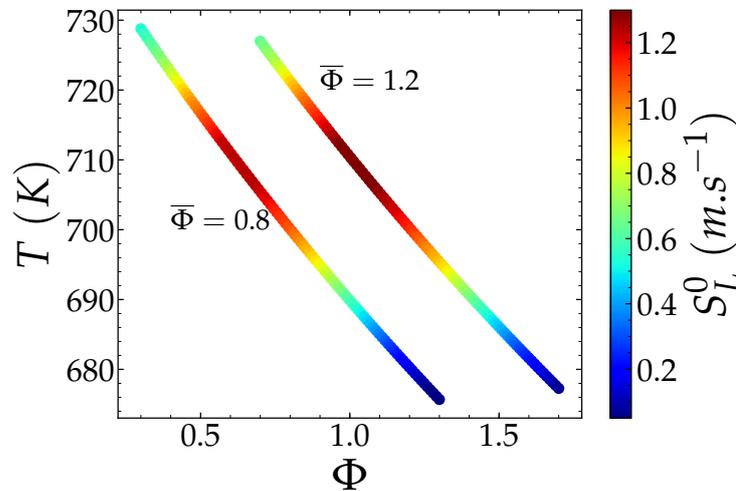
$$\mathcal{P}(T) = \sum_{n=0}^5 p_n T^n = 0$$

où les coefficients p_n sont exprimés en fonction des masses molaires W_k , des fractions massiques Y_k et des coefficients thermodynamiques $a_{i,k}$ des espèces k selon :

$$p_n = \begin{cases} \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k \mathcal{R}}{W_k} a_{5,k} - H_s, & \text{pour } n = 0 \\ \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k \mathcal{R}}{n W_k} a_{n-1,k}, & \text{pour } n = 1, 5 \end{cases}$$

La [Figure 5.7](#) montre la relation presque linéaire entre la température et la richesse des gaz frais.

Figure 5.7 – Vitesse de flamme laminaire dans les plages de variations considérées. Lien entre la température et la richesse des gaz frais à une enthalpie sensible constante (équation (5.9)).



Comme mentionné précédemment dans la présentation de la base de données DNS, les effets des hétérogénéités de température et celles de richesse ont été découplés en considérant des cas présentant uniquement des hétérogénéités de richesse ou bien de température.

À partir des valeurs de la vitesse de flamme laminaire monodimensionnelle en fonction de la température et de la richesse des gaz frais, l'étendue du domaine de variation de S_L^0 a été calculée pour les plages de fluctuations des champs initiaux de la composition et de

la température. La [Figure 5.8](#) rapporte ces résultats pour les trois natures d'hétérogénéités étudiées (richesse, température et combinée), et ce, pour les deux valeurs de richesse moyenne $\bar{\Phi} = 0.8$ et $\bar{\Phi} = 1.2$.

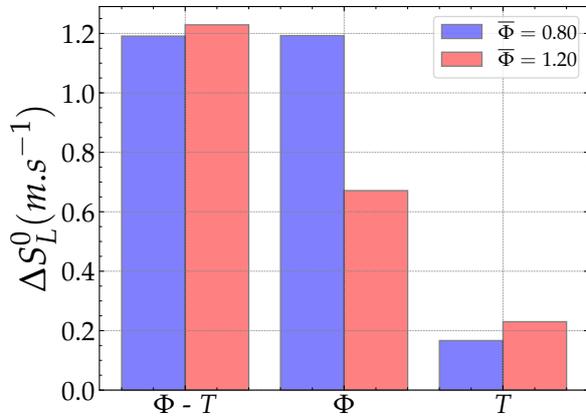


Figure 5.8 – Variation de la vitesse de flamme laminaire S_L^0 dans le domaine de fluctuations de richesse et de température retenu dans la base de données DNS pour les deux valeurs de richesse moyenne $\bar{\Phi} = 0.8$ et $\bar{\Phi} = 1.2$

D'après la [Figure 5.8](#), pour les deux richesses moyennes retenues, le domaine de variation de S_L^0 pour l'ensemble des fluctuations de températures est plus réduit que celui résultant de la variation de richesse. Néanmoins, les fluctuations de température dans le cas proche stœchiométrie ($\bar{\Phi} = 1.2$) présentent un ΔS_L^0 légèrement plus élevé que celles correspondant à ceux du cas pauvre $\bar{\Phi} = 0.8$.

Concernant les fluctuations en richesse, l'écart ΔS_L^0 est plus important dans le cas pauvre en moyenne en comparaison du cas proche stœchiométrie. Cette différence est attribuée à la présence des points proches de la limite d'inflammabilité inférieure dans le champ initial de richesse associé au cas pauvre en moyenne, mais surtout, à la forme en cloche du profil de la vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse.

Enfin, en comparant la configuration de la corrélation richesse-température à celle des variations de richesse uniquement, deux comportements différents apparaissent en fonction de la richesse moyenne considérée :

- dans le cas pauvre en moyenne, la configuration de corrélation des deux hétérogénéités présente un écart proche de celui de la configuration présentant des variations de richesse avec une valeur très légèrement inférieure à celle-ci.
- En revanche, pour le cas proche stœchiométrie en moyenne, le couplage de la richesse avec la température a une valeur ΔS_L^0 nettement supérieure à celle correspondant à la configuration où des variations de richesse uniquement sont considérées.

Ainsi, il est attendu, pour le jeu de données retenu, (i) que l'influence des hétérogénéité de température soit limitée en comparaison à celle résultant des hétérogénéités de richesse et (ii) que le comportement de la flamme en présence des hétérogénéités soit différents en fonction de la richesse moyenne considérée (pauvre ou riche).

5.5 Influence de la nature de l'hétérogénéité

L'analyse réalisée dans la section précédente a été confrontée aux réponses globales des flammes pour les configurations bidimensionnelles hétérogènes de la base de données DNS.

La réponse globale de la flamme peut être évaluée en considérant l'intégrale volumique du taux de dégagement de chaleur sur l'ensemble du domaine de simulation :

$$\dot{\omega}_{\text{HRR}} = - \int_V \sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 dV$$

Cette quantité volumique peut être normalisée par sa valeur de référence $\dot{\omega}_{\text{HRR}}^{\text{ref}}$ correspondant à $\dot{\omega}_{\text{HRR}}(t = t_0 = \tau_F)$, où τ_F représente le temps caractéristique de la flamme $\tau_F = \delta_L^0(\bar{\Phi})/S_L^0(\bar{\Phi})$.

Les figures 5.9a et 5.9b montrent l'évolution de $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ normalisée par sa valeur à $t = \tau_F$ en fonction du temps normalisé par τ_F pour les richesses moyennes initiales $\bar{\Phi} = 0.8$ et $\bar{\Phi} = 1.2$ respectivement. Les aires colorées englobent les valeurs de l'intégrale volumique du taux de dégagement de chaleur pour chaque nature d'hétérogénéité, indépendamment des caractéristiques spatiales et statistiques des distributions considérées, tandis que les points correspondent à leurs moyennes d'ensemble respectives.

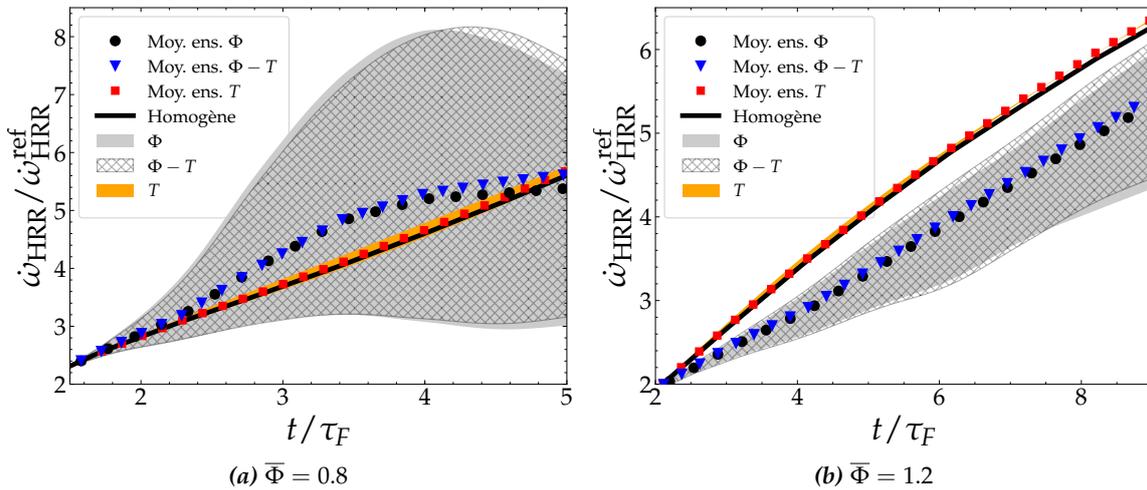


Figure 5.9 – Évolution de l'intégrale volumique du taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ pour les richesses moyennes initiales $\bar{\Phi} = 0.8$ et $\bar{\Phi} = 1.2$, en fonction du temps pour chaque nature d'hétérogénéités. À gauche $\bar{\Phi} = 0.8$, à droite $\bar{\Phi} = 1.2$

Les configurations de richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 0.8$, impliquant des hétérogénéités de température uniquement, présentent une évolution en moyenne quasi identique à celle du cas homogène. De plus, l'écart de $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ de ces différentes distributions par rapport à celui de la moyenne d'ensemble, est très réduit. Un corollaire serait de conclure que les hétérogénéités de température ont une faible influence sur le dégagement de chaleur et ainsi sur la propagation du noyau de flamme, confirmant ainsi la tendance observée sur la Figure 5.8.

En revanche, lorsque les hétérogénéités portent sur la richesse locale, les évolutions de $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ exhibent un comportement différent. En effet, l'aire représentant le champ des évolutions de $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ est manifestement plus large et la courbe de la moyenne d'ensemble diffère de celle du cas de référence homogène. En outre, ce comportement est similaire à celui produit par un couplage des hétérogénéités de la richesse avec celles de la température.

Enfin, les résultats reportés sur la [Figure 5.9](#) suggèrent que, pour les deux richesses moyennes initiales retenues, les hétérogénéités de température ont une faible influence sur le développement du taux de dégagement de chaleur, tandis que les effets associés aux stratifications de richesse sont relativement plus manifestes et sont dominants lorsque des hétérogénéités couplées de richesse et de température sont considérées.

Un autre point intéressant réside dans le fait que les hétérogénéités de richesse dans les configurations de ($\bar{\Phi} = 1.2$) ne peuvent que réduire l'efficacité de la combustion (taux de dégagement de chaleur) (cf. [Figure 5.9b](#)). Cela a été prédit par les analyses des flammes mono-dimensionnelles. Cet effet est attribué à la valeur de la richesse moyenne du mélange. En effet lorsqu'elle est associée au maximum de la vitesse de flamme laminaire, toute fluctuation autour de cette richesse tend à réduire l'efficacité de la combustion. Cependant, lorsque le mélange est initialement pauvre en moyenne, les hétérogénéités de richesse sont susceptibles d'avoir un impact positif ou négatif sur le dégagement de chaleur. Dans les deux cas, l'intensité de cet impact dépendra des caractéristiques locales de la distribution du mélange local.

En résumé, sur la base de ces analyses préliminaires, les effets des hétérogénéités de température ont une faible influence sur la propagation de la flamme dans les conditions de cette étude, *i.e.*, conditions représentatives du dispositifs CVC. En outre, il a également été montré que la stratification en richesse et les hétérogénéités couplées richesse-température ont des effets similaires sur l'efficacité de la combustion. Par conséquent, l'attention sera portée, dans la suite, sur l'influence des fluctuations de richesse uniquement, en mettant en avant les influences potentielles des caractéristiques statistiques et spatiales de la distribution du mélange local.

5.6 Influence des caractéristiques de la distribution

Une première mise en évidence de l'effet potentiel des caractéristiques du champ hétérogène de composition a été illustrée sur la [Figure 5.9](#). À titre de rappel, ces caractéristiques sont représentées par la distribution spatiale et par les propriétés de la PDF de cette dernière, à savoir l'échelle de longueur caractéristique et le taux de ségrégation. On se propose, ainsi, dans cette section de quantifier l'influence respective de chacun de ses paramètres.

5.6.1 Échelle de longueur caractéristique

Les effets de l'échelle de longueur de la distribution du champ de composition stratifié peut être étudiée en comparant, à taux de ségrégation initial identique ($S_{\Phi} = 0.4$), la réponse volumique globale de la flamme, dans des configurations correspondant à une échelle caractéristique $L/10$ et $L/20$, respectivement, où L est la longueur caractéristique du domaine de calcul (cf. [Figure 5.10](#)).

La [Figure 5.11](#) récapitule les éléments d'une telle comparaison pour une richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 0.8$. Lorsque l'échelle de longueur caractéristique de la stratification est réduite

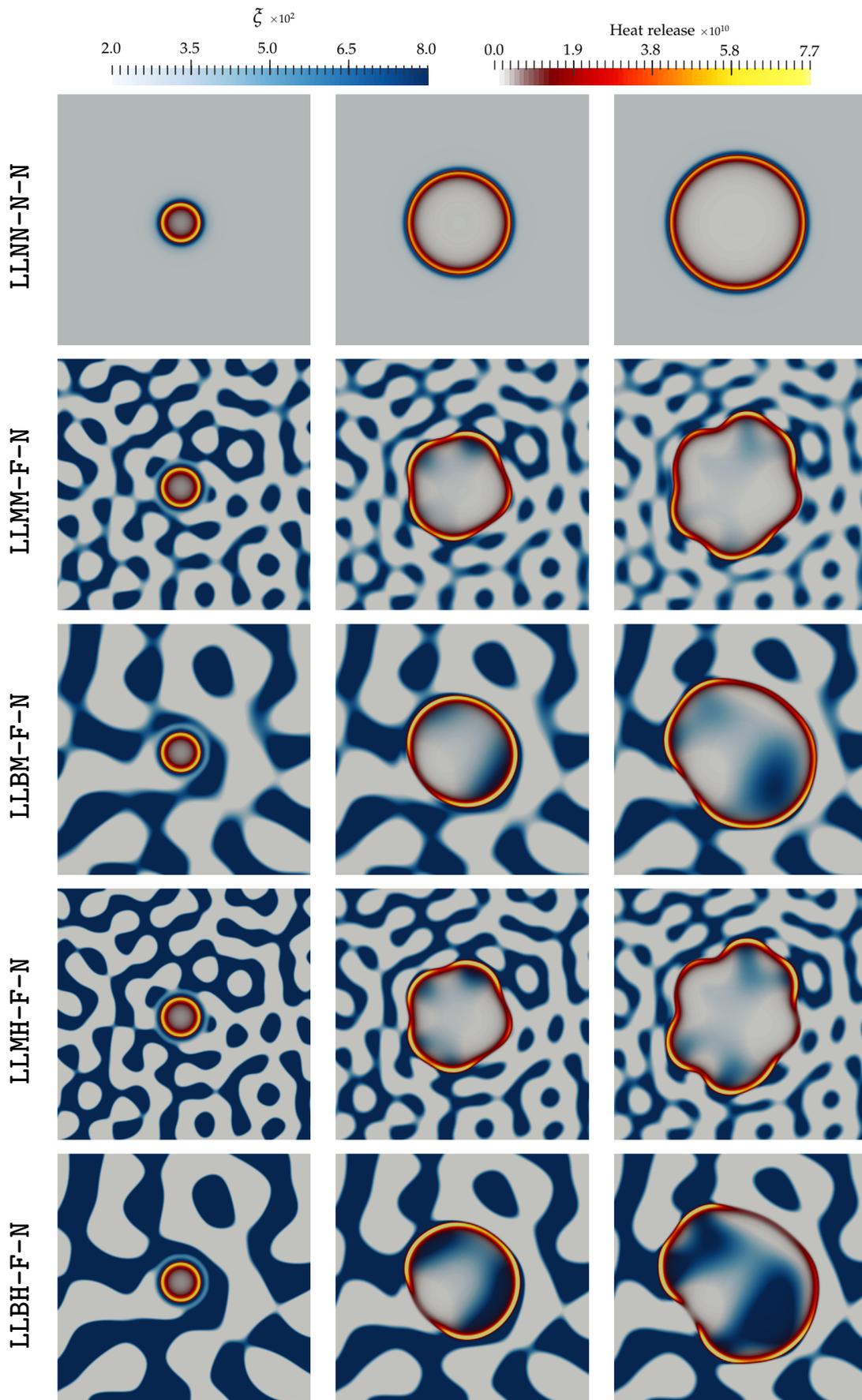


Figure 5.10 – Propagation de flamme laminaire, illustrée par le taux de dégagement de chaleur, dans un mélange de composition hétérogène de richesse moyenne $\bar{\Phi} = 0.8$. De gauche à droite, le temps est τ_F , $3.5 \tau_F$, $5 \tau_F$, de haut en bas : champs de fraction de mélange des configurations LLNN-N-N, LLMM-F-N, LLBM-F-N, LLMH-F-N, LLBH-F-N, obtenus avec un tirage de scalaire.

(cas LLMM-F-N) les différences au niveau du taux de dégagement de chaleur par rapport au cas homogène demeurent assez faibles (entre 3% et 5%) en comparaison au cas impliquant une échelle de longueur caractéristique plus importante (cas LLBM-F-N) pour lequel les différences de $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ par rapport au cas homogène peuvent atteindre jusqu'à 39%. Par ailleurs, les deux tirages réalisés pour le cas LLMM-F-N conduisent à une réduction de l'efficacité de la combustion au temps $5\tau_F$, tandis que les tirages associés à LLBM-F-N résultent en une augmentation de $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ avec le premier tirage et une réduction avec le second.

En dépit du fait que les deux tirages scalaires ont la même PDF, l'effet associé à la distribution spatiale est donc notable. En effet, le front de flamme instantané ne rencontre pas la même composition, ce qui se manifeste par des évolutions différentes de $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$. Par conséquent, il s'avère que pour une étude bidimensionnelle, considérer un seul tirage de scalaire pourrait conduire à des conclusions erronées quant à l'impact de la stratification sur la propagation de flamme.

Les profils de $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ obtenus par la moyenne d'ensemble des deux tirages de scalaire, montre une évolution non monotone de la différence de $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ par rapport à la configuration homogène pour les deux échelles de longueur caractéristiques retenues. Cette évolution indique une réduction de l'efficacité de la combustion à $5\tau_F$ indépendamment de la valeur de l'échelle de longueur caractéristique initiale considérée. Du fait que la surface d'échange entre

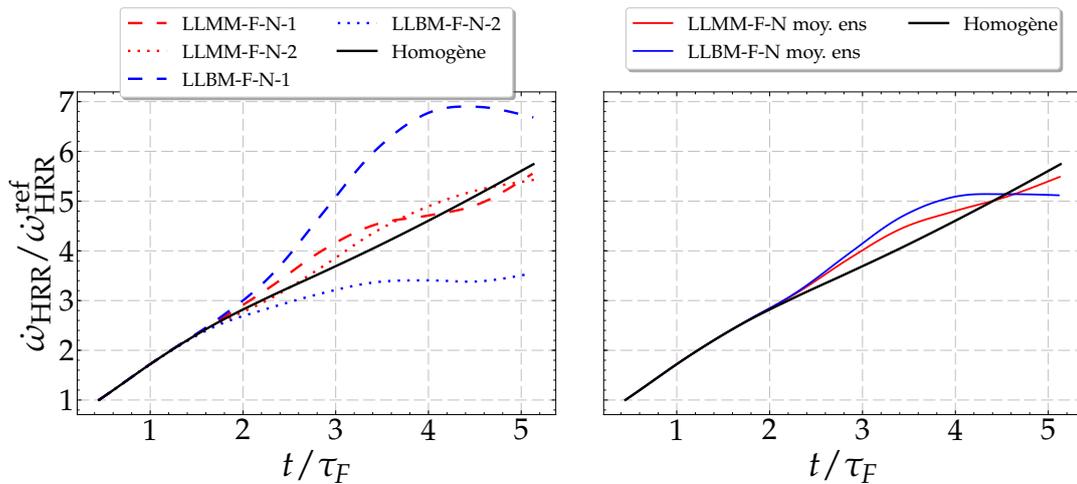


Figure 5.11 – Effet de l'échelle de longueur caractéristique sur l'évolution de l'intégrale volumique du taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ pour la richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 0.8$. À gauche, réalisations DNS, à droite moyenne d'ensemble.

les zones à faible et forte concentration en combustible est augmentée lorsque la taille caractéristique des poches est réduite, le processus de mélange s'avère plus efficace pour amener le mélange à l'homogénéité. Par conséquent, au moment où le front de flamme atteint la région hétérogène, les fluctuations de la richesse ont été pour partie amorties et l'évolution du front de flamme tend à suivre celle observée pour le cas homogène. Cela explique la faible magnitude de l'écart de $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ par rapport au cas homogène lorsque $L_\phi = L/20$. Inversement, l'augmentation de la taille caractéristique amplifie l'écart de $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ par rapport à sa contre-

partie homogène. Dans notre cas, $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ augmente de 5% à environ 10% lorsque l'échelle de longueur caractéristique est modifiée de $L_{\Phi} = L/20$ à $L_{\Phi} = L/10$, ce qui correspond à une évolution linéaire de facteur 2.

Lorsque la flamme se propage dans un milieu stratifié, il est attendu que le front de flamme subit un plissement induit par les différences de vitesse locale de propagation. Ainsi, les différences notées précédemment au niveau de la réponse volumique globale de la flamme peuvent provenir non seulement de la structure locale de la flamme et de la composition locale du mélange, mais également de la quantité de surface de la flamme plissée.

La contribution de la structure locale de la flamme peut être estimée via le taux de dégagement de chaleur volumique intégral par unité de surface de flamme :

$$\dot{\omega}_{\text{HRR},\Sigma} = \frac{\dot{\omega}_{\text{HRR}}}{A_{\Sigma}}$$

où A_{Σ} représente la surface instantanée de la flamme qui est équivalente dans le contexte de configurations bidimensionnelles, à la longueur de la flamme définie comme le périmètre de la surface occupée par les gaz brûlés². Comme les flammes considérées sont statistiquement circulaires, la surface occupée par les produits brûlés S permet de définir un rayon équivalent R_{eq} correspondant à une flamme circulaire de même surface, *i.e.*, $S = \pi R_{eq}^2$ et ainsi, $A_{\Sigma} = 2\pi R_{eq}$.

La [Figure 5.12a](#) illustre l'évolution du rayon équivalent R_{eq} en fonction du temps pour les cas LLMM-F-N et LLBM-F-N correspondant respectivement à des échelles de longueur caractéristiques $L_{\Phi} = L/20$ et $L_{\Phi} = L/10$ de même taux de ségrégation $S_{\Phi} = 0.4$ avec une richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 0.8$. Les cinq flammes présentent une augmentation initiale de longueur similaire jusqu'au temps $t = 2.5\tau_F$, pour lequel elles atteignent toutes le triple de leur longueur initiale. Cette évolution similaire correspond à une étape où la flamme, initialement circulaire, doit s'adapter au mélange réactif hétérogène au sein duquel elle se propage. À ce stade, les éléments de la flamme bidimensionnels correspondent à un ensemble de flammes mono-dimensionnelles instationnaires qui se propagent dans un champ de composition non constant. Plus tard, de petites différences de longueur apparaissent. Ce sont les premiers signes de l'effet des hétérogénéités. En moyenne, ces hétérogénéités de composition, dans les conditions de l'étude, ont tendance à augmenter la longueur de la flamme. Toutefois, cette augmentation reste relativement modérée (*cf.* [Figure 5.12a](#)).

Étant donné que les longueurs des flammes hétérogènes sont très proches de leur homologue homogène, le comportement mis en évidence par la réponse volumique globale rapportée sur la [Figure 5.11](#) doit être lié à un dégagement de chaleur plus important ou plus faible par unité de longueur de flamme. Effectivement, les différences de $\dot{\omega}_{\text{HRR},\Sigma}$ entre les cinq flammes sont plus prononcées que celles observées sur les longueurs. En outre, la similarité

2. Dans les études bidimensionnelles dans cette thèse, le terme "surface de la flamme" sera utilisé pour désigner la longueur de la flamme.

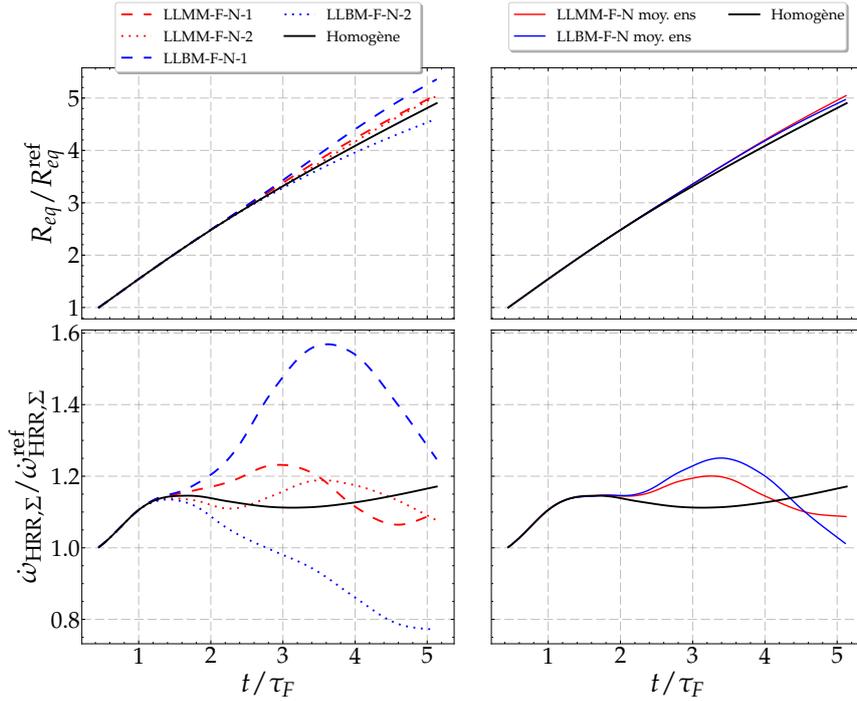


Figure 5.12 – Évolution du rayon équivalent R_{eq} en fonction du temps pour la richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 0.8$ (en haut). Évolution le taux de dégagement de chaleur volumique intégral par unité de surface de flamme $\dot{\omega}_{HRR,\Sigma}$ en fonction du temps pour la richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 0.8$ (en bas). À gauche, réalisations DNS, à droite moyenne d'ensemble.

des évolutions de $\dot{\omega}_{HRR}$ et de $\dot{\omega}_{HRR,\Sigma}$ suggèrent que la contribution de la structure locale de la flamme prédomine sur les effets associés au plissement de la surface locale de la flamme.

Le taux de dégagement de chaleur volumique intégral par unité de surface de flamme évolue d'une manière non monotone dans le cas des flammes stratifiées. Après une évolution similaire au cas homogène, il augmente pour atteindre sa valeur maximale à $t = 3.5\tau_F$, marquant une différence d'environ 7% et 12% pour LLMM-F-N et LLBM-F-N respectivement, avant de diminuer pour finir plus petit que celui du cas homogène avec une différence de 5% et 12% pour ces deux cas respectivement.

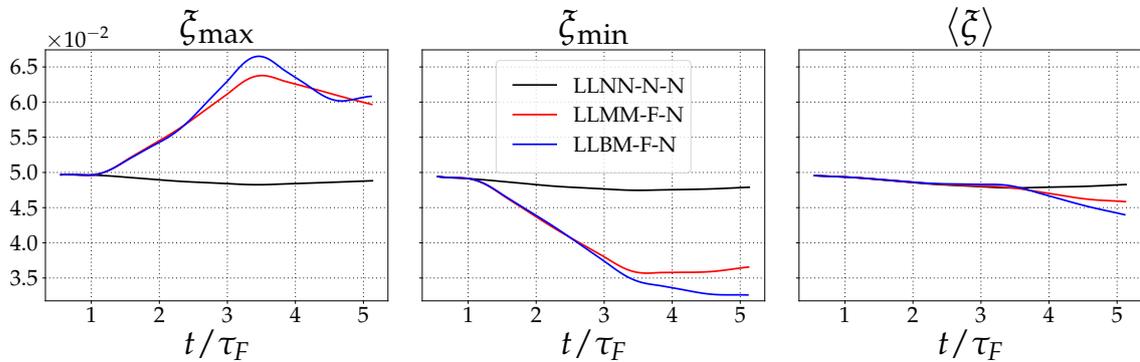


Figure 5.13 – Évolution temporelle des maxima (à gauche), des minima (au milieu) et de la moyenne de ζ sur le front de flamme donné par l'iso-c 0.7

Cela peut s'expliquer par les effets d'extinction locale dans les zones en-deçà de la limite

d'inflammabilité, qui se manifestent dans les flammes stratifiées avec une richesse moyenne $\bar{\Phi} = 0.8$. Ces zones sont d'autant plus importantes que l'échelle caractéristique est plus grande ce qui justifie, en particulier, les différences observées sur $\dot{\omega}_{\text{HRR},\Sigma}$ entre LLMM-F-N et LLBM-F-N. En effet, bien que la PDF initiale globale des zones riches/pauvres dans les gaz frais soit la même pour les deux flammes stratifiées considérées, et qu'elles doivent évoluer en se mélangeant vers la même distribution finale, l'évolution des zones les plus riches et les plus pauvres au niveau du front de flamme est différente.

Sur la [Figure 5.13](#), les évolutions temporelles des valeurs maximales, minimales et moyennes de ζ sur le front de flamme (donné par l'iso-valeur $c = 0.7$) sont tracées pour les deux flammes stratifiées et le cas homogène. Pour les flammes stratifiées, la distribution est clairement déplacée vers des valeurs plus faibles. Le passage à des valeurs plus pauvres a pour effet de réduire le dégagement de chaleur moyen par unité de longueur, ce qui pourrait expliquer la diminution plus importante du dégagement de chaleur moyen observée lorsque l'échelle de longueur est plus élevée. Cet effet peut être attribué à un temps de résidence plus long et donc à une probabilité plus grande de trouver des poches pauvres que d'avoir des poches riches, en raison de la diminution des vitesses locales suivant le front de flamme. De plus, dans les conditions de l'étude, cet effet est probablement affaibli par la distribution initiale symétrique des hétérogénéités, où, initialement, les poches les plus riches sont de la même taille que les poches plus pauvres et se mélangent donc suivant des temps caractéristiques comparables.

En résumé, les stratifications de richesse considérées dans les conditions de cette étude ont un effet limitant vis-à-vis de l'efficacité de combustion, dû à la présence de zones d'extinctions locales, mais également à un effet de décalage de la distribution de ζ vers des valeurs faibles. Ce décalage a pour conséquence la réduction du taux de dégagement de chaleur par unité de surface de flamme, ce qui équivaut à une réduction du taux de dégagement de chaleur intégral par rapport au cas homogène, puisque la longueur du front de flamme est pratiquement la même en présence ou en absence de la stratification. En outre, la réduction de l'efficacité de combustion est plus prononcée avec l'augmentation de l'échelle de longueur caractéristique des hétérogénéités.

De même, malgré l'absence des zones d'extinction locale, compte tenu de la distribution initiale de la richesse dans le cas où la richesse moyenne initiale est proche de la stœchiométrie $\bar{\Phi} = 1.2$, les conclusions tirées précédemment restent valables. Toutefois, il convient de souligner que la réduction de l'efficacité de combustion avec l'augmentation de l'échelle de longueur caractéristique est plus nette en comparaison aux cas $\bar{\Phi} = 1.2$. En effet, à $t = 9\tau_F$, la différence observée par rapport au cas homogène sur le taux de dégagement de chaleur intégral volumique augmente de 8% (avec $L_\Phi = L/20$) à 20% (avec $L_\Phi = L/10$), cf. figures [5.14](#) et [5.15](#).

5.6.2 Taux de ségrégation

A l'instar de l'étude menée dans la section précédente, les effets du taux de ségrégation de la distribution du champ de composition stratifié seront étudiés en comparant, à échelle de longueur caractéristique égale ($L_\Phi = L/20$) la réponse volumique globale de la flamme,

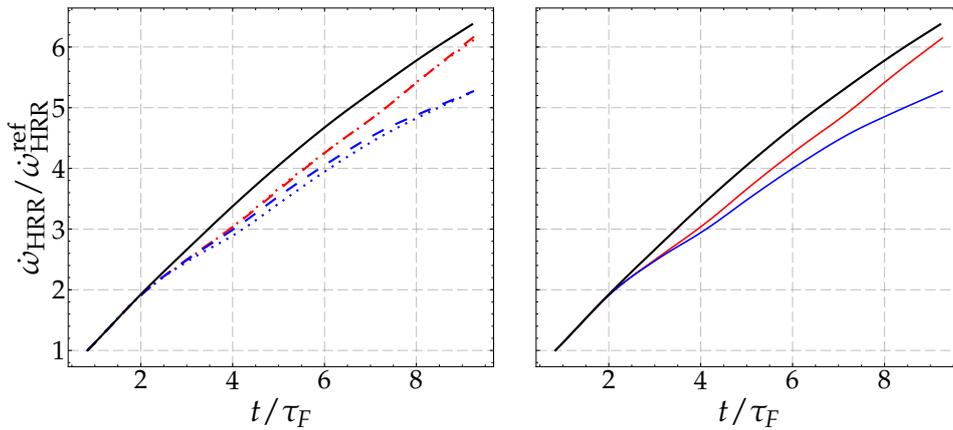


Figure 5.14 – Effet de l'échelle de longueur caractéristique sur l'évolution de l'intégrale volumique du taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ pour la richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 1.2$. À gauche, réalisations DNS, à droite moyenne d'ensemble.

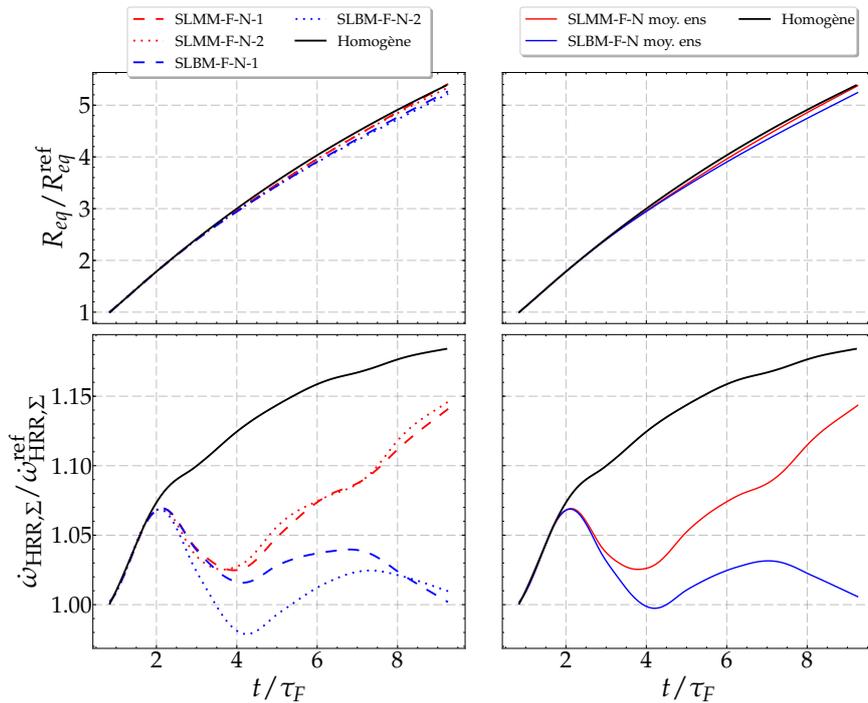


Figure 5.15 – Évolution du rayon équivalent R_{eq} en fonction du temps pour la richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 1.2$ (en haut), évolution le taux de dégagement de chaleur volumique intégral par unité de surface de flamme $\dot{\omega}_{\text{HRR},\Sigma}$ en fonction du temps pour la richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 1.2$ (en bas). À gauche, réalisations DNS, à droite moyenne d'ensemble.

dans des configurations correspondant à un taux de ségrégation de 0.4 et 0.8, respectivement (cf. Figure 5.10).

Avant d'établir une telle comparaison, il convient d'abord, de préciser que même en l'absence du processus de mélange turbulent, le taux de ségrégation du champ de composition des gaz frais est susceptible de diminuer sous l'action du mélange par diffusion moléculaire. Ce dernier, agissant dans les gaz frais a tendance à homogénéiser le mélange, de sorte que les gradients de composition *efficaces* sur le front de flamme sont plus faibles que ceux initialement imposés.

Ce *lissage* peut être estimé par le biais de la définition d'une échelle de temps diffusive τ_D , dont l'ordre de grandeur est mesuré à partir de la décroissance temporelle de la variance du champ de richesse locale. La comparaison de cette échelle de temps de mélange avec le temps caractéristique chimique τ_F permet de mesurer l'efficacité des hétérogénéités dans la déformation du front de flamme. Lorsque τ_D est très faible devant τ_F , les effets de mélange sont dominants et les effets associés aux hétérogénéités sont atténués. Dans la situation opposée, le processus de mélange est faible en comparaison à celui de l'avancement de la flamme et les poches hétérogènes produisent un plissement du front de flamme. En revanche, lorsque τ_F et τ_D sont comparables, les plissements éventuels produits au niveau du front de flamme, seront le résultat d'une compétition entre l'effet *destructeur* (processus diffusifs) et l'effet induit par la propagation au sein des hétérogénéités.

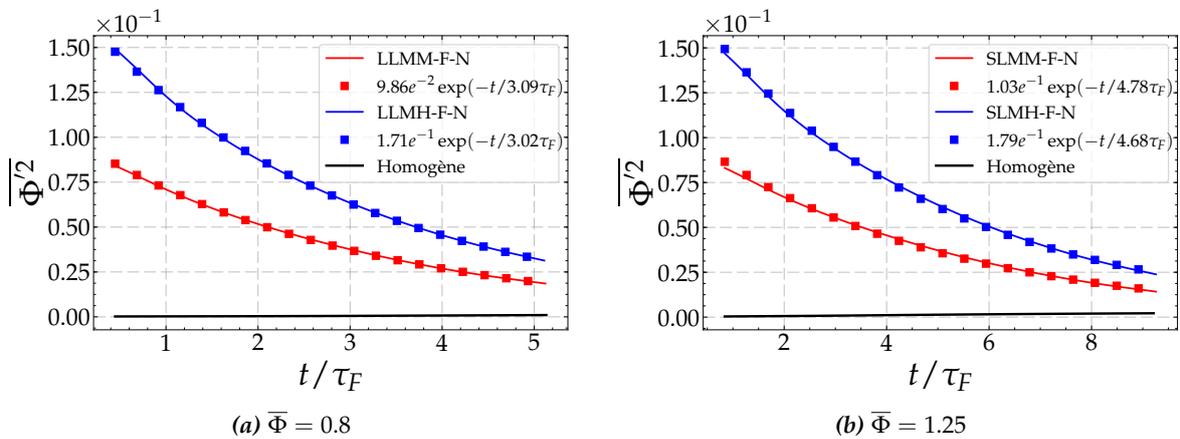


Figure 5.16 – Évolution temporelle de la variance du champ de richesse locale en fonction du temps pour deux niveaux de ségrégation initiale de la distribution. A gauche : configurations à $\overline{\Phi} = 0.8$, à droite : configurations à $\overline{\Phi} = 1.25$

La Figure 5.16 montre l'évolution temporelle de la variance du champ de richesse locale en fonction du temps pour deux taux de ségrégation initiale de la distribution. L'échelle caractéristique diffusive τ_D est estimée à environ $3\tau_F$ et $4.7\tau_F$ pour les cas $\overline{\Phi} = 0.8$ et $\overline{\Phi} = 1.25$ respectivement³. Par conséquent, sur la base du raisonnement ci-dessus, il est attendu que les

3. cf. les approximations de $\overline{\Phi^2} = f(t)$ par la fonction exponentielle décroissante $A \exp(-t/\tau)$ sur la Fi-

hétérogénéités produisent un plissement du front de flamme. Une estimation du plissement du front de flamme Ξ est obtenue par le biais d'une approche géométrique basée sur la mesure des écarts relatifs des rayons R du front de flamme instantané, mesurés à partir du centre du domaine, par rapport au rayon équivalent R_{eq} :

$$\Xi = \left| \frac{R - R_{eq}}{R_{eq}} \right|$$

Effectivement, comme l'illustre la [Figure 5.17](#), les hétérogénéités de richesse introduisent un plissement du front de flamme. Ce dernier, initialement négligeable dans la phase d'adaptation du front de flamme décrite précédemment, augmente de manière monotone à partir de $t \approx 2.5\tau_F$ pour les deux configurations LLMM-F-N et LLMH-F-N. En dépit de la faible magnitude des valeurs de $\bar{\Xi}$ (environ 0.2% et 0.3% à $t = 5\tau_F$ pour LLMM-F-N et LLMH-F-N respectivement), on peut noter que l'augmentation du taux de ségrégation tend à introduire, relativement, plus de plissement sur le front de flamme. L'apparition de tels plissements contribuera à l'accrois-

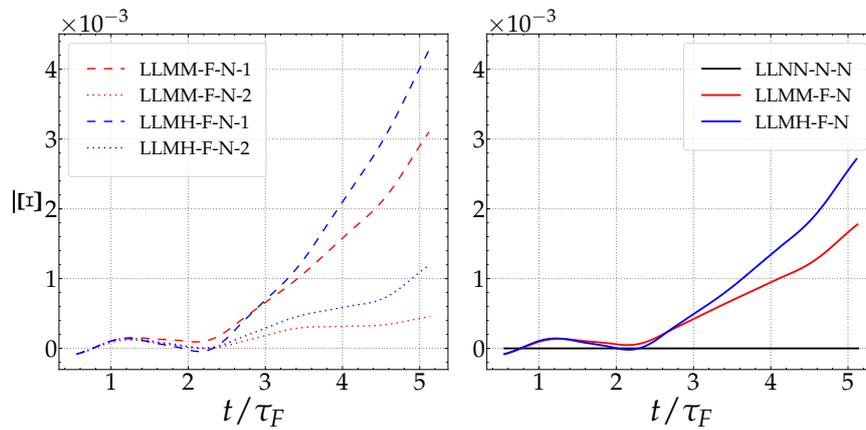


Figure 5.17 – Évolution du facteur de plissement moyen en fonction du temps pour la richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 0.8$. À gauche, réalisations DNS, à droite moyenne d'ensemble.

sement de la surface de la flamme et ainsi au taux de dégagement de chaleur global. Ainsi, l'augmentation du taux de ségrégation du champ de richesse locale du mélange, devrait induire une augmentation du taux de dégagement de chaleur. Une illustration d'un tel effet est présentée sur la [Figure 5.18](#).

Pour un taux de ségrégation initial modéré $S_\Phi = 0.4$, la réponse volumique intégrale de la flamme, représentée par $\dot{\omega}_{HRR}$, est relativement proche de celle issue des conditions homogènes, en étant légèrement supérieure à cette dernière jusqu'à $t \approx 4.5\tau_F$ où elle commence à diminuer pour marquer une différence relative de 3.5% à $t = 5\tau_F$. En revanche, lorsque $S_\Phi = 0.8$, le taux de dégagement de chaleur volumique intégral est légèrement supérieur à celui de la flamme homogène dans le domaine temporel considéré, avec une différence relative de 3% à $t = 5\tau_F$. Ainsi, le taux de dégagement de chaleur global associé à la configuration LLMH-F-N et celui de la configuration homogène sont comparables. Or, compte tenu de l'accroissement de la surface du front de flamme induit par l'augmentation du taux de

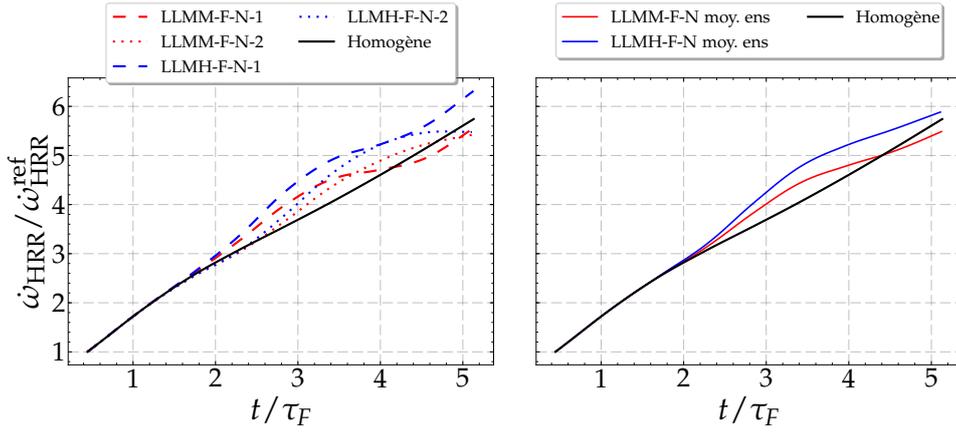


Figure 5.18 – Effet du taux de ségrégation de la distribution de richesse sur l'évolution de l'intégrale volumique du taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ pour la richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 0.8$. À gauche, réalisations DNS, à droite moyenne d'ensemble.

ségrégation, il est attendu que le taux de dégagement de chaleur global par unité de surface associé à la configuration LLMH-F-N soit plus faible que celui de la configuration homogène. Ce dernier constat est validé par l'évolution temporelle de $\dot{\omega}_{\text{HRR},\Sigma}$ reportée sur la Figure 5.19, qui présente un écart relatif au cas homogène de 3.5% pour LLMH-F-N à $t = 5\tau_F$.

D'autre part, la comparaison de la réponse volumique des flammes stratifiées LLMH-F-N et LLMH-F-N, suggère que l'augmentation du taux de ségrégation amplifie le taux de dégagement de chaleur par unité de surface $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$. En effet, à l'instant $t = 3.5\tau_F$, pour lequel cette quantité atteint son maximum pour les deux flammes stratifiées, l'écart relatif à la condition homogène correspond à 14% pour $S_\Phi = 0.8$, contre 8% pour $S_\Phi = 0.4$. Cette tendance est ensuite maintenue jusqu'à $t = 5\tau_F$ où $\dot{\omega}_{\text{HRR}}$ est plus petit devant celui de la configuration homogène de 2.5% et 7% pour LLMH-F-N et LLMH-F-N respectivement. Enfin, l'amplification du taux de dégagement de chaleur par unité de surface avec l'augmentation du taux de ségrégation, se traduit par une meilleure efficacité de la combustion (cf. Figure 5.19).

L'augmentation de la déviation, par rapport à la condition homogène, du taux de dégagement de chaleur avec la ségrégation reste également valable lorsque la moyenne du champ initial de la richesse locale est proche de la stœchiométrie, *i.e.*, $\bar{\Phi} = 1.2$. En effet, la réponse volumique de la flamme dans ces conditions, fournie sur la Figure 5.20, montre que le taux de dégagement de chaleur volumique et l'efficacité de la combustion s'éloignent de ceux de la configuration de référence homogène d'autant plus que le taux de ségrégation de la distribution croît. En particulier, comme la flamme homogène se propage dans un milieu de richesse optimale en terme de vitesse de propagation laminaire, son efficacité est supérieure à celle des flammes stratifiées considérées. Ainsi, avec ce raisonnement, la croissance de S_Φ entraîne une baisse du taux de dégagement de chaleur global.

En somme, que ce soit pour des conditions pauvres en moyenne ou proches de la stœchiométrie, les hétérogénéités de richesses introduites ont généralement tendance à diminuer

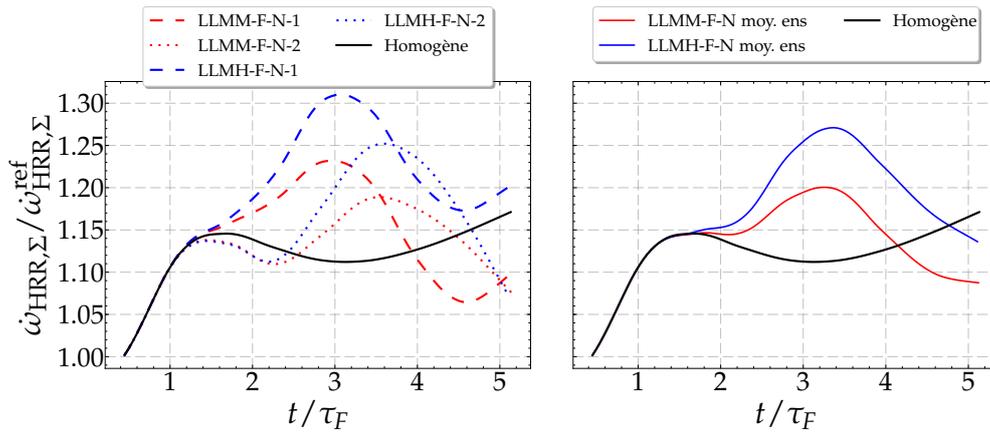


Figure 5.19 – Évolution du taux de dégagement de chaleur volumique intégral par unité de surface de flamme $\dot{\omega}_{\text{HRR},\Sigma}$ en fonction du temps pour la richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 0.8$ (en bas). À gauche, réalisations DNS, à droite moyenne d'ensemble.

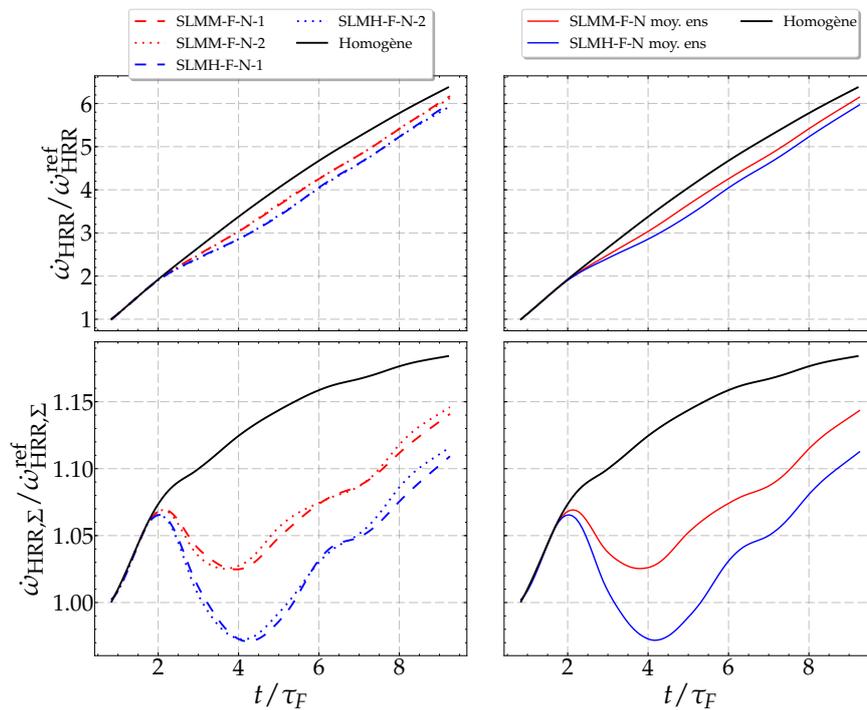


Figure 5.20 – Évolution de la réponse volumique de la flamme en fonction du temps pour la richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 1.2$. En haut : taux de dégagement de chaleur volumique intégral. En bas : taux de dégagement de chaleur volumique intégral par unité de surface de flamme (en bas). À gauche, réalisations DNS, à droite moyenne d'ensemble.

l'efficacité globale de la combustion, à l'exception du cas pauvre en moyenne avec une taille caractéristique modérée et un taux de ségrégation élevé, pour lequel une légère augmentation est observée. La déviation de la réponse volumique de la flamme stratifiée par rapport à celle de la condition homogène de référence augmente avec le taux de ségrégation de la distribution du champ de richesse locale, de sorte à ce que le taux de dégagement de chaleur global croît (décroît) avec S_Φ pour $\bar{\Phi} = 0.8$ ($\bar{\Phi} = 1.2$). Cela est dû aux plissements introduits au niveau du front de flamme qui modifient le comportement du taux de dégagement de chaleur par unité de surface. Ces plissements sont d'autant plus importants que le taux de ségrégation augmente et entraînent une amplification (réduction) de $\dot{\omega}_{HRR,\Sigma}$ lorsque la moyenne de la distribution initiale de richesse correspond à $\bar{\Phi} = 0.8$ ($\bar{\Phi} = 1.2$).

5.6.3 Influence relative des paramètres de la distribution

L'influence respective de la taille caractéristique de la distribution spatiale du champ hétérogène en richesse ainsi que son taux de ségrégation, sur le développement du noyau de flamme a été étudiée dans les sous-sections précédentes, sur la base de la réponse volumique de la flamme. Toutefois, il n'a pas encore été question de qualifier la prépondérance de l'une des deux caractéristiques de la distribution initiale, *i.e.* L_Φ et S_Φ , sur l'autre. Dans cette optique, cette section vise à analyser la sensibilité de la propagation de flamme dans un milieu stratifié à ces paramètres.

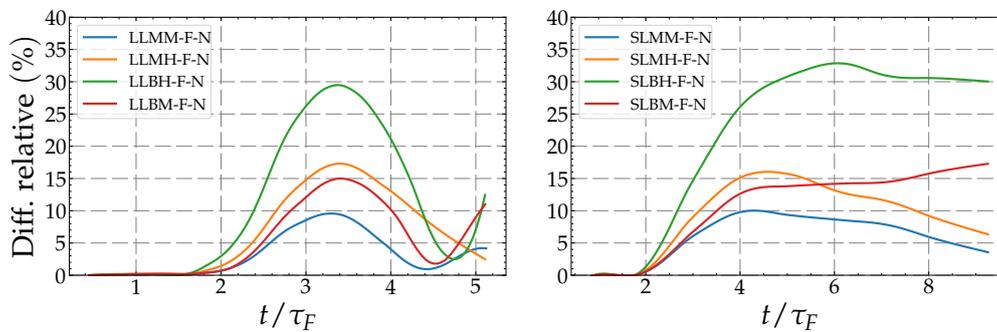


Figure 5.21 – Différence relative observée sur le taux de dégagement de chaleur des flammes stratifiées par rapport à celui de la flamme homogène. A gauche : cas pauvres en moyenne $\bar{\Phi} = 0.8$, à droite cas proche stœchiométrie en moyenne $\bar{\Phi} = 1.2$

Un point de départ pour évaluer une telle sensibilité consisterait à mesurer les différences relatives observées des quantités représentatives de la propagation des flammes stratifiées par rapport à celles obtenues des conditions homogènes, par exemple, celles associées au taux de dégagement de chaleur présenté sur la Figure 5.21. A la fin des simulations, on peut constater que, indépendamment de la richesse moyenne initiale considérée et le taux de ségrégation de la distribution, les déviations de $\dot{\omega}_{HRR}$ observées pour les flammes issues d'une distribution de grande échelle caractéristique, *i.e.* $L_\Phi = L/10$, sont plus importantes que celles obtenues des flammes correspondant à $L_\Phi = L/20$. Ce constat permet de conclure que l'effet associé à l'échelle de longueur de la stratification L_Φ est prépondérant sur celui du taux de

ségrégation S_Φ . Toutefois, il est pas possible de quantifier la différence de l'influence relative pour chaque paramètre à partir de cette analyse, cela en raison de la différence de nature et de plage de valeurs explorées pour les paramètres L_Φ et S_Φ . Cela pourrait être surmonté en augmentant la comparabilité des résultats par l'introduction de la moyenne pondérée de la déviation S_l pour chaque paramètre l sous la forme :

$$S_l = \frac{\sum_{i=1}^{N_l} \sum_{j=1}^{N_m} l(i) \alpha(i, j)}{\sum_{i=1}^{N_l} l(i)} \quad \text{avec :} \quad \alpha(i, j) = \left| (\Delta\Psi(i) / \Delta m(j)) / (\Psi_{ref} / m^{ref}) \right| \quad (5.10)$$

avec l est le paramètre pour lequel l'influence est mesurée, m est le second paramètre. N_l et N_m représentent le nombre de valeurs, $l(i)$ et $m(j)$, prises par l et m respectivement. La quantité Ψ est associée à la grandeur sur laquelle l'analyse d'influence est réalisée et l'exposant ref représente les valeurs du cas de référence, à partir duquel, sont calculées les déviations $\Delta\Psi(i)$ et $\Delta m(j)$ i.e. $\Delta\Psi(i) = (\Psi(i) - \Psi^{ref})$ et $\Delta m(j) = (m(j) - m^{ref})$. Dans le cas présent, l et m correspondent à S_Φ et L_Φ interchangeablement, Ψ est le taux de dégagement de chaleur global $\dot{\omega}_{HRR}$. Naturellement, le cas de référence est le cas homogène. Afin d'obtenir les valeurs de référence pour ce dernier, nous allons l'assimiler à un cas hétérogène avec un taux de ségrégation nul⁴, et une échelle de longueur caractéristique égale à la taille du domaine de calcul.

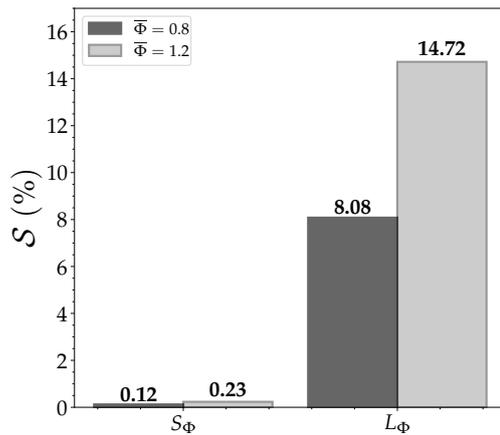


Figure 5.22 – Analyse quantitative de l'influence relative des paramètres de la distribution du champ de composition initiale sur l'efficacité de la combustion.

La [Figure 5.22](#) confirme la prédominance de l'influence de l'échelle caractéristique de longueur dont le coefficient d'influence S est plus de 60 fois supérieur à celui du taux de ségrégation. De plus, l'influence de l'échelle caractéristique de longueur L_Φ est plus notable lorsque la richesse moyenne initiale est proche de la stœchiométrie $\bar{\Phi} = 1.2$ et correspond à environ deux fois son homologue pauvre en moyenne $\bar{\Phi} = 0.8$. Comme cela a été montré, ceci est attribué au fait que pour le cas $\bar{\Phi} = 1.2$, correspondant à l'optimum de l'efficacité, les grandes poches de richesses du côté plus pauvre et plus riche, par rapport à ce point, tendent tous les deux à diminuer l'efficacité de la combustion et, par suite, à s'éloigner de la réponse du cas homogène. Par contre, pour le cas $\bar{\Phi} = 0.8$, les richesses supérieures à $\bar{\Phi}$ augmentent le taux de dégagement de chaleur, tandis que les richesses plus faibles ont un effet opposé. Cette

4. En réalité, une valeur très faible de ce paramètre est considérée pour éviter les divisions par zéro dans la formule donnée par l'équation (5.10).

compétition engendre une déviation plus faible, comparé au cas $\bar{\Phi} = 1.2$, par rapport aux conditions homogènes.

5.7 Effets des hétérogénéités sur les propriétés locales de la flamme

Précédemment, par le biais des analyses globales, il a été montré que l'influence des hétérogénéités de richesse sur la propagation du noyau de flamme augmente avec l'échelle de longueur de la stratification. En outre, il a été noté, également, que les effets associés au taux de ségrégation de la distribution de richesse restent limités par rapport à ceux de l'échelle de longueur caractéristique. Ainsi, les analyses locales des propriétés locales du front de flamme, qui sont l'objet de cette section, se focaliseront sur la configuration impliquant une stratification à grande échelle de longueur caractéristique et présentant un taux de ségrégation élevé *i.e.* LLBH-F-N.

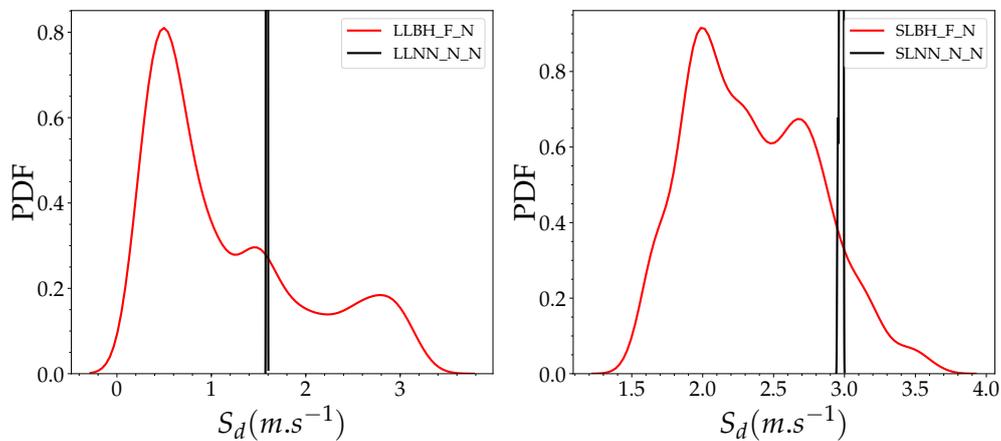


Figure 5.23 – PDF de la vitesse de déplacement sur le front du flamme donné par l'iso-valeur c_{\max} pour les cas LLBH-F-N (à gauche) et SLBH-F-N (à droite) aux temps $t = 5\tau_F$ et $t = 8\tau_F$ respectivement (en rouge) et pour les conditions homogènes associées (en noir).

Selon l'étude décrite ci-dessus, les hétérogénéités de richesse ont tendance (dans les conditions de l'étude) à réduire l'efficacité, en terme de dégagement de chaleur, de la flamme par rapport à la flamme homogène. Comme conséquence directe, la vitesse moyenne de propagation du front de flamme diminue lorsque des hétérogénéités de richesse sont introduites dans ces conditions. La Figure 5.23 illustre cet effet qui se traduit par un décalage du pic de la PDF de la vitesse de déplacement locale du front de flamme (donné par l'iso-valeur c_{\max}) vers des valeurs plus faibles comparé au cas homogène. De plus, en raison de la dépendance de la vitesse locale à la composition, à la température et à la pression, les différents points des flammes hétérogènes se propagent à des vitesses différentes, ce qui mène à une PDF plus large, contrairement à celle obtenue pour une flamme homogène.

Par ailleurs, bien que la distribution des richesses locales considérées dans ces cas est initialement symétrique autour de la valeur moyenne, c'est-à-dire qu'il y a autant de poches plus pauvres que de poches plus riches que la valeur moyenne, la distribution des vitesses

de déplacement des flammes hétérogènes ne conserve pas cette propriété en présentant plus de valeurs de S_d inférieures à celles des conditions homogènes. Ceci peut être attribué à l'évolution temporelle de la distribution de richesse ou de fraction de mélange qui favorise la probabilité de l'arrivée des poches pauvres sur le front de flamme. En effet, les points du front de flamme qui rencontrent des zones plus favorables à la propagation consomment plus rapidement les gaz frais, tandis que les points qui correspondent au scénario opposé, consomment les gaz frais moins rapidement de sorte à ce que les zones de composition de réactifs moins favorables à la propagation deviennent plus probables avec le développement de la flamme. Lorsque $\bar{\Phi} = 0.8$, ces zones correspondent à des points plus pauvres que la condition homogène, et représentent des richesses inférieures ou supérieures à $\bar{\Phi}$, dans le cas $\bar{\Phi} = 1.2$.

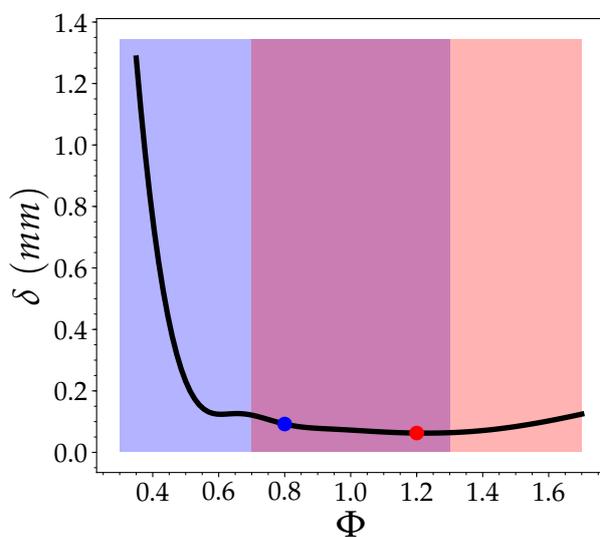


Figure 5.24 – Épaisseur de flamme laminaire monodimensionnelle en fonction de la richesse pour des gaz frais de température 700K et une pression de 5bar, les points bleu et rouge représentent les richesses moyennes initiales des configurations DNS, et les zones ombrées délimitent la plage des fluctuations initiales de richesse.

La tendance pour la distribution observée dans les gaz frais à évoluer dans le sens de l'augmentation de la probabilité des zones moins favorables à la propagation, affecte également l'épaisseur locale de la flamme. En effet, en adoptant un raisonnement basé sur les flammes laminaire monodimensionnelles (cf. Figure 5.24), l'épaisseur de flamme croît (i) avec la diminution de la richesse à partir du point $\Phi = 0.8$, et (ii) lorsqu'on s'écarte du point $\Phi = \Phi_{\max} = 1.2$. Ainsi, lorsque des hétérogénéités de richesse sont introduites, la PDF de l'épaisseur locale de la flamme δ s'élargit sur des valeurs supérieures à leur contrepartie homogène, comme l'illustre la Figure 5.25.

Un autre point intéressant réside dans la différence observée sur la forme de la PDF de δ entre les cas de richesses moyennes initiales $\bar{\Phi} = 1.2$ et $\bar{\Phi} = 0.8$. Dans le premier cas, la PDF présente un seul pic autour duquel elle est pratiquement symétrique, alors qu'elle est dissymétrique avec trois pics dans le second cas. Cela peut s'expliquer par analogie à l'évolution de l'épaisseur laminaire δ_L^0 de flamme monodimensionnelle en fonction de la richesse, qui évolue de manière quasi symétrique autour de $\Phi = 1.2$ (zone ombrée rouge sur Figure 5.24) et dissymétrique dans le cas pauvre (zone ombrée bleue sur Figure 5.24).

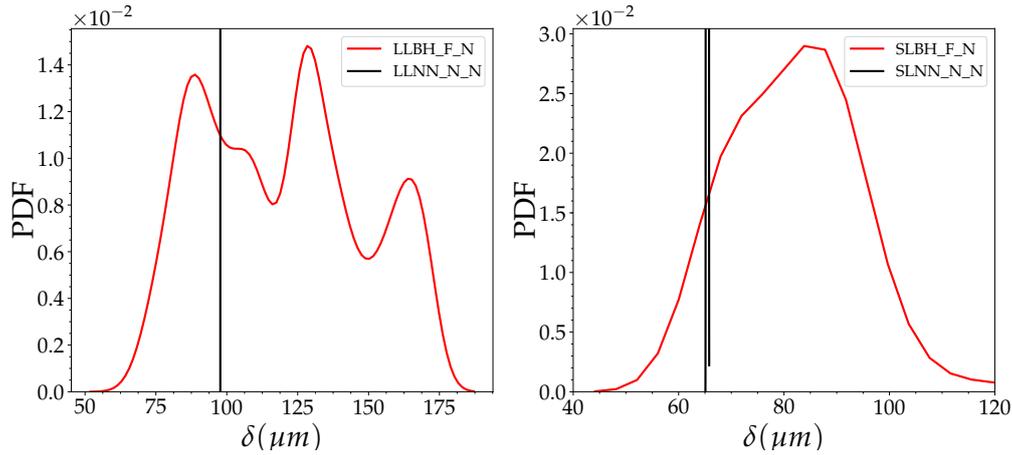


Figure 5.25 – PDF de l'épaisseur de flamme locale pour les cas LLBH-F-N (à gauche) et SLBH-F-N (à droite) aux temps $t = 5\tau_F$ et $t = 8\tau_F$, respectivement (en rouge), et pour les conditions homogènes associées (en noir).

L'augmentation de l'épaisseur et la diminution de la vitesse de propagation locales de la flamme, impliquent une croissance du rapport de ces deux quantités. Ce dernier, s'interprète comme une échelle de temps caractéristique de la propagation τ_p . Comme le montrent les PDF de τ_p présentées sur la Figure 5.26, les échelles de temps caractéristiques de la propagation dans une flamme stratifiée sont plus importants que celles des flammes homogènes dans les conditions de cette étude. La valeur moyenne des temps caractéristiques de propagation est augmentée de 2.5 fois et 3 fois, par rapport aux conditions homogènes, pour les cas $\bar{\Phi} = 0.8$ et $\bar{\Phi} = 1.2$, respectivement. En outre, en dépit des différences observées entre les formes des PDFs de vitesses de propagation et des épaisseurs locales de flammes pour les deux richesses moyennes initiales considérées, les PDFs des temps caractéristiques présentent des formes similaires avec une largeur plus importante dans le cas $\bar{\Phi} = 0.8$ en raison des grandes valeurs que τ_p prend dans les zones voisines de la limite d'inflammabilité pauvre.

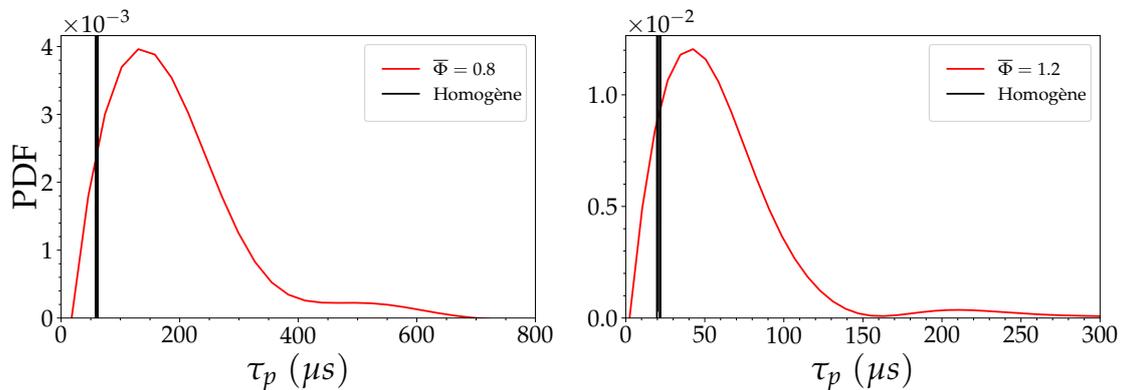


Figure 5.26 – PDF des temps caractéristiques de propagation τ_p pour les cas LLBH-F-N (à gauche) et SLBH-F-N (à droite) aux temps $t = 5\tau_F$ et $t = 8\tau_F$ respectivement (en rouge) et pour les conditions homogènes associées (en noir).

5.8 Conclusion

Les définitions et les méthodes de calcul des propriétés fondamentales telles que l'épaisseur locale de flamme ainsi que les caractéristiques de la variable de progrès ont été introduites en vue de l'utilisation de ces dernières dans l'étude de propagation d'un noyau de flamme dans un milieu stratifié. Afin d'isoler les effets des hétérogénéités de composition par rapport à ceux associés à la turbulence, ce milieu a été considéré laminaire.

Les effets conjoints des hétérogénéités de richesse et de température ont été découplés en considérant trois natures de stratification (richesse, température et corrélation richesse-température). Il a été montré suite à l'analyse de la réponse volumique de la flamme que les effets de stratification en richesse ainsi que la corrélation richesse-température sont comparables, de manière à ce que l'effet de la stratification en température est négligeable. Par conséquent, l'étude s'est orientée vers les stratifications en richesse.

En moyenne et indépendamment de la valeur moyenne du champ de fluctuations de richesse considérée, il a été montré que l'efficacité de la flamme diminue ou au mieux reste similaire, lorsque la flamme se propage dans un milieu stratifié, par rapport aux conditions homogènes. Cet effet attendu pour le cas de richesse moyenne correspondant au maximum de la vitesse laminaire de flamme, ne semblait pas aussi évident le cas pauvre en moyenne. Dans ce dernier cas, une forte dépendance à la distribution spatiale de richesses a été notée et se manifeste par un comportement opposé de la réponse volumique de la flamme (*i.e.* augmentation/diminution de l'efficacité de la combustion en comparaison à l'homogène). Cela suggère, que dans le cas bidimensionnel, la considération d'un seul tirage spatial de la stratification n'est pas représentative et mène à des conclusions contradictoires telles que celles relevées dans la littérature.

La diminution de l'efficacité de flamme est attribuée à une évolution de la distribution de la richesse ou de la fraction de mélange vers des zones défavorables à la propagation (zones plus pauvres lorsque le mélange est pauvre moyenne, *i.e.* $\bar{\Phi} = 0.8$, des zones plus pauvres et plus riches lorsque $\bar{\Phi} = 1.2$). Compte tenu de la faible influence des hétérogénéités sur la surface du front de flamme, la réduction de l'efficacité est synonyme d'une réduction du taux de dégagement de chaleur par unité de surface. Ce dernier est également impacté par les plissements introduits au niveau du front de flamme en raison de la différence des vitesses de propagation locales.

Enfin, il a été observé que les déviations relatives, par rapport aux conditions homogènes, dépendent des caractéristiques de la distribution du champ de richesse locale, de sorte qu'elles augmentent avec l'accroissement de la taille caractéristique et du taux de ségrégation, avec néanmoins une prédominance des effets associés à l'échelle de longueur caractéristique. Dans le cas où la stratification est caractérisée par une échelle de longueur importante et une forte ségrégation, l'étude des propriétés locales de la flamme a montré un élargissement des PDFs de vitesses de propagation (des épaisseurs de flammes) locales avec des valeurs plus petites

(grandes) de sorte que le temps caractéristique moyen de propagation soit 2.5 fois plus élevé que celui de la flamme homogène associée.

Modèle chimique optimisé à une étape (OSS)

Sommaire

6.1	Introduction	118
6.2	Revue bibliographique	119
6.3	Modèle optimisé à une étape	122
6.3.1	Estimation de la température des gaz brûlés	122
6.3.2	Estimation de la vitesse de propagation de la flamme laminaire	128
6.3.3	Restauration de l'épaisseur thermique de la flamme	134
6.4	Analyse préliminaire du modèle OSS résultant	140
6.5	Applications du modèle OSS	143
6.5.1	Développement de noyaux de flamme prémélangés laminaires	145
6.5.2	Développement de noyaux de flamme prémélangés turbulents	146
6.5.3	Développement de noyaux de flamme prémélangés turbulents dans des mélanges hétérogènes	151
6.5.4	DNS tridimensionnelle de développement de noyaux de flamme	152
6.6	Conclusions	154

6.1 Introduction

DANS ce chapitre, on introduit une procédure de triple-optimisation simple et efficace pour modéliser en une seule étape les effets chimiques impliqués en la combustion turbulente d'une flamme pré-mélangée. La pierre angulaire de l'approche proposée réside dans l'introduction d'une espèce chimique fictive (ou virtuelle), dont les caractéristiques physiques sont fixées pour restituer certaines propriétés essentielles de la combustion et des flammes. En particulier, les trois paramètres reconnus comme les plus influents en termes d'interactions turbulence-chimie et de régimes de combustion prémélangées turbulentes [47], [49]. Ces paramètres sont :

- **la température des gaz brûlés** T_b , qui règle la valeur du facteur de l'expansion thermique $\tau = (T_b - T_u)/T_u$;
- **la vitesse de propagation** S_L^0 , nécessaire pour reproduire la dynamique de la flamme ; et
- **l'épaisseur de flamme prémélangée laminaire** δ_L^0 .

En pratique, les propriétés thermochimiques de l'espèce fictive (dénommée A_Φ ci-après) sont déterminées pour tenir compte des effets de dissociation et de l'oxydation partielle du combustible, c'est-à-dire de la présence des espèces autres que H_2O et CO_2 dans les gaz brûlés, ce qui permet d'obtenir une estimation satisfaisante de T_b . La valeur du facteur pré-exponentiel associé à la loi d'Arrhenius à une seule étape est également optimisée pour reproduire la vitesse de propagation de la flamme laminaire. Enfin, les caractéristiques de transport sont déterminées pour restituer correctement l'épaisseur de flamme thermique. La méthode est générale dans ses principes et assez facile à mettre en œuvre. Elle est, également, applicable à n'importe quel couple de carburant et d'oxydant. Notre attention est focalisée sur l'application de la méthode à n'importe quelle richesse Φ mais il est également montré que l'influence de la pression et de la température des réactifs peut être prise en compte.

Les performances des modèles chimiques optimisés à une seule étape (OSS) qui en résultent sont évaluées grâce à une comparaison directe avec les résultats obtenus avec des chimies détaillées. Les calculs de flammes laminaires monodimensionnelles sont effectués avec le modèle OSS en utilisant le logiciel Cantera pour une large gamme de niveaux de pression, de températures de réactifs et de richesses. Les résultats obtenus montrent que la vitesse de propagation de la flamme est correctement estimée pour l'ensemble des paramètres, avec une valeur maximale localisée au voisinage de la stœchiométrie, une diminution vers les richesses élevées, et une dépendance satisfaisante de la pression. La température des gaz brûlés ainsi que les valeurs d'épaisseur de la flamme thermique sont également en bon accord avec celles issues des mécanismes cinétiques détaillés de référence. Le modèle OSS est ensuite utilisé pour effectuer des calculs de simulation numérique directe (DNS) de développement de noyaux de flamme dans des conditions laminares et turbulentes. La comparaison des résultats OSS obtenus avec des calculs chimiques détaillés confirme davantage la pertinence et la performance de la méthodologie proposée par rapport aux procédures existantes.

Ce chapitre est organisé comme suit. Après la présentation d'une brève revue bibliographique, la procédure d'optimisation est décrite suivant trois sous-sections consacrées à (i) la

détermination des propriétés thermo-chimiques de l'espèce fictive afin de reproduire le facteur de expansion thermique (température des gaz brûlés), (ii) la restauration de la vitesse de flamme laminaire et (iii) la détermination automatique des facteurs pré-exponentiels normalisés et des coefficients de transport de l'espèce virtuelle. Les performances résultant de chaque étape d'optimisation sont évaluées dans chaque sous-section par des comparaisons, avec des données issues des mécanismes cinétiques détaillés de référence. Ensuite, l'implémentation du modèle OSS résultant dans le solveur DNS *Asphodele* est utilisée pour effectuer des calculs de développement de noyaux de flamme. Une attention particulière est consacrée à la comparaison entre les résultats issus du modèle OSS et ceux obtenus avec le schéma chimique détaillé de référence qui a été utilisé comme référence pour le modèle OSS. Enfin, le chapitre se termine par une section de conclusion où les principaux résultats sont résumés.

Ce chapitre s'appuie sur un article publié dans *Combustion and Flame* [153]. Afin que cette partie du manuscrit puisse être lue indépendamment des autres, toutes les informations nécessaires à sa compréhension sont regroupées ici. Cela conduit à quelques répétitions notamment sur la description du code de calcul, les relations thermodynamiques et de transport, etc.

6.2 Revue bibliographique

La considération des effets chimiques détaillés est reconnue comme l'un des défis les plus importants pour la simulation numérique de la combustion. Cette question est particulièrement critique pour la simulation des écoulements réactifs turbulents pour deux causes principales : premièrement la description numérique du champ d'écoulement turbulent est elle-même très exigeante, et deuxièmement la considération de la chimie détaillée dans la modélisation RANS ou LES peut soulever des difficultés de modélisation spécifiques. Les modèles basés sur la PDF transportée [154, 155] peuvent cependant offrir un moyen attrayant de contourner le premier problème mais cela se fait au prix de difficultés dans la modélisation du micromélange et de coûts d'opérations supplémentaires non négligeables. La seconde limitation peut être surmontée par la tabulation adaptative *in situ* (ISAT), qui accélère les calculs des écoulements réactifs [156, 157]. La stratégie proposée dans ISAT, considère l'ensemble des détails du schéma chimique mais tient compte, au cours d'un calcul instationnaire, de tous les états précédemment calculés pour évaluer les grandeurs chimiques. Néanmoins, malgré le développement de méthodologies aussi efficaces, il faut reconnaître que l'utilisation de la chimie détaillée souffre encore de trop de limitations sévères (y compris les coûts de calcul élevés, la raideur, etc.) pour être utilisée régulièrement dans code de calculs CFD. Plusieurs procédures alternatives ont ainsi été introduites pour aborder le problème de la chimie dans les simulations des écoulements réactifs turbulents.

La première stratégie alternative est associée à l'emploi de modèles de chimie tabulée. Elle consiste à effectuer, *a priori*, une cartographie directe de la réponse chimique détaillée sur un nombre réduit de variables caractéristiques telles que la variable de progrès, la fraction de mélange, le taux d'étirement ou encore le taux de dissipation scalaire (SDR). En particulier,

les deux dernières variables sont souvent retenues comme quantités pertinentes pour décrire les écarts par rapport à l'équilibre chimique.

La plupart de ces stratégies de tabulation ont été développées sous l'hypothèse des flammelettes laminaire. Dans le régime de la combustion turbulente correspondant [158, 84, 159], la flamme turbulente est considérée comme une collection d'éléments réactifs locaux qui conservent leur structure identifiable de flamme laminaire stationnaire [47]. Pour les conditions non prémélangées, les fondements de tels modèles de flammelettes laminaires stationnaires (*SLFM*) ont été établis par Peters [83] avec plusieurs extensions et raffinements proposés depuis. Par exemple, certaines applications ont également été basées sur des calculs de flammelettes instationnaires [160, 161]. Pour tenter d'aller au-delà des régimes de flammelettes, d'autres stratégies de tabulation ont considéré le réacteur parfaitement agité (PSR) ou le réacteur partiellement agité (PaSR) comme des blocs de construction élémentaires, le lecteur intéressé pourrait se référer aux références [162, 163, 164, 165] pour plus de détails.

Partant du constat que la thermochimie de la combustion est un processus non linéaire dont les propriétés essentielles peuvent être décrites en termes de système d'équations différentielles ordinaires, *i.e* un système dynamique de grande dimension, les caractéristiques de la solution intégrale (trajectoire), ainsi que les singularités, sont d'un intérêt particulier. La méthode *intrinsic low dimensional manifold* (*ILD*M) de Maas et Pope [166, 167] et la méthode de perturbation singulière numérique (*CSP*) [168, 169, 170] s'inspirent de la même idée fondamentale, celle de négliger les modes rapides. La prise en compte d'un spectre typique d'échelles de temps caractéristiques chimiques confirme, en effet, qu'il couvre une très large gamme de valeurs, dont l'étendue peut excéder sept ordres de grandeur. Les échelles de temps très courts de la cinétique chimique sont généralement responsables des processus de retour à l'équilibre : certaines réactions élémentaires sont en équilibre partiel et certaines espèces chimiques sont en équilibre. Cela constitue un contraste frappant avec les échelles de temps chimiques lentes telles que celles associées à la formation d'oxydes nitriques (NO). Si nous utilisons cette disparité d'échelles de temps, il est possible de découpler les échelles de temps très courts des autres, c'est-à-dire que l'on peut supposer l'équilibre local par rapport aux échelles de temps les plus réduits. Outre les informations obtenues à partir de l'étude mathématique des points stationnaires, de leur stabilité ou de leur comportement oscillatoire, les méthodes proposées (par exemple, *ILD*M et *CSP*) fournissent des informations supplémentaires sur la manière dont la chimie se rapproche de l'équilibre. Ces méthodologies ont donné naissance à d'autres approches qui sont basées sur la considération de la variété de réaction-diffusion (*REDIM*) [171]. Enfin, le couplage de telles stratégies à base de variétés à des méthodes de tabulation standards conduit à la méthode *FPI* [172, 116] qui est devenue très populaire pour réaliser des simulations de combustion turbulente. D'un point de vue technique, la génération et la gestion des tables résultantes peuvent cependant poser de sérieuses difficultés. D'autre part, et d'un point de vue plus fondamental, le bloc de construction sur lequel repose la tabulation bien qu'il soit basé sur un réacteur chimique ou sur une structure de flamme laminaire restreint leur applicabilité en termes de régimes de combustion turbulente. Par conséquent, il est également très intéressant de développer des méthodes alternatives où des schémas chi-

miques globaux ou réduits peuvent être utilisés directement dans le solveur réactif.

Les modèles chimiques réduits ont été introduits assez tôt dans la littérature [173, 174, 175]. Certaines informations essentielles relatives à l’extinction de la flamme, aux températures maximales et aux profils des espèces principales peuvent en effet être estimées de manière satisfaisante avec les mécanismes chimiques correspondants à quatre et cinq étapes. Par exemple, des efforts récents dans ce sens ont conduit à une chimie systématiquement réduite en trois et en quatre étapes pour les mélanges hydrogène-air qui sont valables pour une large gamme de problèmes impliquant l’hydrogène [176, 177]. Les mécanismes correspondants ont été utilisés avec succès pour mener des simulations numériques de flammes de laboratoire, voir par exemple [178], et la même procédure de réduction a également été appliquée à la description de la combustion de gaz de synthèse par le même groupe d’auteurs [179, 180]. A cet égard, il convient de souligner que, d’un point de vue mathématique, la description des problèmes d’allumage nécessite au moins la considération d’une chimie à deux étapes. Ceci est en effet nécessaire pour reproduire la concurrence entre les taux de production et de consommation des radicaux, ces derniers demeurent dominants tant que la température reste inférieure à la température dite de *cross-over*, voir par exemple [181]. Cependant, à condition d’accorder une attention particulière à la description de la propagation des flammes prémélangées, c’est-à-dire sans tenir particulièrement compte du problème d’allumage, la chimie globale en une seule étape est formellement suffisante pour reproduire les caractéristiques fondamentales de la propagation de la flamme. En particulier, comme établi solidement dans la suite, la considération de la chimie en une seule étape suffit pour reproduire les caractéristiques de la flamme laminaire qui sont impliquées dans l’ensemble classique des paramètres utilisés pour caractériser l’interaction flamme-turbulence à savoir la vitesse S_L^0 , l’épaisseur δ_L^0 et le facteur d’expansion τ [49]. Il est proposé ici d’exploiter cette conclusion de manière à optimiser une description chimique paramétrée en une seule étape. On montrera que le modèle OSS qui en résulte permet d’obtenir une estimation pertinente de la expansion thermique, de la vitesse de flamme laminaire et de l’épaisseur pour un coût très modéré : quatre équations de transport, un seul taux de réaction et la tabulation de dix-neuf quantités. D’autres études ont récemment été menées avec des objectifs similaires. En particulier, la vitesse de flamme laminaire S_L^0 peut être correctement estimée pour une large gamme de richesses grâce à une optimisation du facteur pré-exponentiel comme dans les travaux réalisés par *Vervisch et al.* [182], *Fernandez-Tarrazo et al.* [183], *Reveillon* [184] ou *Robin et al.* [103]. Plus récemment, *Franzelli et al.* [185] décrit un modèle chimique en deux étapes qui restitue de manière satisfaisante la vitesse de propagation de la flamme laminaire et la température dans les gaz brûlés pour une large gamme de richesse Φ . Il sera montré ici que des performances similaires peuvent être obtenues à partir de notre modèle optimisé à une seule étape (OSS). En pratique, la plupart des modèles de chimie globale disponibles ne sont valables que dans une gamme restreinte de richesses, et ne reproduisent pas l’épaisseur de la flamme laminaire ou son évolution avec Φ . Seuls quelques efforts très récents (*Cailler et al.* [186]) ont été faits pour résoudre ces problèmes au prix de l’utilisation d’algorithmes génétiques .

6.3 Modèle optimisé à une étape

Dans cette section, nous présentons les procédures retenues pour restaurer la température des gaz brûlés (section §6.3.1), pour reproduire la vitesse de propagation de flamme laminaire (section §6.3.2), et l'épaisseur de la flamme laminaire (section §6.3.3). Une estimation correcte de la première grandeur, à savoir la température des gaz brûlés, permet de restituer le facteur d'expansion thermique, indispensable pour évaluer les effets de diffusion à contre-gradient (CGD) et de la production de turbulence par la flamme (FGT) [187, 188, 189, 45] ainsi que le mélange aux petites échelles et le taux de dissipation scalaire (SDR) [49, 190]. La capacité à reproduire la vitesse de propagation de flamme est essentielle pour bien représenter la dynamique de la flamme, le taux de consommation et le taux de dégagement de chaleur associés. Ceci a été identifié au début comme une cible importante pour les schémas chimiques réduits [191, 192]. Puisqu'elle peut filtrer l'influence de certaines fluctuations de vitesse sur le front de flamme [193, 194], l'épaisseur de la flamme apparaît également comme un paramètre crucial de l'interaction flamme-turbulence [46, 47]. Enfin, en reproduisant les valeurs de l'expansion thermique, de vitesse de flamme laminaire et d'épaisseur, la chimie optimisée en une seule étape (OSS) devrait être capable de capturer les effets les plus importants de l'interaction flamme-turbulence. Cette question spécifique sera abordée et examinée dans la section §6.5.

6.3.1 Estimation de la température des gaz brûlés

La température de la flamme est un paramètre de premier ordre pour les flammes : elle reflète non seulement l'exothermicité globale des processus de combustion, mais influence aussi directement l'efficacité de certains processus chimiques ultérieurs associés à la formation de polluants [84]. De plus, la température de la flamme peut également affecter considérablement les charges thermiques au niveau des parois de la chambre de combustion, ce qui est un problème crucial du point de vue de la détérioration possible de la chambre, si elle n'est pas bien contrôlée.

À partir de l'examen d'un bilan énergétique standard appliqué entre des réactifs frais (de composition $\phi^u = (Y_i^u, T_u)$) et des produits de combustion (de composition $\phi^b = (Y_i^b, T_b)$). On peut facilement démontrer que la température de la flamme est contrôlée par la nature des espèces chimiques qui sont produites. Sa valeur est en effet donnée par les changements d'énergie associés à la rupture et à la formation des liaisons chimiques. Ceci est illustré sur la Figure 6.1 où deux descriptions thermochimiques distinctes des mélanges méthane-air sont considérées pour calculer l'équilibre thermochimique. La première description (ci-après dénommée REF-0) ne concerne que cinq espèces stables (CH_4 , CO_2 , H_2O , O_2 et N_2), alors que la seconde (dénommée REF-1) contient les 53 espèces (y compris des radicaux ou intermédiaires) impliqués dans le mécanisme détaillé GRI3.0 [195].

La Figure 6.1 montre que la valeur de la température de la flamme issue de la représentation à cinq espèces fournit une estimation satisfaisante pour les faibles richesses (mélanges pauvres), mais ne permet pas de reproduire les valeurs de la température de flamme pour

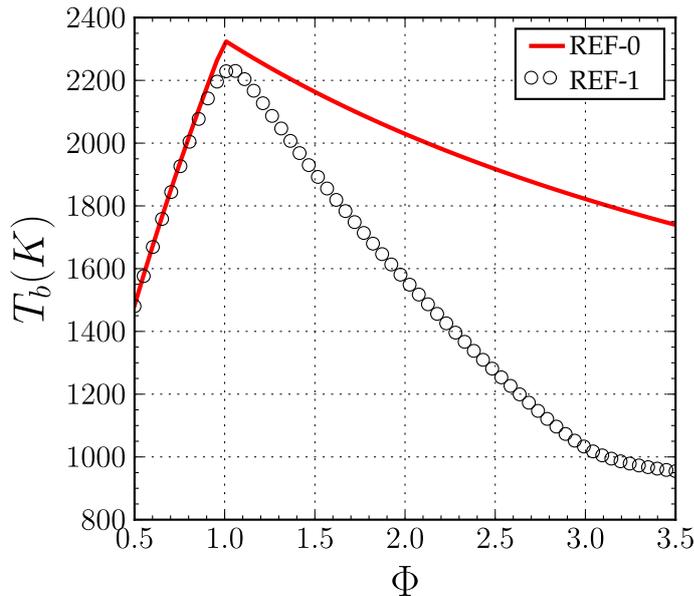


Figure 6.1 – La température des gaz brûlés d’une flamme méthane-air est représentée en fonction de la richesse. Comparaison entre les résultats issus d’une représentation thermochimique à cinq espèces (REF-0) et à 53 espèces (REF-1).

des mélanges riches. Ces écarts résultent évidemment de la négligence des effets d’oxydation partielle. Ces effets restent en effet négligeables dans les mélanges pauvres et les produits de combustion résultants correspondent principalement aux principales espèces chimiques N_2 , H_2O , CO_2 et O_2 , qui sont toutes considérées dans le mécanisme REF-0. Inversement, dans les produits de combustion issus de mélanges riches, puisque l’oxygène est totalement oxydé, les principales espèces chimiques sont maintenant N_2 , H_2O , CO_2 , CO et H_2 (oxydation partielle du combustible). La surestimation de la température de la flamme résulte donc de la non-consideration des deux dernières espèces.

Ceci conduit en effet à négliger l’effet endothermique de la réaction d’équilibre chimique $CO_2 + H_2 \rightleftharpoons CO + H_2O$. Ceci suggère que, tant que les effets de dissociation restent modérés, une représentation de sept espèces (désignée ci-après par REF-0*) peut conduire à une amélioration significative de l’évaluation de la température de la flamme indépendamment de la valeur de la richesse. En effet, pour une température de flamme supérieure à 2000K, typiquement pour des dispositifs fonctionnant avec (i) de l’oxygène pur comme comburant, (ii) des combustibles hautement énergétiques, ou (iii) des mélanges réactifs proches de la stœchiométrie ($\Phi = 1$), les effets ne peuvent plus être négligés, et la prise en compte des espèces mineures, par exemple OH, NO, H, etc. devient donc essentielle pour obtenir une estimation satisfaisante de la température de la flamme.

La [Figure 6.2](#) fournit d’autres exemples illustrant l’impact de la composition des gaz brûlés sur la température de la flamme. Les combustions de mélanges méthane-air ([Figure 6.2a](#)), de l’acétylène -air ([Figure 6.2b](#)) et de méthane-oxygène ([Figure 6.2c](#)) sont considérées avec trois représentations thermochimiques distinctes. Pour les mélanges méthane-air, la représentation (REF-0*) donne une estimation assez satisfaisante de la température de la flamme sauf au voisinage immédiat de la stœchiométrie où un écart (très) faible par rapport au résultat de référence (REF-1) est observé. Il convient de rappeler ici que les 53 espèces chimiques impli-

quées dans la représentation GRI3.0 ont été considérées pour obtenir le résultat de référence REF-1. Pour les deux autres couples de réactifs, les écarts par rapport à la solution de référence dans les mélanges quasi-stœchiométriques sont plus importants. Les figures 6.2b et 6.2c présentent les températures de flamme élevées obtenues avec ces mélanges.

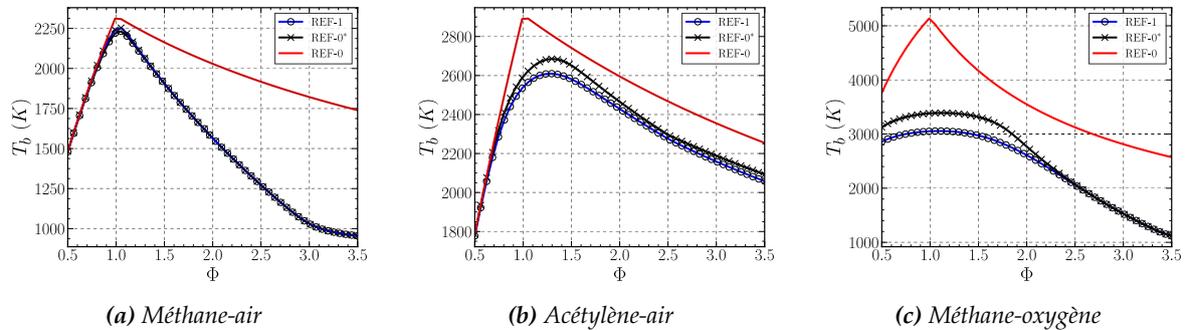


Figure 6.2 – Température adiabatique pour différents mélanges (a), (b) et (c). Comparaison entre REF-0, REF-0* et REF-1

À partir de ces résultats, il pourrait être suggéré d'utiliser une représentation thermo-chimique plus complète comprenant au moins le dioxyde de carbone CO et l'hydrogène H₂ de manière à obtenir une meilleure estimation de la température de la flamme. Ceci induirait cependant un effort numérique non négligeable pour résoudre les équations de transport pour chaque espèce supplémentaire. Par conséquent, une méthode alternative est proposée. Elle consiste à décrire l'état thermo-chimique de tout mélange d'hydrocarbure et d'air avec quatre espèces seulement, quel que soit la richesse, la température des gaz frais et de la pression. La base de la méthode consiste à introduire une espèce chimique virtuelle dont la composition atomique dépendra de la température, de la pression et de la richesse. En ce qui concerne la chimie en une seule étape, l'introduction des espèces chimiques virtuelles (ou fictives) n'est pas nouvelle : elle a été utilisée pendant de nombreuses décennies pour corriger l'estimation de la température des gaz brûlés. Elle a également été utilisée plus récemment par [Cailler et al. \[186\]](#) pour introduire une optimisation des chimies en une ou en deux étapes, en se basant sur un algorithme génétique. Dans la présente étude, l'espèce fictive tiendra compte de l'influence des espèces chimiques autres que N₂ présentes dans les produits de combustion. En particulier, elle intégrera les effets éventuels de la dissociation et de l'oxydation partielle du combustible, à savoir la présence des espèces chimiques autres que CO₂ et H₂O. L'espèce virtuelle est définie sur la base d'une équivalence entre la composition à l'équilibre chimique issue d'une représentation thermo-chimique détaillée et la composition en produits brûlés résultant d'un schéma global à une étape.

La forme générique d'un tel schéma de réaction global s'écrit :



où ν_F , ν_O et ν_P désignent respectivement les coefficients stœchiométriques du combustible \mathcal{F} , du comburant \mathcal{O} et du produit \mathcal{P} .

Une équation similaire peut être utilisée pour décrire la combustion d'un hydrocarbure C_nH_m dans l'air à n'importe quel richesse Φ :



où :

- γ est le nombre de moles d'azote présentes dans l'air. On considère ici que la composition de l'air est constituée de 21% O_2 et de 79% de N_2 , ce qui correspond à une valeur de γ à peu près égale à 3.76.
- A_Φ désigne l'espèce virtuelle. Sa composition atomique dépend de la richesse Φ et peut être directement déduite de la conservation des éléments atomiques entre les réactifs frais (état initial) et les produits brûlés de la combustion (état final), $A_\Phi \equiv \{C : n, H : m, O : 2 \left[n + \frac{m}{4} \right] / \Phi\}$.

Les caractéristiques de l'espèce virtuelle sont définies en tenant compte des trois contraintes suivantes :

- **conservation de masse** : entre les états initial et final obtenus à partir de la réaction globale qui implique quatre espèces. Cela permet d'exprimer la masse molaire de l'espèce virtuelle A_Φ :

$$W_{A_\Phi} = W_{C_nH_m} + \frac{(n + m/4)}{\Phi} W_{O_2} = nW_C + mW_H + \left(n + \frac{m}{4} \right) W_{O_2} \quad (6.3)$$

ainsi que sa fraction massique :

$$Y_{A_\Phi} = \left(\frac{r_s}{\Phi} + 1 \right) \left[1 + \frac{r_s}{\Phi} \left(1 + \gamma \frac{W_{N_2}}{W_{O_2}} \right) \right]^{-1} \quad (6.4)$$

en fonction de la richesse Φ , des masses molaires $W_{C_nH_m}$, W_{O_2} et W_{N_2} des espèces chimiques C_nH_m , O_2 et N_2 , et du rapport stœchiométrique r_s :

$$r_s = \left(n + \frac{m}{4} \right) \frac{W_{O_2}}{W_{C_nH_m}} \quad (6.5)$$

- **conservation de l'enthalpie** : entre les états initial et final obtenus à partir de (i) la réaction globale qui ne concerne que quatre espèces et (ii) l'état d'équilibre déduit de la représentation thermochimique détaillée. Ceci permet de déduire l'enthalpie spécifique de l'espèce virtuelle à partir de l'expression suivante :

$$h_{A_\Phi} = \frac{\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k h_k(T) - Y_{N_2} h_{N_2}(T)}{Y_{A_\Phi}} \quad (6.6)$$

où le premier terme de la différence dans le membre de droite est une somme effectuée sur toutes les espèces présentes à l'équilibre chimique obtenu avec la représentation thermochimique de référence.

- **conservation de l'entropie** : Ceci permet de déduire l'entropie spécifique de l'espèce virtuelle à partir de l'expression suivante :

$$s_{A_\Phi} = \frac{\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k s_k(T) - Y_{N_2} s_{N_2}(T)}{Y_{A_\Phi}} \quad (6.7)$$

où le premier terme de la différence dans le membre de droite est à nouveau une somme effectuée sur toutes les espèces présentes à l'équilibre chimique.

Du système d'équations (6.3, 6.4, 6.6, 6.7), l'expression des coefficients des polynômes de Gordon et McBride (cf. 2.2.2), est obtenue pour l'espèce virtuelle A_Φ :

$$a_{i,A_\Phi} = \Gamma(\Phi) \left(\sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{W_k} a_{i,k} - \frac{Y_{N_2}}{W_{N_2}} a_{i,N_2} \right), \quad i = 0..6, \quad (6.8)$$

où :

$$\Gamma(\Phi) = W_{A_\Phi} Y_{A_\Phi}^{-1} \left(W_{C_nH_m} + \frac{n + m/4}{\Phi} W_{O_2} \right) \left[1 + \frac{r_s}{\Phi} \left(1 + \frac{\gamma W_{N_2}}{W_{O_2}} \right) \right] \times \left(1 + \frac{r_s}{\Phi} \right)^{-1} \quad (6.9)$$

Enfin, la détermination des caractéristiques thermodynamiques de l'espèce virtuelle peut être résumée par la procédure suivante, mise en œuvre dans Cantera [142].

Elle consiste en les étapes suivantes :

1. sélection d'un modèle thermochimique de référence détaillé sur la base de sa capacité à reproduire des résultats en accord avec les données expérimentales disponibles ;
2. construction d'une base de données de calculs d'équilibre, pour les gammes considérées de richesse, de température, et de pression ;
3. calcul des coefficients de la représentation polynomiale de l'espèce virtuelle en utilisant l'expression fournie par (6.8) ;
4. tabulation des coefficients de l'espèce virtuelle en fonction de la richesse, de la température et de la pression. La tabulation correspondante pourrait ensuite être utilisée comme entrée pour d'autres applications telles que les calculs de flammes prémélangées mono-dimensionnelles.

L'algorithme ci-dessus est appliqué à la combustion de quatre hydrocarbures distincts (CH_4 , C_3H_8 , C_7H_{16} et C_3H_{18}) avec de l'air afin de déterminer les caractéristiques des espèces virtuelles correspondantes pour un large éventail de conditions de fonctionnement présentant une richesse variable Φ . Les représentations détaillées sont celles présentées dans le [Tableau 6.1](#). Le modèle OSS-1 désigne les mélanges de quatre espèces contenant le combustible F , l'oxygène O_2 , l'azote N_2 et l'espèce virtuelle A_Φ . Le modèle REF-1 est le modèle thermochimique à 53 espèces retenu dans le schéma GRI3.0. La [Figure 6.3](#) illustre les résultats obtenus avec les modèles OSS-1 pour la combustion de ces quatre hydrocarbures. La [Figure 6.4](#) rapporte les résultats obtenus dans les cas de combustion de mélanges méthane et d'acétylène pour lesquels les effets de dissociation sont importants. Enfin, les performances du modèle

Fuel	Reference scheme	N_{sp}	N_r
Methane CH_4	REF-1 [195]	53	325
Propane C_3H_8	REF-2 [196]	31	107
N-heptane C_7H_{16}	REF-3 [197]	654	5258
Iso-octane C_8H_{18}	REF-4 [198]	874	7522
Iso-octane C_8H_{18}	REF-5 [139]	29	48

Tableau 6.1 – Représentations détaillées et semi-détaillées [195, 196, 197, 198, 139] retenues pour notre étude. Les quantités N_{sp} et N_r désignent respectivement le nombre d'espèces chimiques et le nombre d'étapes réactionnelles élémentaires.

OSS-1 sont également évaluées en fonction de la pression de fonctionnement et des variations de température initiales de la Figure 6.5.

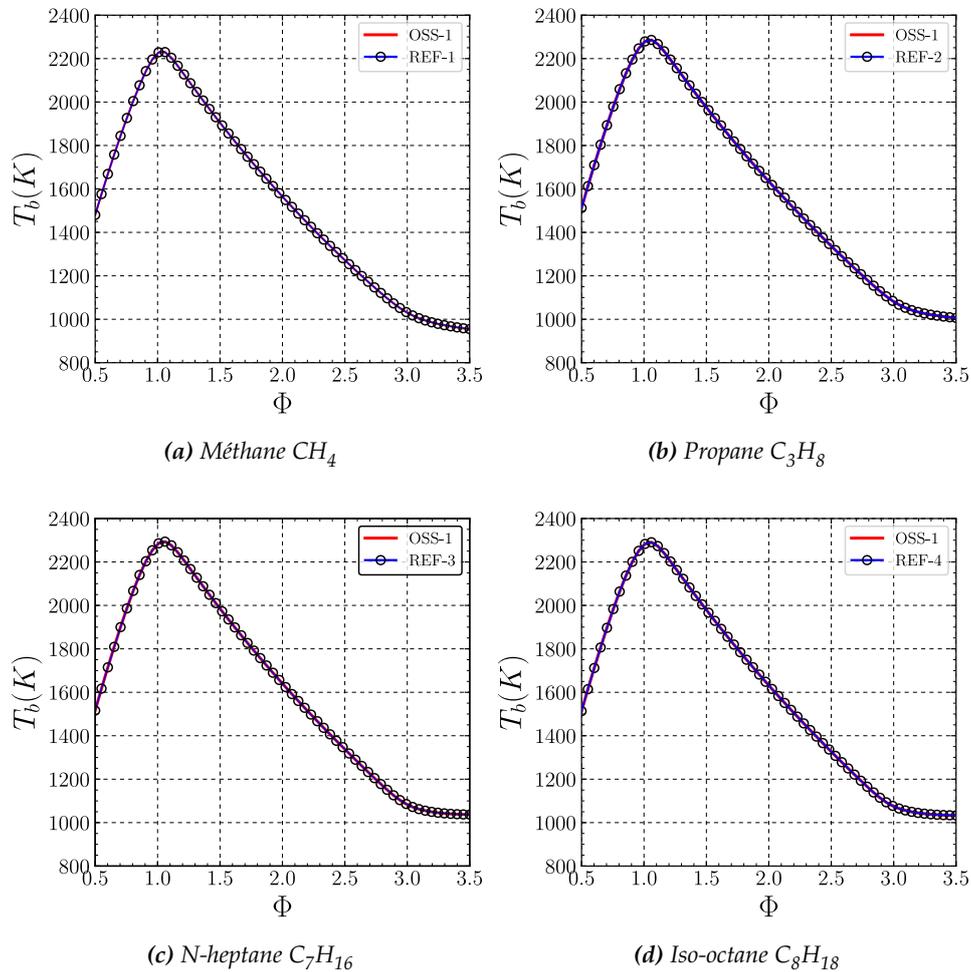


Figure 6.3 – Températures de flammes d'hydrocarbures-air en fonction de la richesse. Les conditions correspondent à la pression atmosphérique $P = 1 \text{ atm}$ et à une température de réactifs frais $T_0 = 300.0 \text{ K}$. Symboles : représentation détaillée, voir Tableau 6.1. Ligne continue : modèle OSS-1 à quatre espèces.

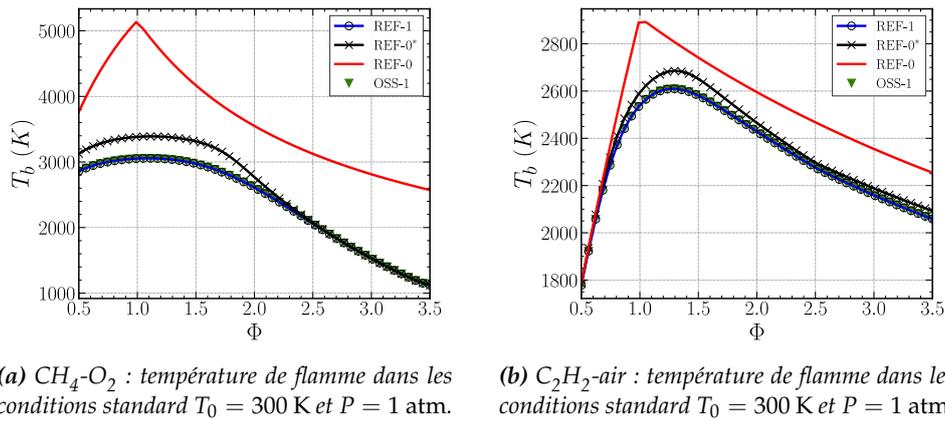


Figure 6.4 – Restauration de la température de la flamme dans le cas de l’oxycombustion de méthane ($\text{CH}_4\text{-O}_2$) et de la combustion d’acétylène-air ($\text{C}_2\text{H}_2\text{-air}$). Symboles comme sur la Figure 6.2 et modèle OSS-1 en couleur.

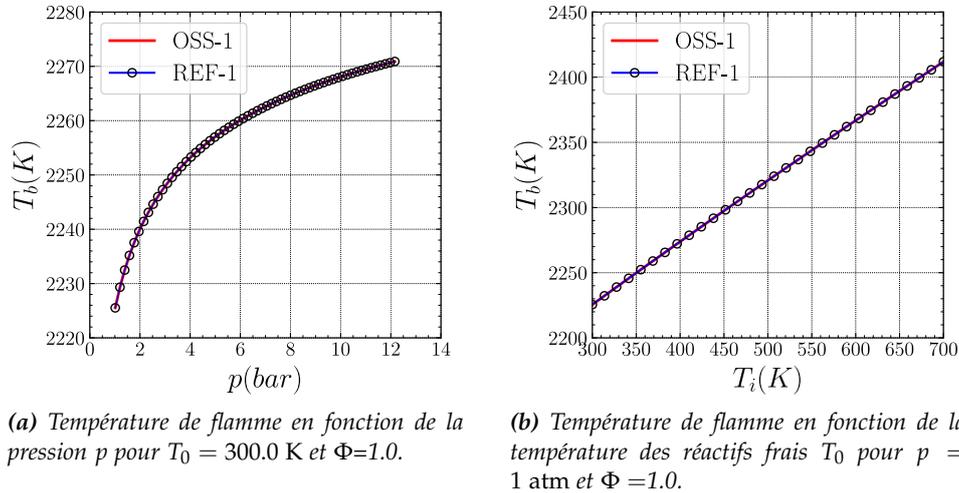


Figure 6.5 – Température de flamme stœchiométrique de méthane-air : influence de la pression opératoire p (gauche) et de la température initiale T_0 (droite). Symboles : Modèle thermochimique GRI3.0 [195] utilisé comme référence REF-1. Ligne continue : modèle à quatre espèces OSS-1.

6.3.2 Estimation de la vitesse de propagation de la flamme laminaire

La vitesse de propagation de la flamme laminaire a été reconnue depuis 1883 par **Mallard et Le Chatelier** [199] comme l’une des grandeurs caractéristiques les plus importantes de la combustion prémélangée. Elle présente une dépendance du premier ordre à la description des réactions chimiques et, dans le cadre de la modélisation de la chimie par le OSS, le taux de réaction associé à l’eq.(6.1) est représenté avec une loi d’Arrhenius :

$$\dot{\omega} = K \rho^{n_p} Y_F^{n_F} Y_O^{n_O} \exp\left(-\frac{E_a}{\mathcal{R}T}\right) \quad (6.10)$$

où K désigne le facteur pré-exponentiel, E_a est l’énergie d’activation, n_F et n_O sont les exposants de la réaction (avec $n_p = n_F + n_O$). Les taux de production/consommation de la

fraction massique de chaque espèce peuvent être déduits des expressions : $\dot{\omega}_{Y_F} = -n_F W_F \dot{\omega}$, $\dot{\omega}_{Y_O} = -n_O W_O \dot{\omega}$ et $\dot{\omega}_{Y_P} = n_P W_P \dot{\omega}$. Pour les besoins ultérieurs de notre analyse, nous introduisons la fonction pré-exponentielle adimensionnée f_p et l'équation (6.10) est réécrite sous la forme suivante :

$$\dot{\omega} = \mathcal{K} \rho^{n_p} f_p(\mathcal{Y}_F, \mathcal{Y}_O) \exp\left(-\frac{E_a}{\mathcal{R}T}\right) \quad (6.11)$$

où $\mathcal{Y}_F = Y_F/Y_F^\infty$ et $\mathcal{Y}_O = Y_O/Y_O^\infty$ et désignent les fractions massiques du combustible et de l'oxydant normalisées par leurs valeurs respectives prises dans le flux de combustible et de comburant, et $\mathcal{K} = K.(Y_F^\infty)^{n_F}.(Y_O^\infty)^{n_O}$.

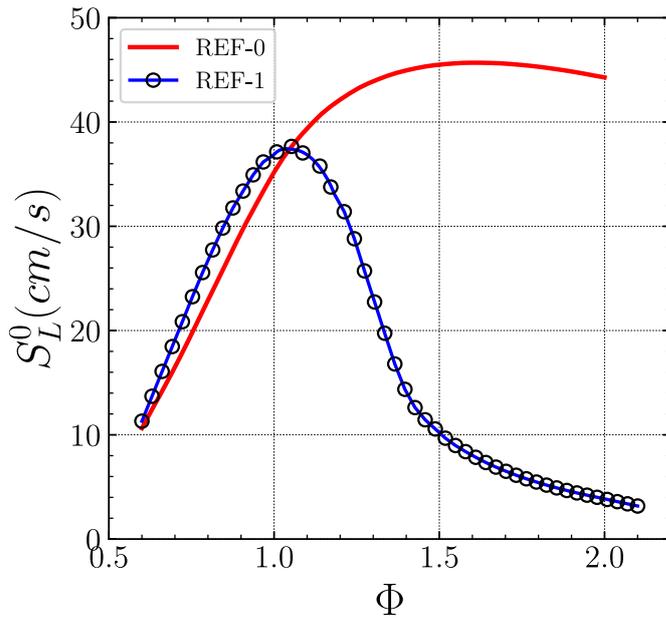


Figure 6.6 – Comparaison de la vitesse de propagation de flamme laminaire S_L^0 de CH_4 -air obtenue avec les descriptions chimiques REF-0 et REF-1 (GRI3.0)

Quelques restrictions physiques et numériques bien connues émergent lors de l'utilisation d'une telle loi d'Arrhenius simplifiée. Par exemple, comme l'ont montré [Ferziger et Echekki \[200\]](#), avec des exposants de réaction n_F et n_O de l'ordre de l'unité, des estimations asymptotiques et numériques de la vitesse de la flamme en fonction de la richesse conduiront à des valeurs satisfaisantes sur le côté pauvre ($\Phi < 1$). En revanche, sur le côté riche ($\Phi > 1$), la loi considérée conduit à des valeurs erronées, cf. [Figure 6.6](#). En pratique, une croissance constante de la vitesse peut être observée même pour des valeurs de richesse significativement supérieures à l'unité alors qu'elle devrait atteindre sa valeur maximale pour $\Phi = \Phi_{\max}$ où Φ_{\max} est la richesse à laquelle la vitesse de la flamme atteint son maximum. Cette divergence spécifique est liée à la variation de la fonction pré-exponentielle adimensionnelle $f_p(\mathcal{Y}_F, \mathcal{Y}_O) = \mathcal{Y}_F^{n_F} \mathcal{Y}_O^{n_O}$ qui peut être exprimée en fonction de la richesse Φ . En effet, la fraction de mélange ζ s'écrit :

$$\zeta = \frac{\phi \mathcal{Y}_F - \mathcal{Y}_O + 1}{\phi + 1} \quad (6.12)$$

où $\phi = r_s Y_F^\infty / Y_O^\infty$ est un paramètre qui reste constant pour tout mélange d'un combustible donné et d'un comburant. La fraction massique de combustible normalisée dans les réactifs frais est donnée par $\mathcal{Y}_F^u = \zeta$ tandis que la fraction massique d'oxydant normalisée dans les réactifs frais peut être évaluée à partir de $\mathcal{Y}_O^u = 1 - \zeta$. Cela permet d'induire une seconde

variable qui suit la présence de combustible et d'oxydant comme $p = \mathcal{Y}_F + \mathcal{Y}_O$ de telle manière à ce que la valeur du paramètre de présence p est maximale ($p = 1$) dans les réactifs frais, c'est-à-dire $p_u = \mathcal{Y}_F^u + \mathcal{Y}_O^u = 1$ et diminue à mesure que la combustion progresse ; il atteint zéro à la stœchiométrie. Par ailleurs, la richesse Φ peut facilement être exprimée en fonction de la fraction de mélange :

$$\Phi = r_s \frac{Y_F^u}{Y_O^u} = \phi \frac{\mathcal{Y}_F^u}{\mathcal{Y}_O^u} = \phi \frac{\xi}{1 - \xi} \quad (6.13)$$

À partir de la définition de la fraction de mélange, la relation suivante entre les fractions massiques normalisées de l'oxydant et du combustible peut être retenue :

$$\mathcal{Y}_O = \phi \mathcal{Y}_F + 1 - \frac{\Phi(\phi + 1)}{(\phi + \Phi)} \quad (6.14)$$

où la fraction de mélange est exprimée en utilisant la richesse. Ensuite, en utilisant la définition du paramètre de présence pour exprimer \mathcal{Y}_F , la fraction massique normalisée de l'oxydant peut être directement obtenue en fonction de p et Φ :

$$\mathcal{Y}_O = \phi \frac{\phi p + \Phi(p - 1) + 1}{\phi^2 + \phi(\Phi + 1) + \Phi} \quad (6.15)$$

à partir de laquelle la fraction massique normalisée du combustible $\mathcal{Y}_F = p - \mathcal{Y}_O$ est déduite :

$$\mathcal{Y}_F = \frac{\phi(p - 1) + \Phi(p + \phi)}{\phi^2 + \phi(\Phi + 1) + \Phi} \quad (6.16)$$

L'espace de composition conjointe correspondant $(\mathcal{Y}_F, \mathcal{Y}_O)$ est représenté sur la [Figure 6.7](#). À la stœchiométrie, on a $\mathcal{Y}_O = \phi \mathcal{Y}_F$, comme on peut le déduire de (6.13) avec la condition $\Phi = 1$. Il est également intéressant de noter que, dans la [Figure 6.7](#), les deux axes $\mathcal{Y}_F = 0$ et $\mathcal{Y}_O = 0$ correspondent à des compositions de produits brûlés obtenues dans des mélanges riches ou pauvres, respectivement. De (6.13), il peut être facilement déduit que, pour les mélanges riches, dans les produits brûlés ($c = 1$) où $\mathcal{Y}_O^b = 0$ nous avons $\mathcal{Y}_F^b = (\xi - \xi_{st}) / (1 - \xi_{st})$, alors que pour les mélanges pauvres, où $\mathcal{Y}_F^b = 0$, nous avons $\mathcal{Y}_O^b = 1 - \xi / \xi_{st}$. Enfin, nous pouvons réécrire la fonction $f_p(\mathcal{Y}_F, \mathcal{Y}_O)$ comme $f_p(\mathcal{Y}_F, \mathcal{Y}_O) = \mathcal{Y}_F^{n_F} \mathcal{Y}_O^{n_O}$, ou encore :

$$f_p(p, \Phi) = \left(\frac{\phi(p - 1) + \Phi(p + \phi)}{\phi^2 + \phi(\Phi + 1) + \Phi} \right)^{n_F} \left(\phi \frac{\phi p + \Phi(p - 1) + 1}{\phi^2 + \phi(\Phi + 1) + \Phi} \right)^{n_O} \quad (6.17)$$

Il est à noter qu'à la stœchiométrie, $p = 0$ dans les produits brûlés.

La considération de la valeur maximale de f_p en fonction de la richesse Φ , c'est-à-dire la résolution de $(\partial f_p / \partial \Phi = 0)$ sur suivant une iso-valeur de p , montre que les exposants n_F et n_O sont liés par la relation :

$$\frac{n_F}{n_O} = \phi \frac{\phi p + \Phi(p - 1) + 1}{\phi(p - 1) + \Phi(p + \phi)} \quad (6.18)$$

Une condition nécessaire pour que f_p soit maximale à la stœchiométrie est que $\frac{n_F}{n_O} = \phi$, ce qui soulève une nouvelle difficulté¹. En effet, pour la combustion de carburants standards

1. À noter que $\Phi_{\max} = 1$ est supposé ici juste pour des raisons de simplicité, le même raisonnement s'applique pour toute valeur de Φ_{\max} . Dans ce dernier cas, les expressions seront plus complexes.

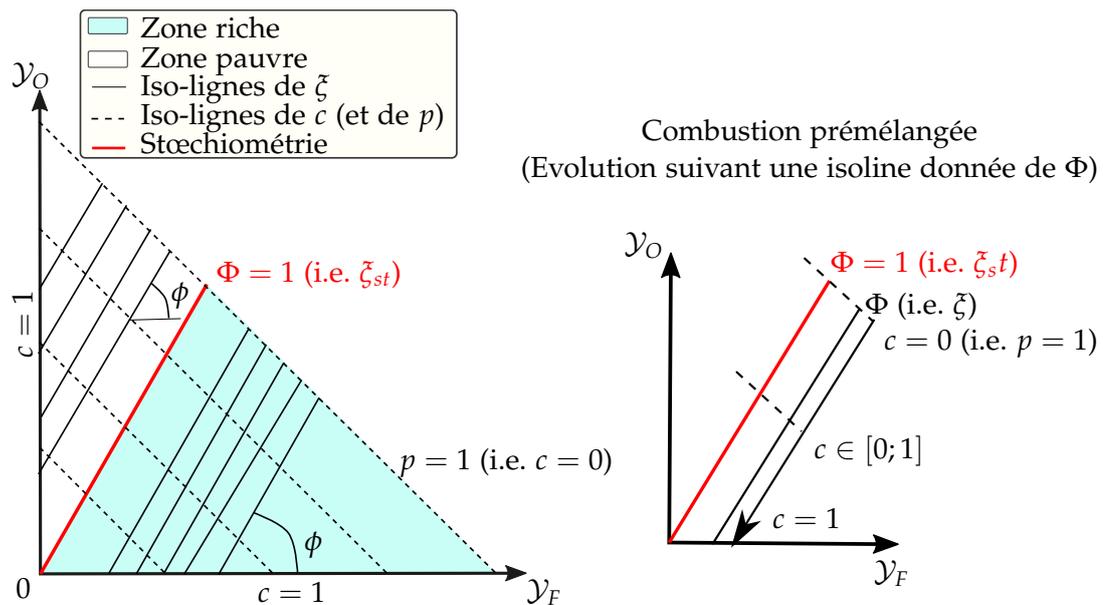


Figure 6.7 – Espace de composition joint des fractions massiques normalisées du combustible et de l’oxydant (Y_F, Y_O). Définition des iso-lignes du facteur de présence p (variable de progrès c) et de la richesse Φ (fraction de mélange ξ). En haut à droite : évolution sur un front de flamme prémélangée.

(hydrogène ou hydrocarbures) avec l’air, la valeur de ϕ peut dépasser quinze. Dans ce cas, les valeurs des exposants peuvent se situer entre 0.0625 et 15.0, de sorte que de très petites valeurs de la fraction massique de combustible, de l’ordre de ε , pouvant être associées au bruit numérique, peuvent conduire à des valeurs non-négligeables de la fonction pré-exponentielle qui, à son tour, peut conduire à des valeurs non négligeables de la vitesse chimique donnée par la loi d’Arrhenius. La prescription de $n_F/n_O = \phi$ est donc loin d’être simple.

Pour certaines études analytiques axées sur la description du dégagement de chaleur seulement, ce problème peut être facilement contourné en travaillant avec des carburants non réalistes satisfaisant la condition $\phi = 1$. Dans ce cas, n_O/n_F est égal à l’unité, et une valeur maximale de f_p sera obtenue pour $\Phi = \Phi_{\max} = 1$. Cependant, même dans de telles situations simplifiées, une deuxième difficulté subsiste. Les expériences montrent que, une fois tracée en fonction de la richesse, la vitesse de la flamme laminaire est presque symétrique au voisinage de sa valeur maximale. Toutefois, son estimation numérique à partir du modèle de chimie en une étape présente une asymétrie significative. Ceci est la conséquence de l’asymétrie de la quantité de combustible brûlé autour de Φ_{\max} : le dégagement de chaleur et la vitesse de propagation de la flamme restent ainsi plus importants du côté riche.

Nous présentons ci-dessous une méthode qui surmontera les deux principales difficultés mentionnées ci-dessus : (i) la vitesse de la flamme en fonction de la richesse doit être maximale pour une valeur donnée de Φ_{\max} et (ii) toute forme de cloche prescrite autour de Φ_{\max} devrait pouvoir être reproduite. La méthode développée est donc axée sur la possibilité de cartographier le modèle chimique OSS sur toute description de référence de la vitesse de propagation de la flamme laminaire en fonction de la richesse Φ .

La procédure mentionnée ci-dessus peut être divisée en deux parties distinctes :

- "remappage" : cette première étape consiste à modifier l’expression du facteur pré-exponentiel

pour que la nouvelle fonction ait une valeur maximale pour Φ_{\max} quelle que soit la valeur ϕ et sans difficulté numérique. Ce facteur pré-exponentiel modifié va fixer le comportement général de la courbe en forme de cloche (BSC : Bell Shaped Curve).

- **"rééchelonnement"** : cette deuxième étape introduit un facteur de correction qui dépend de la richesse Φ et est ajouté à la loi d'Arrhenius pour que le BSC numérique corresponde bien à celui prescrit².

6.3.2.1 Description de l'étape de "remappage"

Comme montré ci-dessus, voir également la Figure 6.8, à condition que la condition maximale $\phi = 1$ conduise à $n_F/n_O = 1$, c'est-à-dire $n_F = n_O = n$ avec n l'exposant commun, de telle manière que :

$$f_p(\mathcal{Y}_F, \mathcal{Y}_O) = \mathcal{Y}_F^n \cdot \mathcal{Y}_O^n \quad (6.19)$$

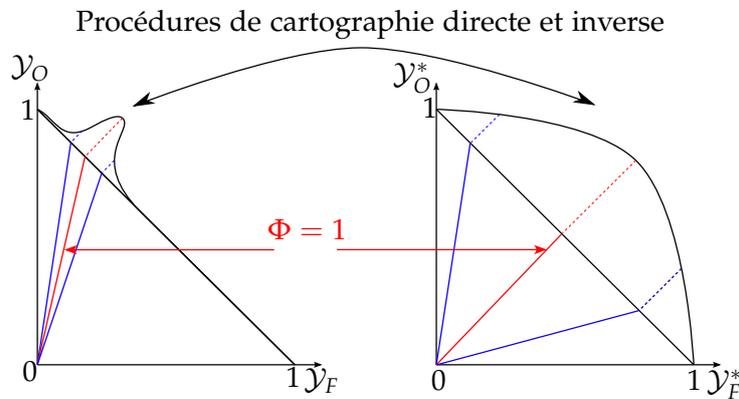


Figure 6.8 – Esquisse des procédures de cartographie (de gauche à droite : $\mathcal{Y}_k \rightarrow \mathcal{Y}_k^*$) et de cartographie inverse (de droite à gauche). Les valeurs du facteur pré-exponentiel $f_p(\mathcal{Y}_F^*, \mathcal{Y}_O^*)$ calculables à droite sont mappées sur les coordonnées $f_p(\mathcal{Y}_F, \mathcal{Y}_O)$ associées à n'importe quelle valeur de ϕ , à gauche. Le paramètre de référence est la pente ϕ de l'iso-ligne stœchiométrique avec la direction horizontale. $\mathcal{Y}_F^*/\mathcal{Y}_O^* = 1$ à droite et $\mathcal{Y}_F^*/\mathcal{Y}_O^* = \phi$ à gauche.

D'un point de vue numérique, une telle fonction pré-exponentielle est stable et facile à évaluer, surtout si la valeur $n = 1$ est conservée. La procédure suivante est appliquée. D'abord, les fractions de masse des espèces \mathcal{Y}_F^* et \mathcal{Y}_O^* cartographiées doivent être définies de manière à ce que la fonction pré-exponentielle résultante f_p^* puisse s'écrire comme suit :

$$f_p^* = \mathcal{Y}_F^* \mathcal{Y}_O^* \quad (6.20)$$

Pour déterminer les règles de transformation qui s'appliquent entre les coordonnées de fraction de masse d'espèces initiales ($\mathcal{Y}_F, \mathcal{Y}_O$) et mappées ($\mathcal{Y}_F^*, \mathcal{Y}_O^*$), un changement préliminaire de coordonnées doit être effectué dans l'espace de fraction de masse (espace de composition). Tout d'abord, nous introduisons le facteur de pente ζ qui définit toute ligne de composition $\mathcal{L}(\mathcal{Y}_F, \mathcal{Y}_O)$ issue de l'origine des coordonnées des fractions massiques des espèces et incluant le couple ($\mathcal{Y}_F, \mathcal{Y}_O$) :

2. La référence BSC correspondante peut correspondre à une expérimentale ou bien issue de calculs chimiques détaillés

$$\frac{\mathcal{Y}_F}{\mathcal{Y}_O} = \frac{\phi}{\zeta} \quad (6.21)$$

Le facteur de pente ζ définit ainsi la valeur de la richesse Φ (ou de la fraction de mélange ζ). Avec une pente de référence définie comme ϕ , la quantité ζ fournit ainsi une mesure de la distance aux conditions stœchiométriques. Il est clair que la procédure de remappage doit conserver cette valeur (c'est-à-dire qu'elle doit conserver la richesse ou la valeur de la fraction de mélange), donc nous avons $\zeta^* = \zeta$ avec $\zeta^* = \mathcal{Y}_F^*/\mathcal{Y}_O^*$. Par conséquent, une première relation existe entre les valeurs mappées $(\mathcal{Y}_F^*, \mathcal{Y}_O^*)$ et les valeurs initiales $(\mathcal{Y}_F, \mathcal{Y}_O)$:

$$\frac{\mathcal{Y}_F^*}{\mathcal{Y}_O^*} = \phi \frac{\mathcal{Y}_F}{\mathcal{Y}_O} \quad (6.22)$$

La définition de l'étape de projection nécessite la définition d'un deuxième paramètre. En effet, si l'eq.(6.22) garantit que la stœchiométrie du mélange, c'est-à-dire la richesse, sera préservée, il est également nécessaire d'imposer la conservation de la variable de progrès ou, en d'autres termes, la valeur du paramètre de présence $p = \mathcal{Y}_F + \mathcal{Y}_O$ doit elle-aussi être préservée la transformation. Ainsi, nous écrivons :

$$\mathcal{Y}_F^* + \mathcal{Y}_O^* = \mathcal{Y}_F + \mathcal{Y}_O \quad (6.23)$$

qui, avec l'eq.(6.22), permet de définir la fraction massique des deux espèces cartographiées $(\mathcal{Y}_F^*, \mathcal{Y}_O^*)$ en fonction de $(\mathcal{Y}_F, \mathcal{Y}_O)$ et ϕ :

$$\mathcal{Y}_F^* = \mathcal{Y}_F \frac{\phi(\mathcal{Y}_F + \mathcal{Y}_O)}{\phi\mathcal{Y}_F + \mathcal{Y}_O} \quad (6.24)$$

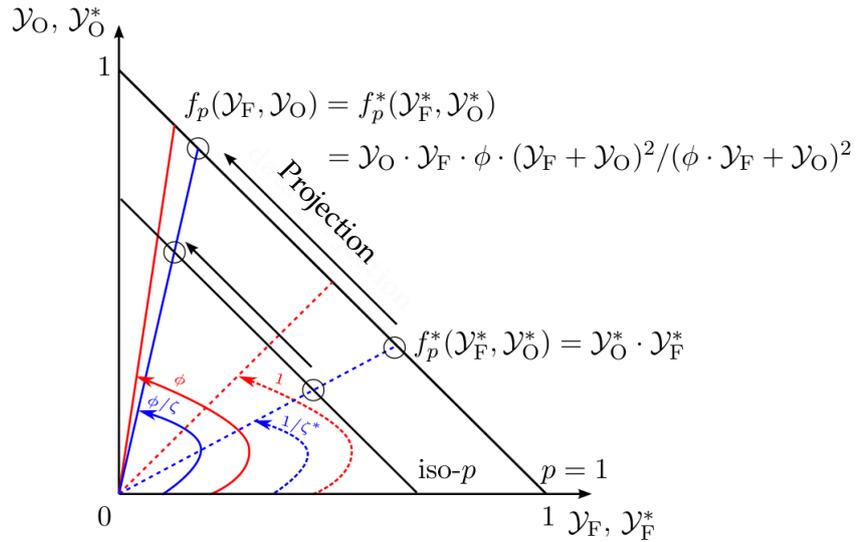
$$\mathcal{Y}_O^* = \mathcal{Y}_O \frac{(\mathcal{Y}_F + \mathcal{Y}_O)}{\phi\mathcal{Y}_F + \mathcal{Y}_O} \quad (6.25)$$

La fonction pré-exponentielle peut ainsi s'écrire :

$$f_p^*(\mathcal{Y}_F^*, \mathcal{Y}_O^*) = \mathcal{Y}_F^* \mathcal{Y}_O^* = \phi \mathcal{Y}_F \mathcal{Y}_O \left(\frac{\mathcal{Y}_F + \mathcal{Y}_O}{\phi\mathcal{Y}_F + \mathcal{Y}_O} \right)^2 \quad (6.26)$$

Comme le montre la [Figure 6.9](#), la procédure générale consiste à projeter les valeurs de la fonction pré-exponentielle, qui est définie pour $\phi = 1$ dans les coordonnées mappées $(\mathcal{Y}_F^*, \mathcal{Y}_O^*)$, sur n'importe quelle fonction ϕ -pré-exponentielle dans les coordonnées $(\mathcal{Y}_F, \mathcal{Y}_O)$. Les difficultés numériques liées aux exposants sont ainsi évitées. Cette procédure permettra d'imposer le comportement général de la courbe de la vitesse de la flamme en fonction de la richesse Φ . Un facteur de correction doit maintenant être ajouté pour reproduire la vitesse de propagation de la flamme laminaire sur les côtés gauche et droit de la BSC.

Figure 6.9 – Esquisse des paramètres de projection pour la procédure de remappage appliquée à une condition riche (en bleu). Les données glissent le long de la ligne iso- p (iso-lignes de la variable de progrès) pour être remappées sur la fonction pré-exponentielle indépendamment de la valeur physique de ϕ . La valeur du facteur de pente ou la distance à la stœchiométrie est maintenue à travers la transformation ($\zeta = \zeta^*$).



6.3.2.2 Description de l'étape de "rééchelonnement"

Si les exposants initiaux ont été choisis tels que $n_F/n_O = \phi$ et $n_F + n_O = 1$, la loi d'Arrhenius peut être écrite comme suit :

$$\dot{\omega} = \mathcal{K}(\Phi) \rho Y_F Y_O \left(\frac{Y_F + Y_O}{\phi Y_F + Y_O} \right)^2 \exp \left(-\frac{E_a}{\mathcal{R}T} \right) \quad (6.27)$$

où $\mathcal{K}(\Phi) = K(\Phi) \cdot (Y_F^\infty)^{n_F} \cdot (Y_O^\infty)^{n_O}$ est le coefficient pré-exponentiel, qui est constant pour une valeur donnée de la richesse. La valeur de ce paramètre est optimisée pour prescrire la BSC à une forme donnée.

La détermination du coefficient pré-exponentiel \mathcal{K} peut être réalisée selon deux procédures distinctes. Si une détermination très précise de la BSC est nécessaire, il est suggéré d'utiliser un code numérique unidimensionnel pour calculer les flammes prémélangées en tenant compte de la chimie et du transport détaillés afin d'obtenir des données de référence. Ensuite, le coefficient \mathcal{K} peut être déterminé en fonction de la BSC prescrit qui nous fournit la vitesse atteinte par la flamme pour toute valeur de la richesse. Une seconde méthode, moins précise mais directe, consiste à déterminer $\mathcal{K}(\Phi)$ comme une fonction générique avec un nombre réduit de paramètres à ajuster. Seule la première solution sera considérée ici. Elle est appliquée au calcul de la combustion de divers hydrocarbures avec de l'air dans des conditions standard. Les résultats correspondants sont reportés sur la Figure 6.10, qui montre que le modèle OSS-2 conduit à une description précise de la vitesse de propagation de la flamme laminaire. Enfin, il convient également de noter que l'évaluation des puissances impliquant le calcul coûteux d'opérations en virgule flottante associées à des exposants non entiers dans (6.10) sont finalement évitées en utilisant (6.27).

6.3.3 Restauration de l'épaisseur thermique de la flamme

L'épaisseur d'une flamme laminaire ainsi que sa vitesse de propagation ont été reconues comme des propriétés intrinsèques essentielles des flammes laminaires prémélangées

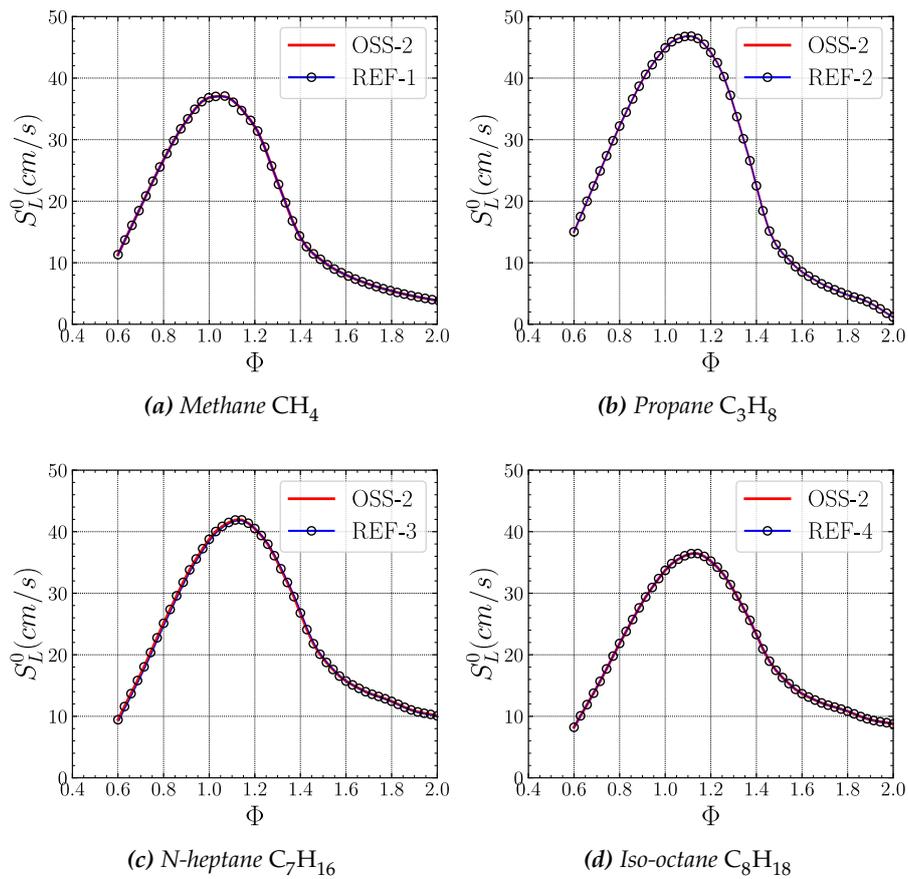


Figure 6.10 – Vitesse de flamme laminaire S_L^0 en fonction de la richesse pour $T_u = 300.0$ K et $P = 1$ atm pour différents hydrocarbures. Symboles : cinétiques chimiques de référence [195, 196, 197, 198], ligne continue : modèles OSS-2 correspondants.

[201, 84]. Son importance est également liée à son utilisation comme échelle pertinente pour l'analyse et l'interprétation de la combustion turbulente prémélangée. Par exemple, [Andrews et al. \[202\]](#) ont examiné diverses propositions de modélisation pour la combustion prémélangée turbulente et ont discuté de l'utilisation de pour la délimitation des régimes de combustion turbulente. [Abraham et al. \[203\]](#) ont utilisé quelques échelles basées sur l'épaisseur de la flamme laminaire pour caractériser la combustion turbulente dans les moteurs à allumage commandé (SI). L'épaisseur de flamme laminaire apparaît en effet comme une quantité clé pour délimiter les régimes de combustion turbulente dans les diagrammes de combustion [159, 47, 46]. De plus, on admet aujourd'hui dans la littérature que les régimes de propagation de flamme prémélangés turbulents restent généralement dans les limites du régime dit des flammelettes [204]. L'épaisseur de flamme laminaire fournit ainsi l'ordre de grandeur des gradients les plus raides présents dans le champ d'écoulement réactif turbulent. Par conséquent, l'épaisseur de la flamme laminaire est également une quantité d'importance primordiale pour les calculs de flamme car elle fixe l'exigence de résolution de calcul.

Il existe plusieurs définitions usuelles de l'épaisseur de la flamme dans la littérature [84, 201, 205, 206]. La plus simple est le rapport d'échelle bien connu $\delta_L^0 = \lambda / (c_p \rho_u S_L^0)$ où λ désigne la conductivité thermique et ρ_u est la masse volumique évaluée dans les réactifs frais. Parmi les autres définitions possibles, l'épaisseur de la flamme peut être estimée à partir de la différence de température entre les produits brûlés et les réactifs frais et de la valeur maximale du gradient de température [149] : qui peut être exprimée par le biais de la variable de progrès :

$$\delta_L^0 = \frac{1}{\max(\|\nabla c\|)} \quad (6.28)$$

L'évolution de l'épaisseur d'une flamme d'iso-octane en fonction de la richesse Φ , obtenue à partir des mécanismes REF-0, OSS-1, OSS-2 et REF-4, est présentée sur la [Figure 6.11](#). Il convient de souligner ici que OSS-1 correspond à l'utilisation de l'espèce virtuelle, de manière à prendre en compte l'oxydation partielle du combustible, en conjonction avec l'eq.(6.11), où les valeurs de \mathcal{K} et E_a sont celles recommandées par [Westbrook et Dryer \[191, 192\]](#). Cette figure montre que, par rapport à la chimie détaillée, le modèle OSS-1 à quatre espèces a tendance à sous-estimer l'épaisseur de la flamme à des richesses élevées. Ce comportement peut non seulement résulter d'une évaluation incorrecte de la vitesse de propagation de la flamme laminaire dans cette gamme spécifique de richesses mais aussi de la représentation des processus diffusifs dont le résultat net sur le profil de température n'est pas reproduit de manière satisfaisante. Il est remarquable qu'en termes d'épaisseur de flamme laminaire il n'y a pas de différences significatives entre les modèles REF-0 et OSS-1 : la restauration de la expansion thermique n'affecte pas significativement l'épaisseur de la flamme laminaire. Sur la même figure sont également reportés les résultats obtenus avec le modèle OSS-2, qui a été optimisé pour récupérer non seulement la température des produits brûlés T_b mais aussi la vitesse de propagation. Comparé aux modèles REF-0 et OSS-1, le modèle OSS-2 présente ainsi une vitesse de propagation de flamme laminaire réduite dans des conditions riches. Il convient de noter que, conformément à l'échelle standard, cette diminution est associée à une légère augmentation de l'épaisseur de la flamme laminaire pour les mélanges riches. Cependant, l'ampleur de cette augmentation est insuffisante pour retrouver la tendance obtenue avec le

schéma chimique détaillé REF-4.

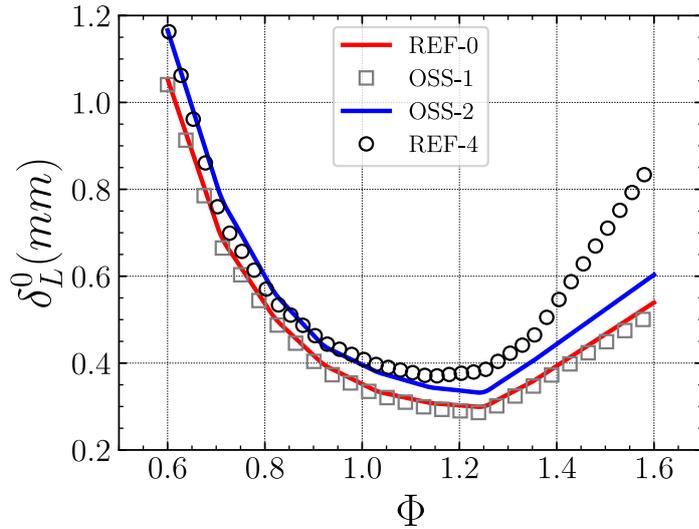


Figure 6.11 – Évolution de l'épaisseur de flamme obtenue à partir de l'équation (6.28) en fonction de la richesse Φ . Combustion d'iso-octane avec de l'air à 5 atm et 700 K.

Dans la présente section, nous décrivons une troisième étape d'optimisation qui permet de reproduire une épaisseur de flamme correcte dans toute la plage de la richesse y compris les mélanges riches dans le cadre de modélisation OSS. On notera ci-après par OSS-3 les résultats obtenus à partir de la procédure d'optimisation triple correspondante (TOP).

Le point de départ de l'analyse est le bilan de température qui peut être déduit du transport d'énergie à travers une flamme laminaire prémélangée unidimensionnelle plane non étirée. Comme l'a souligné [Blint \[206\]](#), la plupart des définitions de l'épaisseur de flamme laminaire sont basées sur la forme suivante de ce bilan :

$$F(x) = \rho_u c_p S_L^0 \frac{dT}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \rho Y_k \mathcal{V}_k c_{p,k} \frac{dT}{dx} + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_k h_k = 0 \quad (6.29)$$

où \mathcal{V}_k désigne la vitesse de diffusion des espèces k dans le mélange et ρ est la masse volumique du mélange, qui est déduite de l'équation d'état.

L'équation (6.29) met en évidence l'influence possible des propriétés de transport moléculaire (λ et \mathcal{V}_k) sur la valeur de l'épaisseur de la flamme. Dans les sections précédentes, les ajustements successifs des coefficients polynomiaux thermodynamiques de l'espèce virtuelle et le taux de réaction ont permis de corriger les valeurs de T_b et S_L^0 respectivement. Il est maintenant proposé d'optimiser les propriétés de diffusion moyennes du mélange : λ et/ou \mathcal{V}_k de manière à obtenir une estimation satisfaisante de l'épaisseur de la flamme laminaire.

D'une part, la vitesse de diffusion de l'espèce chimique, \mathcal{V}_k comprend trois contributions distinctes :

$$\mathcal{V}_k = \mathcal{V}_k^1 + \mathcal{V}_k^2 + \mathcal{V}_k^3 \quad (6.30)$$

où le premier terme \mathcal{V}_k^1 est la vitesse de diffusion évaluée à partir de l'approximation de [Hirschfelder et al. \[207\]](#) :

$$\mathcal{V}_k^1 = -D_k \frac{1}{X_k} \frac{dX_k}{dx} \quad (6.31)$$

avec D_k le coefficient de diffusion moyenné par le mélange exprimé explicitement en termes

de coefficients de diffusion binaires D_{kj} :

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_j^{N_{sp}} X_j / D_{kj}} \quad (6.32)$$

Le deuxième terme de (6.30), \mathcal{V}_k^2 , est une vitesse de diffusion thermique qui est considérée uniquement pour les espèces chimiques présentant une faible masse molaire comme H, H₂ et He. Enfin, la troisième contribution \mathcal{V}_k^3 est une vitesse de correction qui est incluse pour imposer la conservation de masse. La formulation de cette vitesse de correction est celle recommandée par [Coffee et Heimerl \[208, 209\]](#) dans leur étude approfondie des modèles de transport pour les flammes hydrogène-air et méthane-air.

D'autre part, la conductivité thermique du mélange multi-espèce est actuellement évaluée à partir de formules moyennées qui impliquent les conductivités thermiques λ_k de chaque espèce, comme recommandé par [Mathur et al. \[14\]](#),

$$\lambda(\mathbf{Y}, T) = \frac{1}{2} (\Lambda_{\parallel} + \Lambda_{\perp}) \quad \text{avec : } \Lambda_{\parallel} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k \lambda_k \quad \text{et : } \Lambda_{\perp} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k \lambda_k^{-1} \quad (6.33)$$

De la considération des Eqs. (6.31) et (6.32), on peut conclure qu'agir sur les vitesses de diffusion moléculaire et les coefficients de diffusion associés D_k nécessite la manipulation de tous les coefficients de diffusion binaires D_{kj} , conduisant ainsi à un système plutôt important à optimiser. Le système correspondant comporte en effet de nombreux degrés de liberté (D_{ij} avec $i, j \in \{F = C_n H_m, O_2, N_2, A_{\Phi}\}$ et $i \neq j$) et cela peut conduire à des difficultés non négligeables compte tenu des fortes non-linéarités des formules utilisées pour évaluer ces différentes quantités [207]. Une approche plus simple (comportant un nombre réduit de degrés de liberté dans le problème à optimiser) peut être introduite en utilisant (6.33) et en considérant seulement les modifications de la conductivité thermique de l'espèce virtuelle.

En partant de la solution $T^s(x)$ de l'équation (6.29) obtenue en utilisant le mécanisme détaillé de référence (REF-4) pour décrire la combustion de l'iso-octane et pour un ensemble donné de conditions initiales (Φ, T_u, p) , un profil de la variable de progrès $c(x)$ peut être déterminé. A partir du profil correspondant, les profils des fractions massiques des quatre espèces $Y_k(x)$ peuvent être initialisés comme :

$$Y_k(\chi) = (1 - c(\chi)) \cdot Y_k^u(\Phi) + Y_k^b(\Phi, T_u, p) \quad (6.34)$$

où k représente le combustible F , le comburant O , l'azote N_2 et l'espèce fictive A_{Φ} .

Ensuite, nous exprimons la fonction de coût (CF) suivante, à minimiser :

$$CF = \|\mathbf{F}(\boldsymbol{\lambda}, \mathbf{K})\| = \left\| \rho_u c_p S_L^0 \frac{dT^s}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\boldsymbol{\lambda} \frac{dT^s}{dx} \right) + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \rho Y_k \mathcal{V}_k c_{p,k} \frac{dT^s}{dx} + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_k^{\text{OSS}} h_k \right\| \quad (6.35)$$

avec les taux de production (ou de consommation) molaires exprimés en fonction du résultat

de la section 6.3.2 :

$$\dot{\omega}_k^{\text{oss}} = v_k \dot{\omega}^{\text{oss}} = v_k \mathbf{K} \phi \left(\frac{Y_F + Y_O}{\phi Y_F + Y_O} \right)^2 Y_F Y_O \exp \left(-\frac{E_a}{\mathcal{R}T} \right) \quad (6.36)$$

Dans les équations ci-dessus, les quantités en rouge désignent les paramètres à optimiser. Il convient de noter qu'il s'agit d'un vecteur contenant les valeurs de conductivité thermique obtenues à chaque nœud de calcul, alors que le facteur pré-exponentiel K est une quantité scalaire.

Enfin, les valeurs de la conductivité thermique et du facteur pré-exponentiel sont recherchées comme solutions du problème de contrôle optimal (contraint) suivant :

$$\begin{cases} \min_{(\mathbf{K}, \lambda)} \text{CF}(\lambda, \mathbf{K}) = 0 \\ \lambda(T) > 0 ; \quad d\lambda/dT \geq 0 \quad (\forall T \in [T_u, T_b]) & \text{(I)} \\ \rho_u S_L^0 Y_k = \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_k^{\text{oss}} dx \quad (\text{pour } k = A_\Phi) & \text{(II)} \\ \text{avec } \dot{\omega}_k^{\text{oss}} = v_k \mathbf{K} \phi \left(\frac{Y_F + Y_O}{\phi Y_F + Y_O} \right)^2 Y_F Y_O \exp \left(-\frac{E_a}{\mathcal{R}T} \right) \end{cases} \quad (6.37)$$

La contrainte (I) impose que λ soit une fonction croissante monotone de la température et (II) est une contrainte intégrale résultant de l'intégration de l'équation de transport de l'espèce virtuelle de $-\infty$ à $+\infty$. Cette seconde contrainte implique la valeur de référence de S_L^0 , c'est-à-dire celle obtenue à partir du schéma chimique détaillé (REF-4). Le problème ci-dessus (l'équation (6.37)), est résolu en appliquant la méthode de programmation séquentielle des moindres carrés (SLSQP) [210].

Puisque le vecteur de conductivité du mélange λ , obtenu en tant que solution de (6.37), est lié aux conductivités thermiques des espèces et aux fractions molaires par (6.33), il devient possible de récupérer λ_{A_Φ} à partir de la valeur de λ obtenue à chaque point du domaine de calcul. Lorsque X_{A_Φ} est zéro, par exemple, du côté des réactifs frais, la valeur de λ_{A_Φ} est supposée égale à celle évaluée au point de calcul le plus proche où $X_{A_\Phi} \neq 0$.

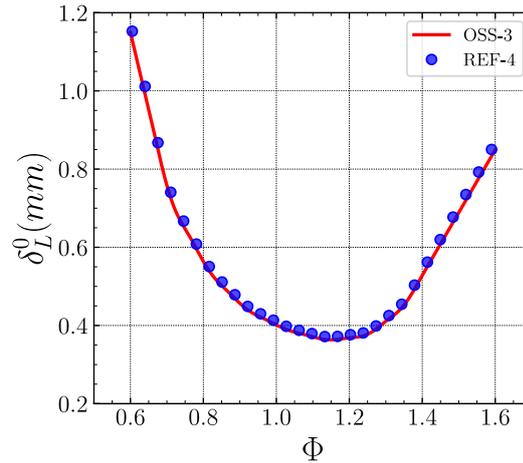
En outre, il est maintenant possible d'exprimer la conductivité thermique de l'espèce virtuelle en fonction des valeurs de la température obtenues dans le domaine de calcul. A partir de cette expression, la représentation polynomiale de λ_{A_Φ} en fonction de la température peut être obtenue sous une forme qui peut être gérée par les bibliothèques de transport Cantera (ou Chemkin) :

$$\log(\lambda_{A_\Phi}) = \sum_{n=0}^3 b_{n,A_\Phi} \log(T)^n \quad (6.38)$$

Les coefficients sont ensuite tabulés en fonction de (Φ, T_u, P) . La Figure 6.12 fournit un exemple de l'application de la méthode. Le modèle optimisé en une étape optimisé (OSS-3) permet désormais de retrouver avec précision l'épaisseur de la flamme quelle que soit la valeur de la richesse.

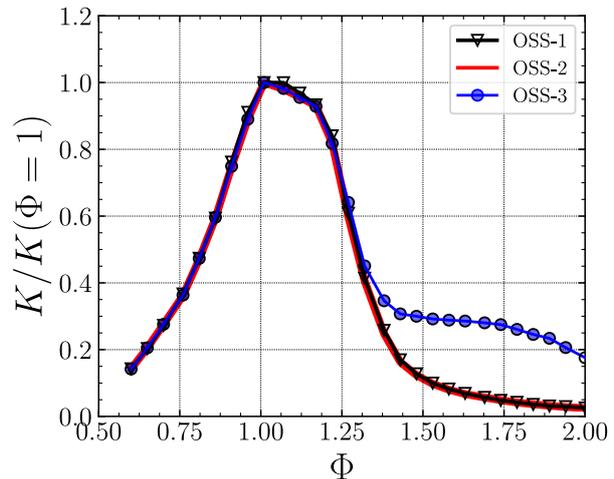
Comme souligné dans la définition du problème de contrôle optimal donné par (6.37), l'optimisation de l'épaisseur de la flamme peut également influencer la valeur du facteur pré-exponentiel K initialement retenue pour reproduire une estimation satisfaisante de la vitesse de propagation laminaire S_L^0 dans le cadre de OSS-2. Ceci est illustré sur la Figure 6.13, qui

Figure 6.12 – Estimation de l'épaisseur de la flamme laminaire dans les mêmes conditions que celles considérées dans la Figure 6.11. Comparaison entre la chimie détaillée et le modèle OSS-3.



confirme que les valeurs $K(\Phi)$ du modèle OSS-2 sont en effet significativement modifiées dans des conditions riches afin de récupérer à la fois la vitesse et l'épaisseur de propagation de la flamme laminaire avec le modèle OSS-3.

Figure 6.13 – Comparaison entre les valeurs du facteur pré-exponentiel $K(\Phi)$ retenues pour les modèles OSS-2 et OSS-3.



Enfin, avec les trois procédures combinées, le modèle permet d'obtenir une estimation pertinente de l'expansion thermique, de la vitesse de flamme laminaire et de l'épaisseur de flamme pour un coût modéré : quatre équations de transport, un seul taux de réaction et une tabulation de dix-neuf coefficients en fonction de Φ , T_u et p .

6.4 Analyse préliminaire du modèle OSS résultant

La description globale qui résulte des trois étapes d'optimisation décrites ci-dessus est dénommée ci-après OSS et la présente section vise à procéder à une étude préalable de sa réponse. Dans une première étape de cette analyse, des comparaisons supplémentaires ont été effectuées avec des résultats obtenus en utilisant des modèles de chimie standard en une seule étape. Les modèles correspondants sont ceux introduits dans les premières études de Westbrook et Dryer [191, 192]. Ce choix peut sembler plutôt arbitraire mais il est seulement guidé par le fait que ces représentations restent encore largement utilisées dans la communauté de

la combustion. Le premier ensemble de calculs concerne la combustion de mélanges d'iso-octane et d'air. Ils sont basés sur (i) le schéma chimique REF-5, (ii) la chimie de [Westbrook et Dryer](#) de l'iso-octane comme décrit dans le tableau 1 de la réf. [191], voir aussi le tableau 2 de la réf. [192], noté WD, et enfin (iii) la chimie OSS, telle que décrite dans le présent manuscrit. Le schéma cinétique retenu comme référence, noté REF-5 correspond au mécanisme de [Hasse et al.](#) [139], qui a été entièrement validé avec des données expérimentales. Par exemple, les résultats obtenus avec le mécanisme correspondant se comparent bien avec la corrélation des données expérimentales fournies par [Marshall et al.](#) [141]. Concernant le modèle OSS à quatre espèces, les caractéristiques de l'espèce virtuelle sont générées en utilisant la procédure décrite dans les sous-sections précédentes avec le mécanisme de [Hasse et al.](#) [139] utilisé comme référence. L'évolution de la vitesse de la flamme laminaire en fonction de la richesse est calculée pour $T_u = 300.0$ K et $p = 1$ atm avec les trois mécanismes (REF-5, WD et OSS). Les résultats obtenus, qui sont reportés sur la [Figure 6.14](#), confirment la pertinence du modèle OSS par rapport à celui présenté dans les références [191, 192].

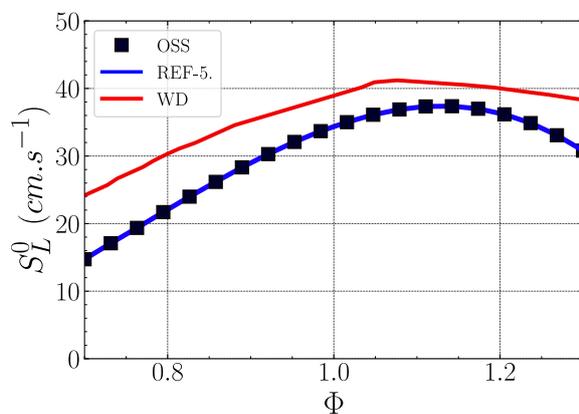


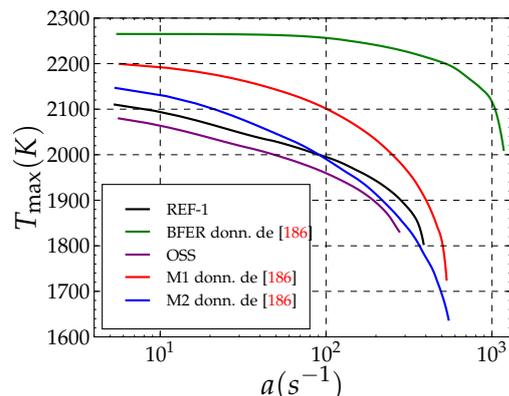
Figure 6.14 – Vitesse de flamme laminaire des mélanges d'iso-octane et d'air en fonction de la richesse pour $T_u = 300.0$ K et $P = 1$ atm.

Bien qu'il ait été explicitement indiqué que le modèle OSS vise à décrire la combustion prémélangée, il semble utile d'avoir un aperçu de sa réponse si un régime de diffusion est rencontré. A cet égard, il convient également de noter que, suite aux premières analyses de [Liñan](#) [211], on sait que la réponse chimique d'une flamme de diffusion à la limite d'extinction est similaire à celle d'une flamme prémélangée à la stœchiométrie. Par conséquent, dans une seconde étape de l'analyse, des calculs de flamme à diffusion étirée ont été effectués en augmentant le taux d'étirement jusqu'à une valeur à laquelle la flamme est proche de l'extinction. Pour comparer avec les données disponibles de la littérature, les flammes de diffusion méthane-air avec des réactifs frais à 300 K et 1 atm sont considérées. Ces conditions sont les mêmes que celles récemment calculées par [Cailler et al.](#) [186]. La chimie détaillée de référence correspond au schéma GRI3.0, référencé REF-1 ici. Les données issues de la réf. [186] incluent des résultats obtenus avec le modèle BFER de [Franzelli et al.](#) [185], les modèles M1 et M2 de [Cailler et al.](#) [186], et le schéma détaillé GRI3.0. En ce qui concerne le modèle OSS à quatre espèces, les caractéristiques de l'espèce virtuelle sont maintenant générées pour différentes richesses Φ , et sont ensuite compilées. Le mécanisme GRI3.0 est retenu comme référence.

L'évolution de la température maximale normalisée obtenue à travers la flamme de diffusion est montrée sur la [Figure 6.15](#). Ces résultats montrent que, pour les valeurs du taux

d'étirement les plus faibles, le modèle BFER à deux étapes de Franzelli *et al.* [185] et le récent modèle M1 à une seule étape de Cailler *et al.* [186] ont tendance à surestimer la température maximale, alors que seule une légère surestimation est observée avec le modèle M2. Enfin, un léger écart par rapport à la chimie de référence GRI3.0 est également obtenu avec le modèle OSS actuel, ce qui ne conduit qu'à une légère sous-estimation de la température maximale. En plus de cela, la réponse à la flamme obtenue avec une chimie détaillée, c'est-à-dire la forme de l'évolution de la température avec le taux d'étirement, est très bien reproduite avec le modèle OSS. Enfin, au voisinage de l'extinction, les écarts par rapport aux résultats de référence GRI3.0 sont minimisés - en termes de taux d'étirement et de valeurs de température maximale - avec la chimie OSS.

Figure 6.15 – Flamme laminaire de diffusion étirée de méthane-air. Évolution de la température maximale (en K) en fonction du taux d'étirement (en 1/s).



Dans une dernière étape de cette analyse préliminaire, l'évolution de la vitesse de la flamme laminaire est étudiée en présence des effets de dilution variable. L'algorithme proposé est en effet général dans ses principes et il peut s'appliquer à des mélanges réactifs plus complexes que ceux discutés dans les sous-sections précédentes. Par exemple, l'influence de la présence des produits de combustion comme le CO dans les réactifs frais peut être prise en compte. Dans sa forme actuelle, l'espèce fictive incorpore l'influence de toutes les espèces chimiques présentes dans les produits de combustion sauf l'azote. Cependant, ceci ne limite pas l'application du modèle à des mélanges réactifs contenant des produits de combustion tels que le CO et le CO₂ (ou toute autre espèce) dans les réactifs frais. Ceci est actuellement illustré avec deux ensembles distincts de mélanges réactifs. Le premier correspond à des carburants contenant des proportions égales de H₂ et de CO qui ont été précédemment considérées par Natarajan *et al.* [212]. La richesse varie entre 0.6 et l'unité et ces mélanges sont considérés pour une dilution du carburant par CO₂ de 0 et 20%. Pour chaque mélange, les caractéristiques de l'espèce virtuelle du modèle OSS à quatre espèces sont générées en utilisant la procédure décrite dans les sections précédentes avec le mécanisme GRI3.0 utilisé comme référence (REF-1). L'évolution correspondante des vitesses de flamme laminaires dans des conditions standard (c'est-à-dire 300 K et 1 atm) est indiquée sur la Figure 6.16. Les résultats obtenus confirment la capacité de la méthode proposée à gérer l'influence de la dilution avec des produits de combustion.

Enfin, l'influence de la dilution de l'oxydant est étudiée en faisant varier le rapport de l'oxygène à l'azote. A cet effet, un mélange stœchiométrique de H₂ et CO est considéré avec une dilution croissante de l'azote, c'est-à-dire une augmentation de la fraction molaire de

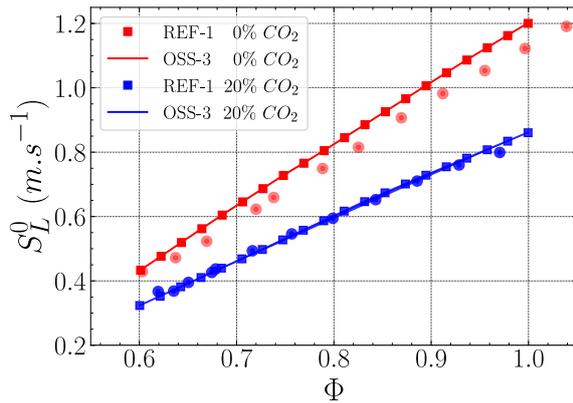


Figure 6.16 – Vitesse de flamme laminaire pour les combustibles avec des proportions égales de H_2 et CO dans des conditions standard à $T_u = 300$ K et $P = 1$ atm. Deux niveaux de dilution de CO_2 sont considérés : 0 et 20%. Les cercles correspondent aux mesures de la flamme de Bunsen de *Natarajan et al.* [212].

l'azote dans l'oxydant, qui correspond à l'oxygène pur (oxy-combustion). Les résultats correspondants sont rassemblés sur la [Figure 6.17](#) et confirment que le modèle OSS conduit à une description satisfaisante des effets de dilution de l'oxydant.

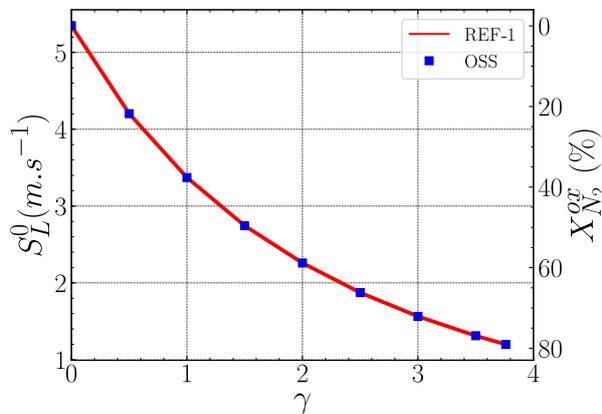


Figure 6.17 – Vitesses de flamme laminaires d'un mélange (50 :50) de H_2 : CO (carburant) mélangées en proportion stœchiométrique avec un mélange de $(1/(1 + \gamma) : \gamma/(1 + \gamma))$ de O_2 et N_2 (oxydant).

6.5 Applications du modèle OSS

Cette troisième section vise à illustrer la réponse du modèle OSS lorsqu'elle est appliquée à des écoulements plus réalistes. Il convient de souligner que l'objectif de la présente section d'application n'est pas de calculer un cas d'essai compliqué où les erreurs peuvent compenser : il s'agit d'évaluer la méthode dans des conditions turbulentes mais bien définies évitant l'influence possible des modèles de combustion turbulente. Les simulations numériques directes (DNS) apparaissent donc comme le choix le plus pertinent. A cet effet, le développement de noyaux de flamme est considéré dans des conditions aussi bien laminares que turbulentes, avec des effets de courbure et d'étirement. Les calculs sont effectués avec le code de simulation numérique directe (DNS) *Asphodele*.

Le carburant retenu aux fins de cette analyse est l'un des carburants de référence primaires (PRF) : l'iso-octane C_8H_{18} . Sa chimie est décrite sur la base du mécanisme développé par *Hasse et al.* [139], qui a été validée par rapport à des données expérimentales sur une large gamme de conditions de fonctionnement en termes de variations de température, de pression et de richesse. La principale raison de retenir C_8H_{18} c'est qu'il est reconnu comme n'étant pas

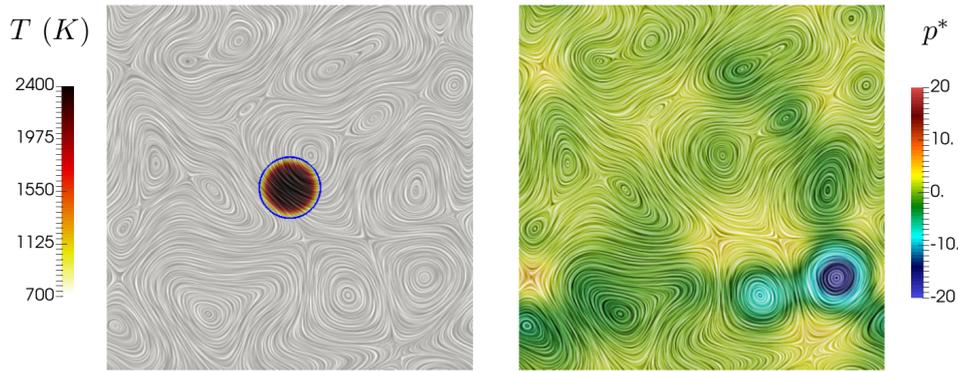


Figure 6.18 – Conditions initiales retenues pour effectuer les simulations turbulentes de la section 6.5
Gauche : champ de température du noyau de flamme superposé aux lignes de courant. Droite : champ de pression dynamique adimensionné.

impliqué dans les processus d’auto-inflammation. Ce choix est donc tout à fait conforme aux objectifs de la présente étude, qui est axée sur la restauration des caractéristiques fondamentales des flammes prémélangées en propagation. Ainsi, les phénomènes d’auto-inflammation sont écartés de la présente étude et un noyau de flamme C_8H_{18} -air est initialisé au centre du domaine de calcul. Les fractions massiques des espèces et les profils de température associés au noyau de flamme initial sont déduits du calcul préliminaire d’une flamme monodimensionnelle prémélangée laminaire non étirée laminaire réalisé avec Cantera. Le domaine est discrétisé avec 256 points dans chaque direction et sa dimension caractéristique est $L = L_x = L_y = 4$ mm.

Les conditions laminaires correspondent à des noyaux de flamme se développant dans des mélanges homogènes au repos, c’est-à-dire que les valeurs initiales des composantes u_i du champ de vitesse sont nulles. Dans les cas turbulents, le développement du noyau est étudié en présence d’une turbulence homogène isotrope (THI). Le champ initial de vitesse fluctuante est généré sur la base de la procédure classique de Rogallo [135] selon un spectre de Passot et Pouquet [136]. Un instantané typique du champ d’écoulement correspondant est reporté sur la Figure 6.18.

Sept simulations du développement du noyau de flamme sont effectuées dans diverses conditions. Les deux premières simulations sont conduites dans des conditions totalement prémélangées et laminares tandis que les deux simulations suivantes sont réalisées dans des conditions turbulentes. Ensuite, un ensemble supplémentaire de deux simulations est effectué en présence d’hétérogénéités de richesse. Pour l’ensemble de ces six simulations, la chimie est soit décrite avec la chimie de Hasse *et al.* [139] ou avec son homologue OSS. Les simulations sont effectuées sur le même temps physique qui correspond à $4 \tau_L^0$ avec $\tau_L^0 = \delta_L^0 / S_L^0$ le temps de transit à travers la flamme prémélangée laminaire unidimensionnelle de référence. Enfin, le dernier (ie, septième) calcul correspond à un cas tridimensionnel présentant des conditions turbulentes et des hétérogénéités de richesse, il est conduit avec le modèle OSS et illustre le potentiel de la méthode.

6.5.1 Développement de noyaux de flamme prémélangés laminaires

La pression est fixée à 5 bars et la température initiale à 700 K. La valeur de la richesse dans les réactifs frais est unitaire ($\Phi = 1$). Pour ces conditions, la valeur de la vitesse de la flamme prémélangée laminaire est $S_L^0 = 1.22 \text{ m.s}^{-1}$ et l'épaisseur de la flamme laminaire est légèrement inférieure à $100 \mu\text{m}$. Les évolutions temporelles du noyau de flamme sont illustrées sur la [Figure 6.19](#), qui représente les champs binarisés de la variable de progrès $c = (T - T_u) / (T_b - T_u)$ avec la valeur $c = 0.5$ retenue pour conduire le processus de binarisation. De telles images binarisées sont généralement utilisées pour suivre le développement du noyau de flamme et présentent des similitudes importantes avec les images issues de la tomographie laser [213], qui permet de visualiser une coupe plane à travers une flamme prémélangée, permettant de localiser la position instantanée de la flamme dans le plan Laser. Quatre images binarisées instantanées sont considérées, qui correspondent à τ_L^0 , $2\tau_L^0$, $3\tau_L^0$ et $4\tau_L^0$. L'accord obtenu entre les résultats issus de la chimie de référence et du modèle OSS est satisfaisant et cette figure suggère que le noyau de flamme courbé se propage à la même vitesse dans les deux cas.

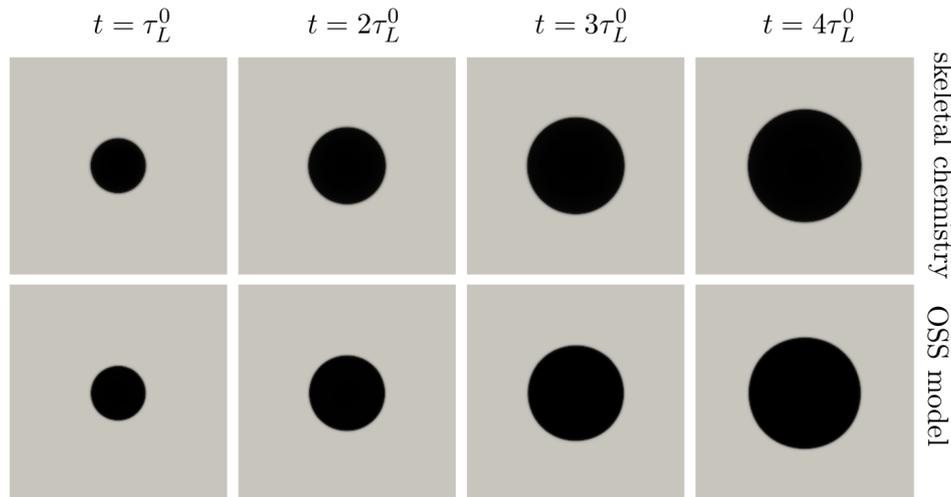
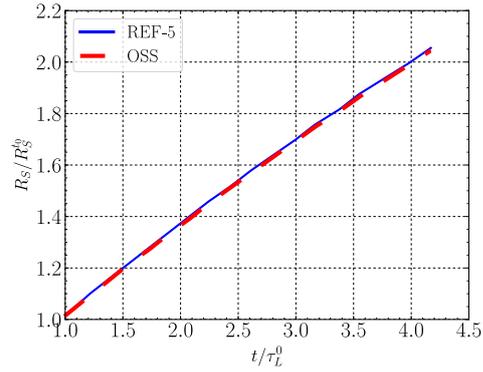


Figure 6.19 – Évolution des champs de la variable de progrès binarisés à quatre instants successifs 1, 2, 3 et $4 \tau_L^0$. En haut : mécanisme de référence. En bas : modèle OSS.

La [Figure 6.20](#) confirme cette conclusion par une inspection plus quantitative de ces résultats. En effet, la propagation de la flamme peut être caractérisée par l'évolution de son rayon évalué à partir de la surface occupée par les gaz brûlés. Cette dernière permet d'estimer le rayon de flamme R_S dans des cas laminaires ou un rayon de flamme équivalent correspondant à une flamme sphérique (circulaire en deux dimensions) présentant la même quantité de gaz brûlés dans des cas turbulents. La [Figure 6.20](#) montre l'évolution temporelle de ce rayon adimensionnel (normalisé par sa valeur à τ_L^0). Cette figure confirme que le niveau d'accord obtenu entre la chimie de référence et le modèle OSS est excellent. Cela confirme sans aucun doute la capacité du modèle OSS développé à fournir une estimation pertinente de la vitesse de flamme laminaire, même en présence des effets de courbure.

Enfin, la capacité du modèle à reproduire l'épaisseur de la flamme laminaire est évaluée sur la [Figure 6.21](#), qui présente des images de Schlieren numériques obtenues à quatre instants

Figure 6.20 – Évolution temporelle du rayon de flamme R_S normalisé par sa valeur à $t_0 = \tau_L^0$.



successifs 1, 2, 3 et 4 τ_L^0 . Ces images sont basées sur un gradient de la masse volumique représenté sur une échelle non linéaire afin de mettre en évidence l'épaisseur de la flamme. Le Schlieren numérique correspondant a été évalué à partir de :

$$S_\rho = \exp \left(-5 \sqrt{\left(\frac{\partial \rho}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_2} \right)^2} \max \left(\sqrt{\left(\frac{\partial \rho}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_2} \right)^2} \right)^{-1} \right) \quad (6.39)$$

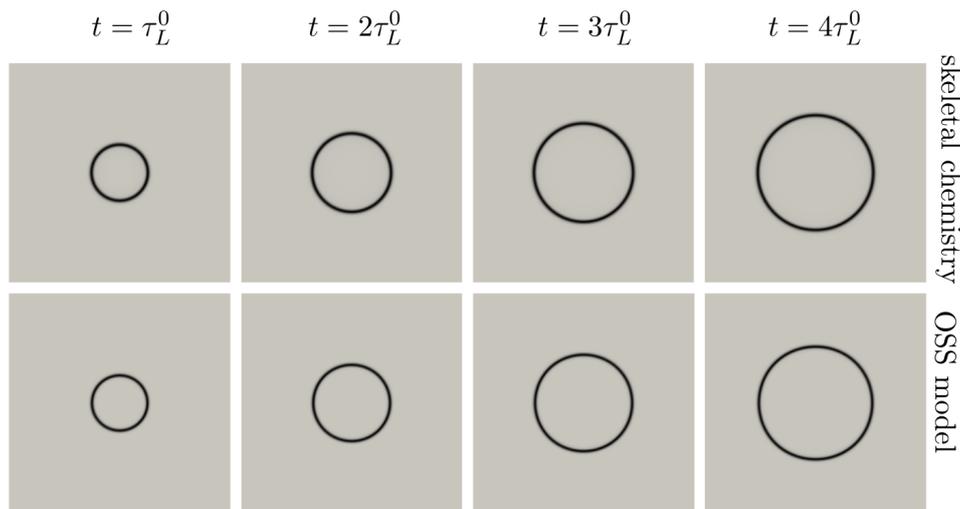


Figure 6.21 – Évolution du Schlieren numérique basé sur la masse volumique à quatre instants successifs 1, 2, 3 et 4 τ_L^0 . En haut : mécanisme de référence. En bas : modèle OSS.

La [Figure 6.21](#) confirme qu', en termes d'épaisseur caractéristique, les résultats du modèle OSS ne présentent que de légères différences avec le schéma de référence (REF-5).

6.5.2 Développement de noyaux de flamme prémélangés turbulents

Les conditions de pression et de température sont les mêmes que celles considérées dans la sous-section précédente (c.-à-d. $p = 5$ bar et $T_u = 700$ K). La stœchiométrie du mélange n'est pas modifiée ($\Phi = 1$). Les cas turbulents sont maintenant examinés pour évaluer la capacité du modèle OSS à prédire la réponse de la flamme en présence de plissements turbulents. L'échelle de longueur intégrale est fixée à $l_T = 0.5$ mm (approximativement $L/8$)

et la moyenne quadratique initiale (RMS) des fluctuations de vitesse est fixée à $u_{RMS} = 1.2 \text{ ms}^{-1}$ conduisant à une valeur de cinquante pour le nombre de Reynolds turbulent Re_T . Des analyses similaires à celles reportées pour les cas laminaires dans la sous-section précédente seront appliquées au cas turbulent. Une vue d'ensemble de la réponse du modèle est d'abord fournie à la Figure 6.22, qui rassemble quatre images instantanées des champs binarisés de la variable de progrès. Il est tout à fait remarquable que, même en présence d'étirement et de courbures induites par l'écoulement turbulent, la topologie de la flamme est très bien reproduite par le modèle OSS. De plus, comme on l'a vu précédemment dans les cas laminaires, la croissance globale de la surface de la flamme, caractérisée par le rayon équivalente de flamme R_S , est également très bien restitué par le modèle OSS, voir Figure 6.23.

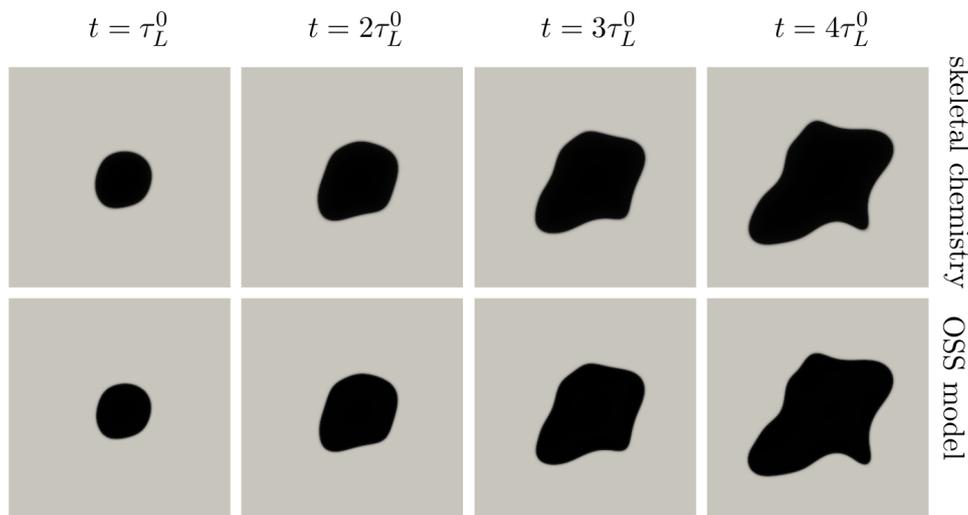


Figure 6.22 – Évolution des champs de la variable de progrès binarisés à quatre instants successifs 1, 2, 3 et 4 τ_L^0 . En haut : mécanisme de référence. En bas : modèle OSS.

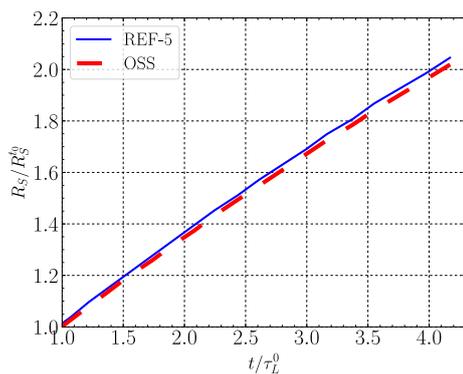


Figure 6.23 – Évolution temporelle du rayon de flamme R_S normalisé par sa valeur à $t_0 = \tau_L^0$.

Un autre point important concerne la capacité de la chimie mono-étape optimisée à reproduire correctement la structure de la flamme locale. A partir des images numériques de Schlieren reportées sur la Figure 6.24, on peut remarquer que l'épaisseur des flammes obtenue en utilisant soit la chimie de référence (REF-5) soit le modèle OSS sont très similaires. A ce niveau, il faut noter que, dans les conditions présentes, on observe quelques (très) légers effets d'épaississement, qui ne dépassent pas dix pour cent de la valeur d'épaisseur de flamme de référence.

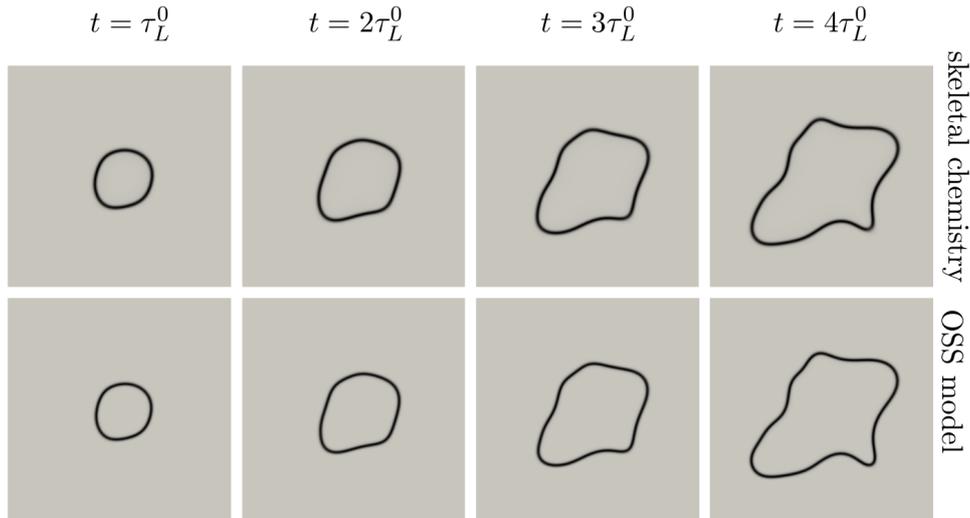


Figure 6.24 – Évolution du Schlieren numérique basé sur la masse volumique à quatre instants successifs 1, 2, 3 et 4 τ_L^0 . En haut : mécanisme de référence. En bas : modèle OSS.

La performance de la chimie OSS est évaluée plus en détail sur la [Figure 6.25](#) qui représente des diagrammes de dispersion de la vitesse de déplacement normalisée obtenue aux quatre temps successifs soit avec la description de référence (REF-5) ou le modèle OSS correspondant. À partir de cette figure, il est tout à fait clair que l’amplitude des variations de S_d est bien restituée par le modèle chimique optimisé à une seule étape.

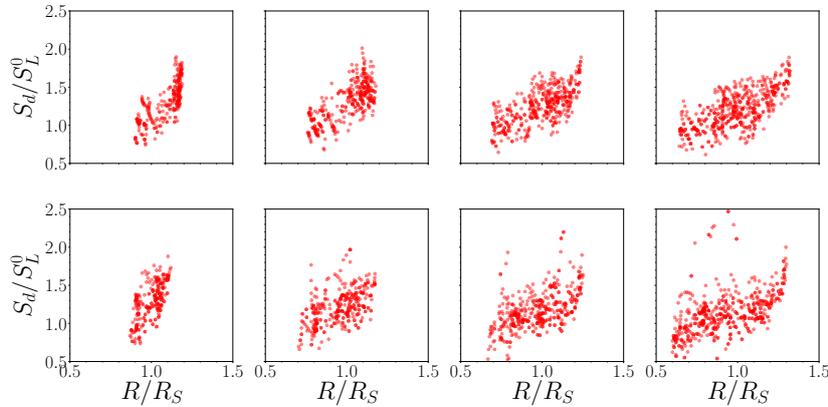


Figure 6.25 – Diagrammes de dispersion de la vitesse de déplacement normalisée S_d/S_L^0 en fonction du rayon équivalent normalisé à quatre instants successifs 1, 2, 3 et 4 τ_L^0 (de gauche à droite). En haut : mécanisme de référence (REF-5). En bas : modèle OSS.

Dans le régime des flamelettes de la combustion prémélangée turbulente, il est possible d’exprimer la PDF de la variable de progrès sous la forme suivante :

$$P(c, x) = \alpha_c \delta(c) + \beta_c \delta(1 - c) + \gamma_c f(c) \quad (6.40)$$

avec $\alpha_c + \beta_c + \gamma_c = 1$. La fonction $f(c)$ représente la PDF conditionnée dans la structure interne des flamelettes, c’est-à-dire $0 < c < 1$. Dans la limite des flammes fines, l’attention se porte généralement sur la détermination des poids statistiques des réactifs frais (α_c) et des

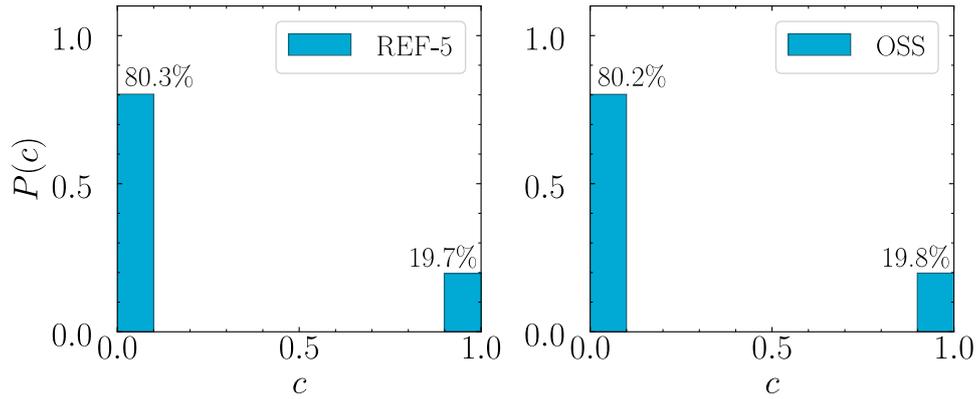


Figure 6.26 – Approximation bimodale de la PDF de la variable de progrès. Gauche : mécanisme de référence (REF-5). Droite : modèle OSS.

gaz brûlés (β_c), qui sont à la base de plusieurs propositions de modélisation, voir par exemple Bray [214], Cant et Mastorakos [215] ou Lipatnikov [216, 217].

La Figure 6.26 montre des PDF bimodales qui peuvent être déduits de la même procédure de binarisation que celle appliquée pour obtenir les figures 6.19 et 6.22, avec les valeurs de α_c et β_c évaluées à partir des expressions suivantes :

$$\alpha_c = \int_0^{0.5} P(c)dc = F(0.5) \quad (6.41)$$

$$\beta_c = \int_{0.5}^1 P(c)dc = 1 - \alpha_c \quad (6.42)$$

où $F(c)$ désigne la fonction de distribution cumulative de la variable de progrès. Cette figure confirme sans ambiguïté que le modèle OSS reproduit de façon satisfaisante l’intermittence entre les réactifs frais et les produits de combustion brûlés.

En fait, la considération de la cinétique détaillée à plusieurs étapes conduit pratiquement à une évolution lente de la variable de progrès basée sur la température du côté du gaz brûlé, c’est-à-dire de $c = 0.85$ à $c = 1.0$, qui n’est pas restituée en utilisant un modèle chimique à une seule étape. En effet, une fois tracée par rapport à la variable de progrès c , la structure interne de la flamme, c’est-à-dire la norme du gradient de la variable de progrès $\|\nabla c\|$, évolue lentement avec c , voir par exemple Kha *et al.* [218]. En conséquence, et comme la PDF interne est inversement proportionnelle à la norme du gradient de la variable de progrès à travers la structure de la flamme, on s’attend à ce que, en comparaison aux facteurs d’intermittence discutés ci-dessus, la PDF interne de la flamme soit capturée de manière moins satisfaisante par le modèle OSS. Ceci est en effet confirmé par la Figure 6.27, qui rapporte les statistiques obtenues pour les PDF internes. Cette figure montre en effet que les statistiques obtenues avec le modèle OSS présentent des écarts non négligeables par rapport aux résultats de référence, à savoir ceux associés à l’utilisation de la chimie de référence (REF-5), notamment du côté des gaz brûlés ($c \geq 0.85$). Les PDF internes sont en effet sous-estimées avec la chimie en une seule étape. Il s’agit clairement d’une limite du modèle à une seule étape basé sur une loi

d'Arrhenius standard qui tend à surestimer la norme du gradient variable de progrès du côté des gaz brûlés.

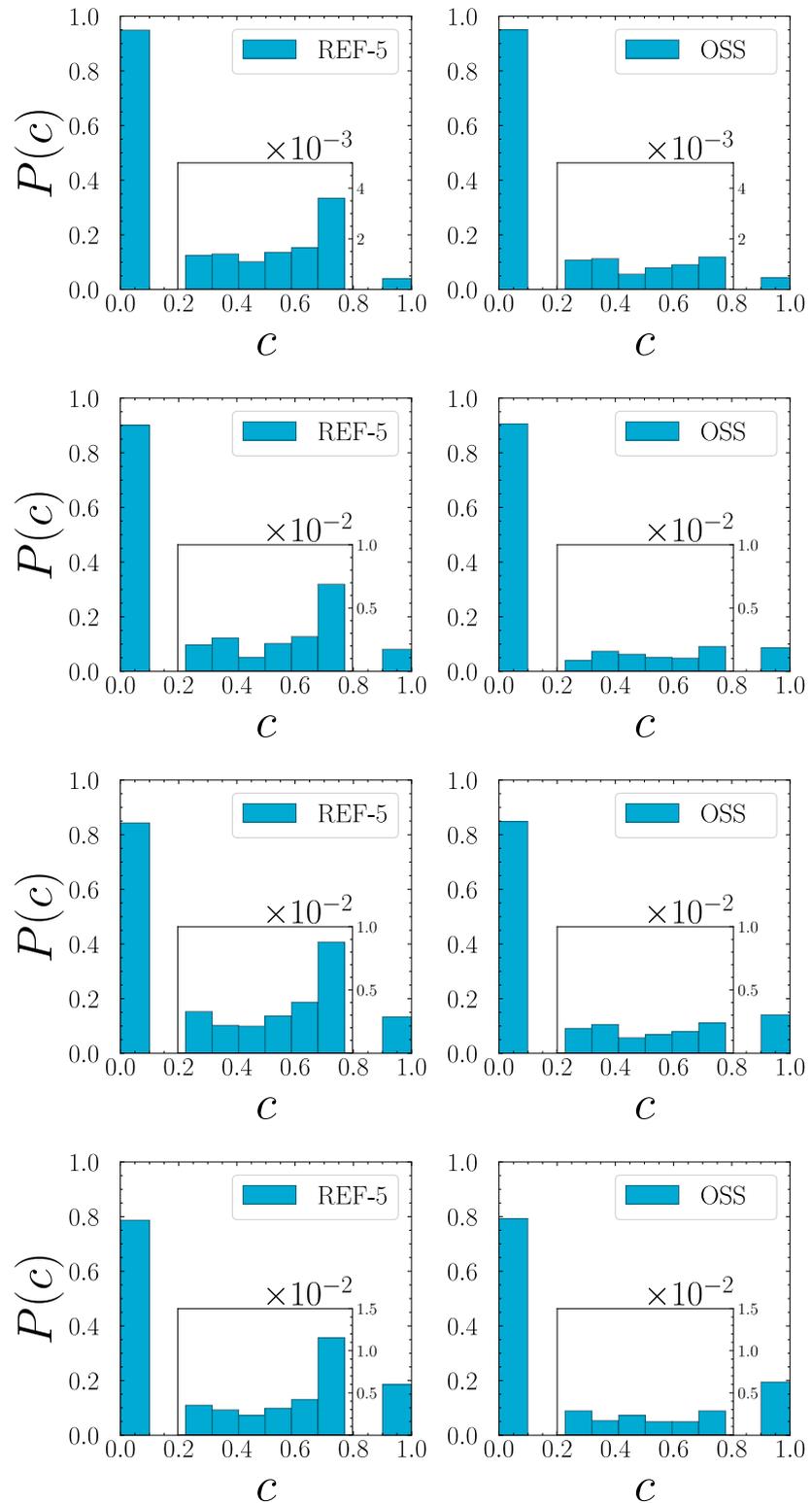


Figure 6.27 – PDF de la variable de progrès à quatre instants successifs 1, 2, 3 et 4 τ_L^0 (de haut en bas). Gauche : mécanisme de référence (REF-5). Droite : modèle OSS.

6.5.3 Développement de noyaux de flamme prémélangés turbulents dans des mélanges hétérogènes

Les conditions initiales comportant des variations de richesse sont maintenant considérées afin d'évaluer la capacité du modèle OSS à prédire la réponse de la flamme en présence à la fois d'hétérogénéités de richesse et de plissements turbulents. La pression et la température sont $p = 5$ bar et $T_u = 700$ K respectivement. L'échelle de longueur intégrale est $l_T = 2$ mm et la moyenne quadratique (RMS) initiale des fluctuations de vitesse $u_{RMS} = 0.5 \text{ m.s}^{-1}$ conduit à une valeur de quatre-vingts pour le nombre de Reynolds turbulent Re_T . Comme nous l'avons indiqué précédemment, la composition du mélange frais est initialisée à partir de la distribution d'un scalaire normalisé ξ , qui est spécifié selon son échelle de longueur caractéristique intégrale $l_\xi = 0.8$ mm et sa PDF approximée avec une fonction bêta, qui est définie à partir des deux premiers moments : la valeur moyenne $\bar{\xi} = 0.5$ et le taux de ségrégation $S_\xi = 0.6$. De plus amples détails concernant cette procédure d'initialisation peuvent être trouvés dans la référence [137]. Le scalaire correspondant est ensuite remis à l'échelle de telle manière que la valeur moyenne de la richesse du mélange soit $\bar{\Phi} = 1.2$ et ses valeurs minimale et maximale sont respectivement de 0.8 et 1.6.

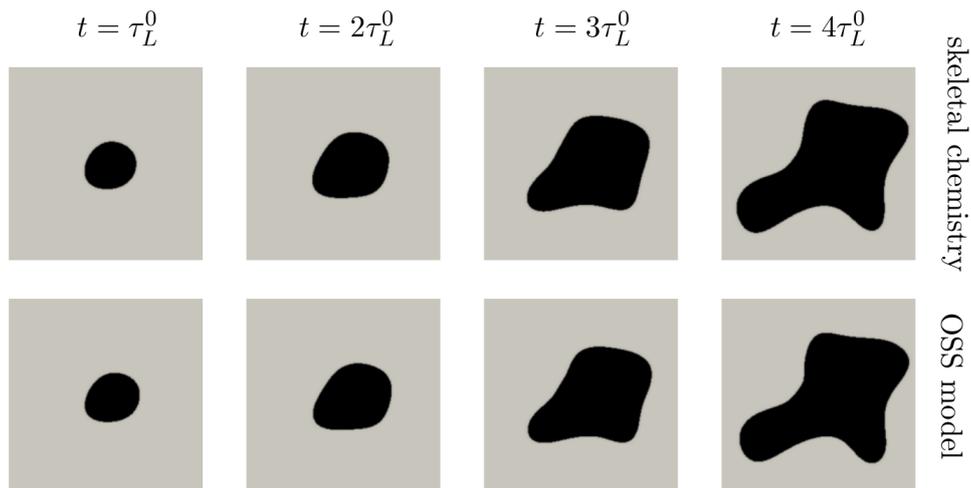


Figure 6.28 – Évolution des champs de la variable de progrès binarisés à quatre instants successifs 1, 2, 3 et 4 τ_L^0 . En haut : mécanisme de référence. En bas : modèle OSS.

Nous procédons à des analyses similaires à celles décrites dans la sous-section précédente. Une vue d'ensemble de la réponse du modèle est d'abord fournie à la Figure 6.28, qui rapporte quatre instantanés instantanés de champs binarisés de la variable de progrès. L'évolution de la richesse correspondante est reportée sur la Figure 6.29. La Figure 6.30 rassemble des images de Schlieren numérique basées sur la masse volumique. De ces résultats, il est tout à fait remarquable que, même dans le cas présent, la dynamique de la flamme turbulente et la topologie résultante sont très bien reproduites par le modèle OSS. Enfin, il est à noter que, pour ces conditions, le temps CPU nécessaire pour effectuer 100 itérations est d'environ 2750 s avec le schéma REF-5, alors qu'il n'est plus que de 310 s avec le modèle OSS ; il est donc environ neuf fois plus réduit avec le modèle OSS. On a trouvé que le gain (ou le rapport) des temps CPU correspondants atteignait une centaine pour les schémas chimiques les plus

détaillés qui ont été considérés pour effectuer des calculs de flamme prémélangés laminaire unidimensionnels avec Cantera.

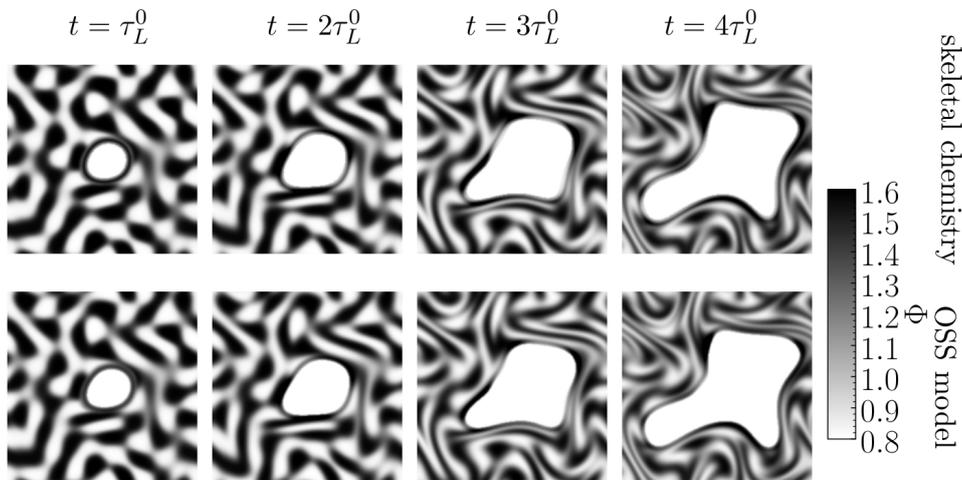


Figure 6.29 – Évolution des champs de richesse Φ à quatre instants successifs 1, 2, 3 et 4 τ_L^0 . En haut : mécanisme de référence. En bas : modèle OSS.

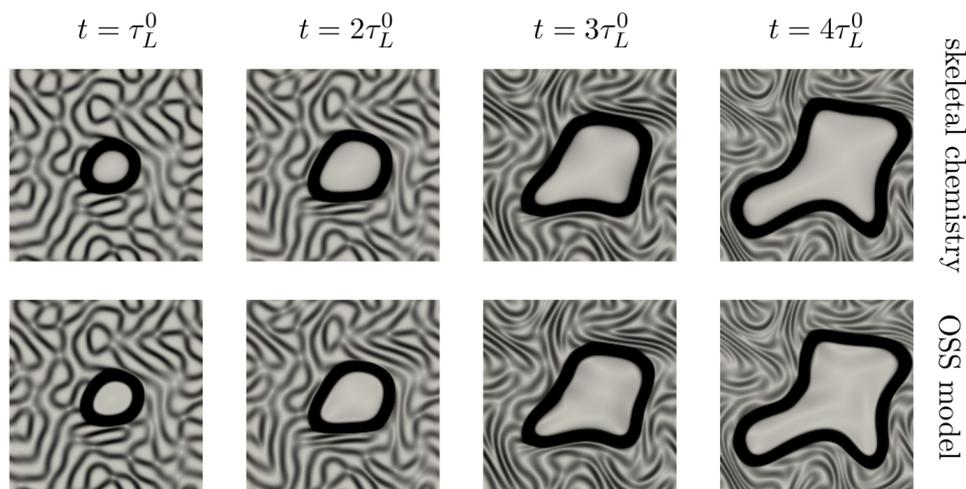


Figure 6.30 – Évolution du Schlieren numérique basé sur la masse volumique à quatre instants successifs 1, 2, 3 et 4 τ_L^0 . En haut : mécanisme de référence. En bas : modèle OSS.

6.5.4 DNS tridimensionnelle de développement de noyaux de flamme

Enfin, les illustrations de l'utilisation du modèle OSS se terminent par la présentation succincte d'une application tridimensionnelle. Il convient de souligner que la principale motivation initiale de cette étude était en effet de réaliser de telles simulations numériques tridimensionnelles, qui restent très exigeantes en termes de CPU avec une chimie détaillée.

Les mêmes valeurs sont conservées pour la pression et la température. Les fluctuations de vitesse sont fixées à $u_{RMS} = 1.2 m.s^{-1}$ et le nombre de Reynolds turbulent Re_T est d'environ cinquante. Enfin, la distribution initiale de la richesse est la même que celle considérée dans la sous-section précédente.

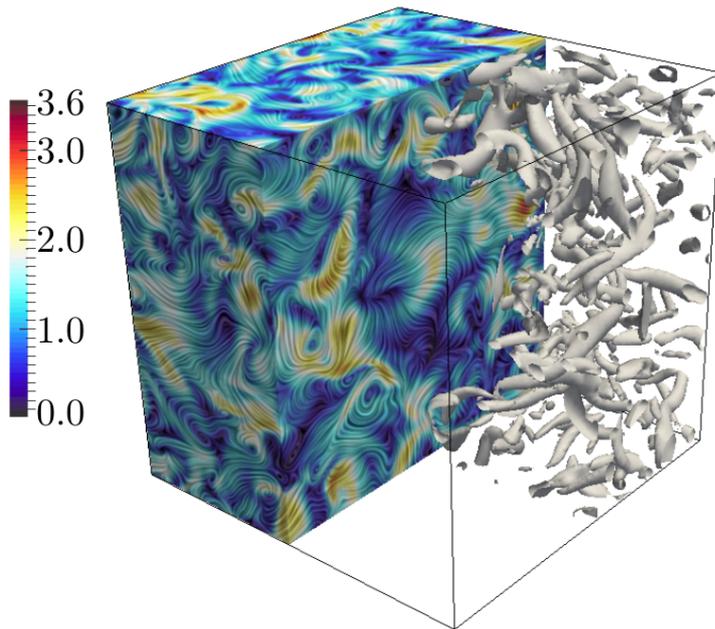


Figure 6.31 – Champ tridimensionnel de l’amplitude de vitesse et des lignes de courant associées avec une iso-surface du critère Q (deuxième invariant du tenseur du gradient de vitesse), obtenu à l’instant $t = 1$ ms avec la chimie OSS.

Un instantané typique de l’amplitude de la vitesse et des lignes de courant associées est présenté avec une valeur iso du deuxième invariant du tenseur du gradient de vitesse sur la Figure 6.31. La Figure 6.32 indique le champ correspondant de la richesse et une iso-surface de la variable de progrès ($c = 0.7$) pour visualiser le noyau de la flamme. Enfin, il convient de souligner que le temps CPU total nécessaire pour effectuer l’ensemble du calcul DNS tridimensionnel sur un poste de travail personnel standard (équipé de 40 unités de traitement³) est d’environ 815 h, c’est-à-dire que la base de données DNS a été construite en moins de 21 h. Ce temps de calcul réduit associé à la représentativité du modèle OSS qui a été évalué dans les sections précédentes offre des perspectives assez importantes pour l’utilisation de la chimie OSS dans diverses conditions.

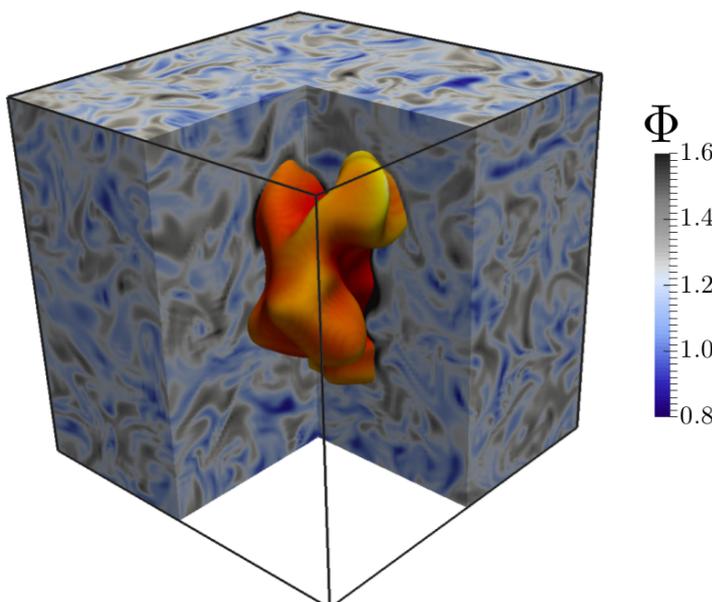


Figure 6.32 – Champ de richesse tridimensionnel et iso-surface de la variable de progrès ($c = 0.7$) obtenue à l’instant $t = 1$ ms avec la chimie OSS.

3. de type Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2670 v3 @ 2.30 GHz.

6.6 Conclusions

Ce chapitre a décrit un modèle chimique optimisé en une seule étape (OSS) qui est développé pour simuler la propagation de la flamme prémélangée dans des réactifs entièrement prémélangés ou des mélanges stratifiés. L'approche incorpore des procédures d'optimisation pour récupérer (i) la température des gaz brûlés en tenant compte de l'influence de l'oxydation partielle et de la dissociation, (ii) la vitesse de propagation de la flamme prémélangée laminaire et (iii) l'épaisseur de la flamme prémélangée laminaire. Ceci conduit à la définition d'un modèle chimique OSS basé sur une loi d'Arrhenius modifiée pour la vitesse de réaction et impliquant une espèce virtuelle dont les propriétés, à savoir la capacité calorifique et la conductivité thermique, sont déterminées par le biais de calculs préliminaires conduits avec une description cinétique détaillée.

La pertinence du modèle OSS est d'abord évaluée dans des conditions laminaires pour une large gamme de conditions, y compris les variations de la richesse, la température et la pression. Plusieurs combustibles, par exemple le méthane, le propane et les PRF (n-heptane et l'iso-octane) sont considérés. L'analyse inclut également la sensibilité aux effets de dilution. Les comparaisons effectuées entre les modèles OSS correspondants avec des descriptions chimiques de référence (réduites ou détaillées) confirment sans aucun doute que le modèle simplifié reproduit avec précision les caractéristiques ciblées sur une large gamme de conditions initiales, par exemple température, pression et richesse. La réponse chimique de l'OSS est également examinée dans le cas de flammes de diffusion étirées et les résultats obtenus confirment la pertinence de l'approche proposée.

Dans une deuxième étape de la procédure de validation, nous considérons un modèle OSS et la description chimique de référence correspondante pour simuler la propagation des noyaux de flamme d'iso-octane /air soumis à la courbure, aux effets d'étirement et aux hétérogénéités de richesse. Les simulations sont conduites à la fois dans des conditions laminaires et turbulentes. Les résultats obtenus montrent que, même dans des conditions turbulentes ou en présence de variations de richesse, le modèle de chimie OSS est capable de reproduire de façon satisfaisante la dynamique du front de flamme.

Propagation d'un noyau de flamme dans un milieu turbulent stratifié

Sommaire

7.1	Introduction	156
7.2	Influence des caractéristiques de la distribution	156
7.3	Génération de la surface de flamme	159
7.4	Propagation préférentielle	163
7.5	Analyse de la topologie de la flamme	165
7.5.1	Mécanismes opérant sur la surface de flamme	165
7.5.2	Alignement préférentiel du front de flamme	166
7.5.3	Bilan de la densité de surface de flamme	168
7.6	Analyse de la vitesse de déplacement du front de flamme	171
7.6.1	Effet de la diffusion différentielle	171
7.6.2	Analyse du bilan de la vitesse de déplacement	174
7.7	Structure locale de flamme	178
7.8	Analyse du mélange turbulent	180
7.9	Influence de l'intensité de turbulence	183
7.10	Analyse de flammes tridimensionnelles	185
7.11	Étude dynamique et cinématique des orientations scalaire-vitesse	187
7.12	Conclusion	193

7.1 Introduction

Afin de découpler les effets des hétérogénéités de ceux associés à la turbulence, nous nous sommes concentrés dans le chapitre précédent sur l'étude et l'analyse des mécanismes physiques qui gouvernent la propagation d'un front de flamme dans un milieu stratifié. Dans ce qui suit, on étend l'analyse à l'étude des écoulements turbulents pour évaluer l'impact conjoint des hétérogénéités de composition et des fluctuations de vitesse turbulentes.

Du fait de la nature tridimensionnelle des écoulements turbulents, des simulations en trois dimensions semblent plus pertinentes dans la mesure où de tels effets sont analysés. En revanche, en raison du coût CPU élevé de la chimie détaillée et aussi pour garantir une certaine cohérence avec l'étude précédente, seules des simulations bidimensionnelles seront considérées, dans un premier temps, pour qualifier l'influence potentielle de la turbulence dans une telle situation.

Ce chapitre est organisé comme suit : dans un premier temps, l'influence potentielle des caractéristiques de l'hétérogénéité sera étudiée dans un contexte turbulent. Ensuite, on mettra en évidence les mécanismes de la génération de la surface de flamme et de la propagation préférentielle. Les analyses porteront aussi sur la topologie du front de flamme, sa structure locale et pour finir, sa vitesse de propagation. Puis, l'influence de l'intensité de la turbulence sera détaillée. Enfin, une extension des analyses aux cas tridimensionnels est proposée.

Une partie des travaux présentés ici ont fait l'objet d'une communication au 26TH INTERNATIONAL COLLOQUIUM ON THE DYNAMICS OF EXPLOSIONS AND REACTIVE SYSTEMS (ICDERS) [219], et d'une publication dans *Combustion and Flame* [220].

7.2 Influence des caractéristiques de la distribution

La propagation d'un noyau de flamme dans un milieu turbulent en présence d'hétérogénéités de composition, est sujette à une compétition entre les effets de la turbulence et de ceux associés à la stratification. En effet, le champ de vitesse, par le biais du mélange turbulent, a tendance à homogénéiser le champ de richesse, tandis que les hétérogénéités locales introduisent une différence au niveau de la vitesse de propagation locale du front de flamme.

Afin de caractériser la propagation du front de flamme soumis à une telle compétition, une première catégorie de cas turbulents de la base de données DNS, a été conçue de sorte que les effets dynamiques de la turbulence et les effets chimiques relatifs aux hétérogénéités de combustion soient initialement comparables. Une illustration des conditions retenues est donnée sur le diagramme des régimes de la combustion turbulente (cf. Figure 7.1). Sur ce dernier, il est possible de noter, que la présence des hétérogénéités de richesse, par exemple, permet au front de flamme considéré de s'étendre sur plusieurs régimes de combustion, en raison de la variation locale des propriétés de la flamme. La Figure 7.1 montre également qu'en moyenne, le régime de combustion associé cas considérés se situe au voisinage de la frontière entre deux régimes de combustion : le régime des flammes plissées avec poches (*Corrugated*) et des flammes plissées (*Wrinkled*), et ce quelle que soit la richesse moyenne du mélange.

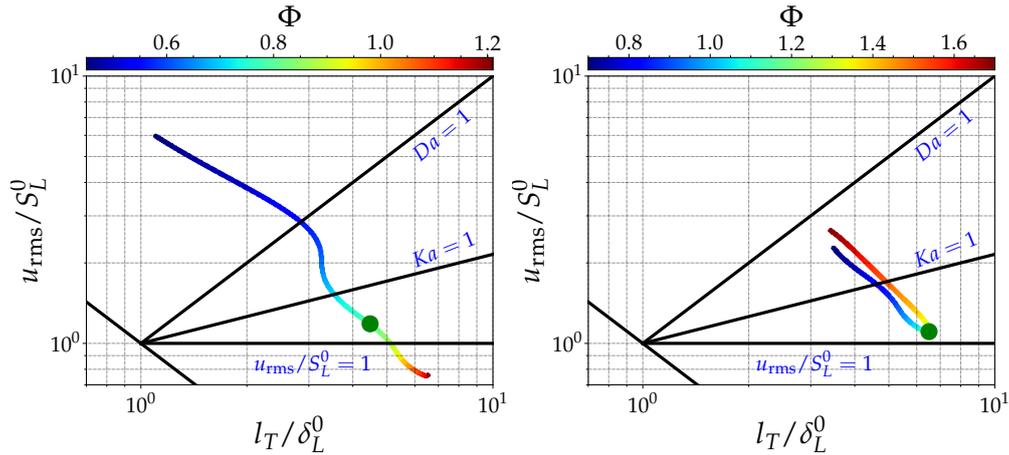


Figure 7.1 – Diagramme de combustion turbulente pour les cas correspondant à une turbulence modérée en présence d'un champ d'hétérogénéités de longueur caractéristique et de taux de ségrégation modérés. Le point vert correspond à la moyenne. À gauche : $\bar{\Phi} = 0.8$. À droite : $\bar{\Phi} = 1.2$

En termes d'intensité de turbulence, les écoulements considérés présentent des fluctuations de vitesse turbulente $u_{RMS} = 1.0m.s^{-1}$ pour $\bar{\Phi} = 0.8$ et $u_{RMS} = 1.45m.s^{-1}$ pour $\bar{\Phi} = 1.2$. Un second avantage associé aux faibles niveaux de turbulence retenus dans cette catégorie, réside dans leurs propriétés voisines des cas laminaires. Dans ces derniers, en particulier, les effets conjoints des hétérogénéités de richesse et de température ont été découplés en considérant trois natures de stratification (richesse, température et corrélation richesse-température). Il a été montré, suite à l'analyse de la réponse volumique de la flamme, que les effets de stratification de richesse et de la corrélation richesse-température sont comparables, de sorte que l'effet des stratifications en température est négligeable et les flammes résultantes de ce genre de stratifications montrent un comportement similaire à celui des flammes homogènes.

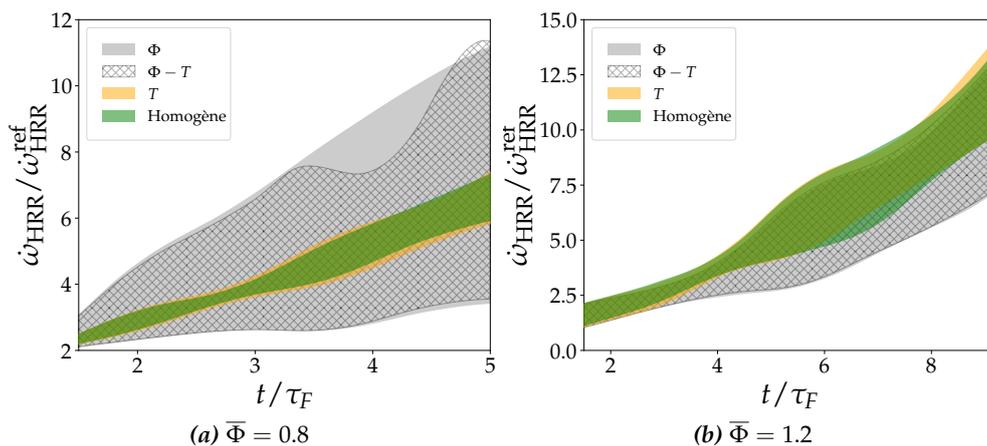


Figure 7.2 – Évolution de l'intégrale volumique du taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_{HRR}$ pour les richesses moyennes initiales $\bar{\Phi} = 0.8$ et $\bar{\Phi} = 1.2$, en fonction du temps pour chaque nature des hétérogénéités en présence de la turbulence. À gauche $\bar{\Phi} = 0.8$, à droite $\bar{\Phi} = 1.2$.

Dans le cas des présentes flammes turbulentes, on retrouve également ce résultat comme illustré par la Figure 7.2. Cependant, contrairement aux cas laminaires, les réponses des

flammes homogènes sont caractérisées par des zones plus larges en raison des différentes évolutions résultantes de la multiplication des tirages de la turbulence. On rappelle que chaque cas considéré correspond à quatre tirages du champ de fluctuations de vitesse et que le nombre de réalisations est multiplié par le nombre des tirages du scalaire, ce qui mène à quatre réalisations dans les conditions homogènes et à huit dans les cas hétérogènes.

Cela permet de réduire l'espace des paramètres de la base de données DNS, en ne considérant, par la suite, que les cas impliquant des hétérogénéités de richesse. Les réponses volumiques de ces derniers sont représentées en termes du taux de dégagement de chaleur volumique intégral (TVI) sur la Figure 7.3, et présentent des évolutions différentes en fonction des caractéristiques de la distribution du champ initial des richesses locales. Pour les configurations de richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 1.2$, où il est attendu que l'introduction des stratification induise une diminution de l'efficacité de la combustion, on retrouve la tendance observée dans le cas des configurations laminaires, *i.e.*, la déviation relative à la condition homogène croît avec l'augmentation de l'échelle de longueur et de celle du taux de ségrégation du champ de composition.

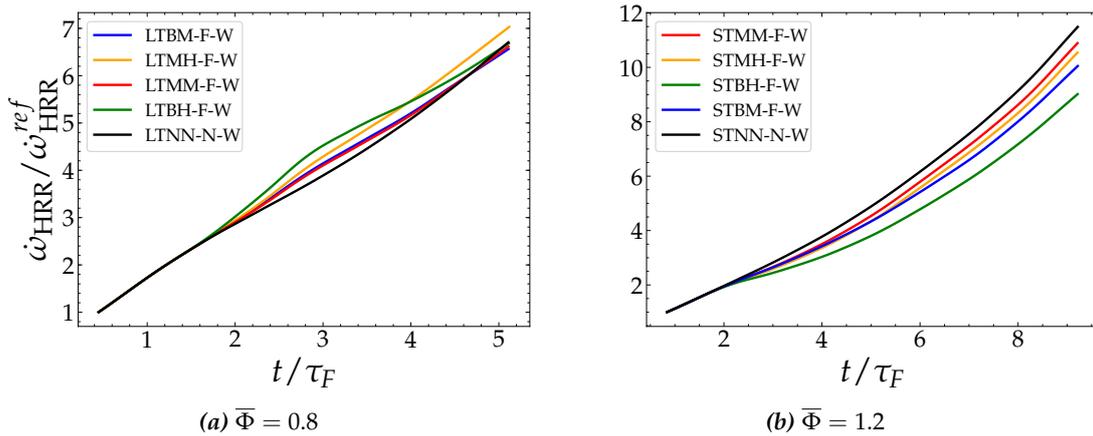


Figure 7.3 – Évolution de l'intégrale volumique du TVI $\dot{\omega}_{HRR}$ pour les richesses moyennes initiales $\bar{\Phi} = 0.8$ et $\bar{\Phi} = 1.2$, en fonction des paramètres de la distribution des hétérogénéités. À gauche $\bar{\Phi} = 0.8$, à droite $\bar{\Phi} = 1.2$

Cette tendance est également observée, lorsque la moyenne des richesses initiales est $\bar{\Phi} = 0.8$ avec toutefois, quelques différences notables par rapport au cas $\bar{\Phi} = 1.2$. En effet, le taux de dégagement volumique des flammes stratifiées évolue de sorte qu'il reste supérieur à sa contrepartie homogène, jusqu'au voisinage de $t \approx 4\tau_F$. À partir de cet instant, la valeur de $\dot{\omega}_{HRR}$ des cas hétérogènes diminue, et devient même légèrement inférieure à celle du cas homogène, à l'exception de la situation où la distribution initiale de richesse est caractérisée par une échelle de longueur caractéristique modérée et un taux de ségrégation élevé. Dans cette dernière, une différence plus conséquente est observée par rapport au cas homogène, et se caractérise par une amélioration de l'efficacité de la combustion.

En termes d'influence relative des caractéristiques de la stratification, on note que les ré-

ponses volumiques des flammes LTMM-F-N et LTBM-F-N sont similaires à quelques différences minimales près, tandis que l'écart entre les configurations LTMM-F-N LTMH-F-W est beaucoup plus prononcé. Cela suggère que les effets liés à l'échelle de longueur caractéristique de la stratification ont une moindre influence en comparaison de ceux liés au taux de ségrégation. En revanche, en regroupant les réalisations DNS par valeurs de L_Φ (Figure 7.4a) ou bien par celles de S_Φ (Figure 7.4b), on peut noter que l'élargissement de l'enveloppe des évolutions du taux de dégagement de chaleur volumique, quand S_Φ varie de 0.4 à 0.8, est plus faible devant celui observé lorsque L_Φ varie de $L/20$ à $L/10$. On retrouve ainsi le résultat obtenu pour les flammes laminaires, c'est à dire une prédominance des effets de L_Φ sur ceux associés à S_Φ .

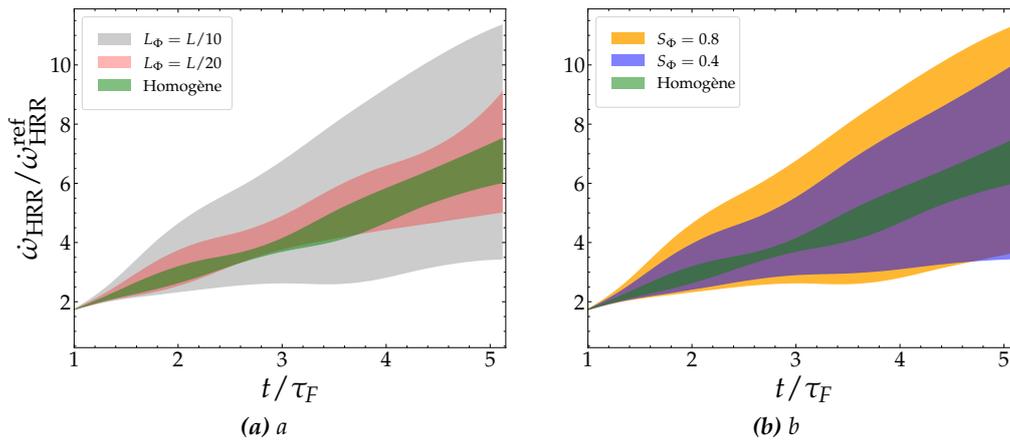


Figure 7.4 – Enveloppes des évolutions du TVI des flammes stratifiées et de la flamme homogène pour $\bar{\Phi} = 0.8$, regroupées par échelle de longueur du champ de richesse (à gauche), et par taux de ségrégation de la distribution des fluctuations de richesse (à droite).

Dans la suite, l'étude sera limitée aux cas $\bar{\Phi} = 0.8$, en commençant par les cas caractérisés par un champ turbulent initial dont $u_{rms} = 1.2m/s$. La Figure 7.5 illustre un exemple de développement de noyau de flamme obtenu dans cette catégorie de simulations.

7.3 Génération de la surface de flamme

En présence des hétérogénéités de mélange, les différents éléments de la flamme sont susceptibles de se déplacer à des vitesses différentes, conduisant ainsi à des plissements au niveau du front de flamme. Ce plissement engendre une augmentation de la surface de la flamme. Ainsi, lorsque la flamme se propage dans un milieu turbulent hétérogène la surface de la flamme peut croître non seulement à cause de l'étirement turbulent, mais également à cause de la stratification. Il convient toutefois de noter qu'une augmentation de la surface de la flamme, due à des hétérogénéités du mélange, n'implique pas, nécessairement, une augmentation de l'efficacité de la combustion.

La Figure 7.6 présente l'évolution temporelle du rayon équivalent et de l'intégrale volumique du taux de dégagement de chaleur par unité de surface $\dot{\omega}_{HRR,\Sigma}$. Les rayons équivalents R_{eq} des flammes stratifiées évoluent de manière similaire, de sorte qu'ils restent supérieurs à leur contrepartie homogène. Cependant, des différences plus notables peuvent être relevées

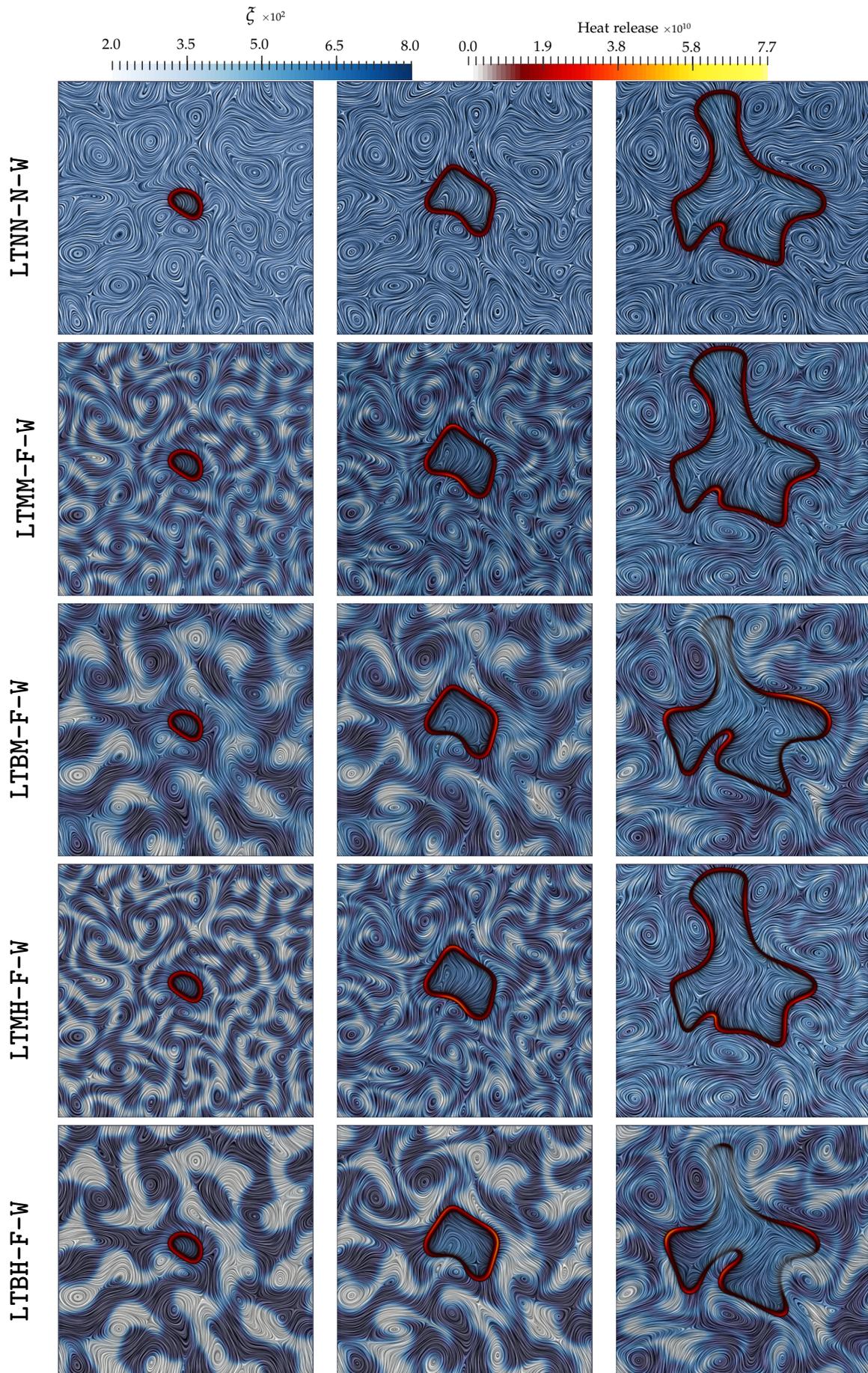


Figure 7.5 – Propagation de flamme turbulente, illustrée par le taux de dégagement de chaleur, dans un mélange de composition hétérogène de richesse moyenne $\Phi = 0.8$. De gauche à droite, le temps est $2.5 \tau_t$, $5.9 \tau_t$, de haut en bas : champs de fraction de mélange des configurations LTNN-N-W, LTMM-F-W, LTBM-F-W, LTMH-F-W, LTBH-F-W, obtenus avec un tirage de scalaire et un tirage de champ de vitesse turbulent.

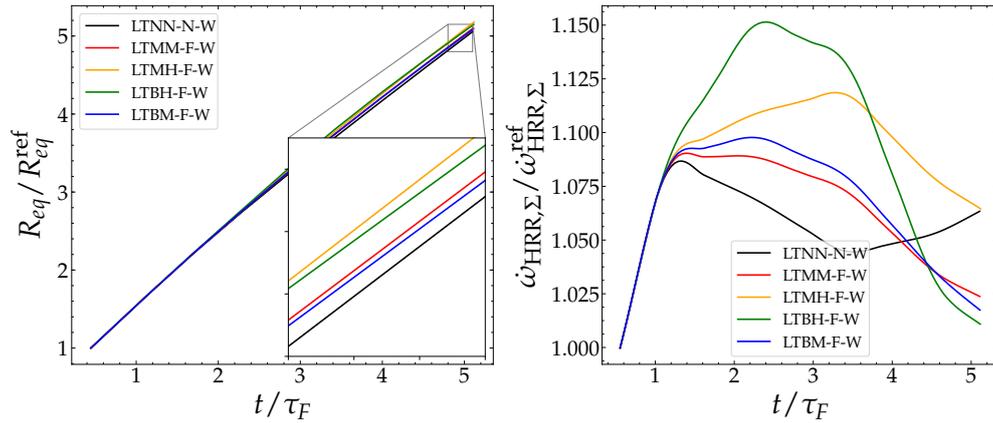


Figure 7.6 – Évolution du rayon équivalent (à gauche) et de l'intégrale volumique du taux de dégagement de chaleur par unité de surface $\dot{\omega}_{HRR,\Sigma}$ pour une richesse moyenne $\bar{\Phi} = 0.8$, en fonction du temps

comme le montre l'évolution de $\dot{\omega}_{HRR,\Sigma}$. On peut noter, en particulier, qu'à l'instant $t \approx 5\tau_F$, les valeurs de $\dot{\omega}_{HRR,\Sigma}$ atteintes dans les cas LTBH-F-W, LTBM-F-W et LTMM-F-W sont plus petites que celle du cas de référence. Cela implique que la surface générée dans les premiers cas est compensée par une diminution de $\dot{\omega}_{HRR,\Sigma}$ résultant ainsi en un taux de dégagement de chaleur global comparable à celui associé à la condition homogène. Ainsi, l'effet global des hétérogénéités de composition sur l'efficacité de la combustion est contrôlé non seulement par une augmentation de la surface du front de la flamme, mais également par les fluctuations de la richesse locale qui ont tendance à réduire la vitesse de consommation locale moyenne ou $\dot{\omega}_{HRR,\Sigma}$. Cette réduction est moins intense lorsque l'échelle caractéristique de longueur du champ de richesse locale est modérée et que le taux de ségrégation associé est relativement élevé, seul cas pour lequel une amélioration de l'efficacité de la combustion a été constatée.

Comme cela a été introduit, la génération de la surface du front de flamme sous l'effet des hétérogénéités de composition est un fruit du plissement supplémentaire induits par les différences des vitesses locales de propagation. Il s'ensuit que la surface générée est d'autant plus importante que l'amplitude de la différence des vitesses locales est grande. D'autre part, la diminution de la vitesse locale de consommation des réactifs ou du taux de dégagement de chaleur par unité de surface est une conséquence directe du fait que le front de flamme rencontre des zones de composition moins favorables à la propagation, qui sont dans le présent cas, puisque ($\bar{\Phi} = 0.8$), des zones très pauvres. La Figure 7.7 regroupe les PDFs jointes de la richesse locale de l'état frais et de la vitesse de déplacement S_d du front de flamme évaluée sur l'iso-contour $c = c_{max}$ où le taux de dégagement de chaleur est maximal. Les configurations impliquant un champ d'hétérogénéités caractérisé par une grande taille de poche présentent des PDFs plus larges suivant la vitesse de déplacement. Cependant, les zones de forte probabilité sont regroupées dans une gamme assez étroite de S_d en comparaison du cas de longueur caractéristique plus réduite, ce qui se traduit par des plissements plus faibles et donc une surface inférieure à celle générée par les cas $L_\Phi = L/20$. En particulier, dans ces cas, on peut

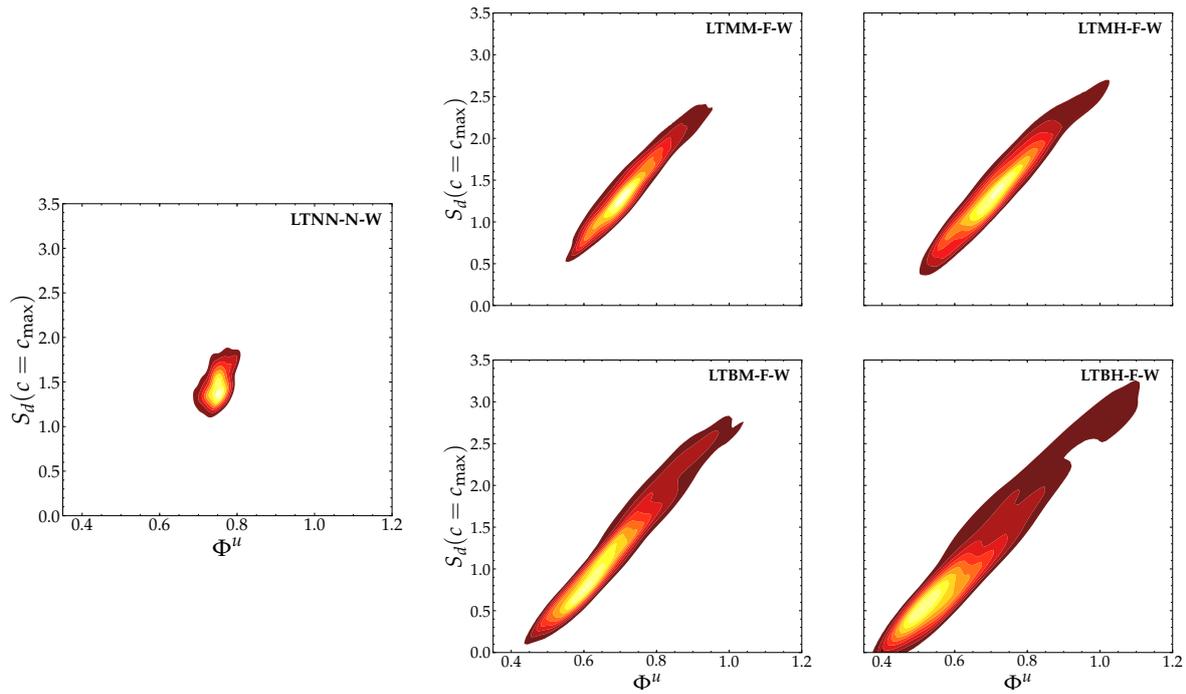


Figure 7.7 – PDFs jointes de la richesse locale des gaz frais (exposant u) et de la vitesse de déplacement S_d du front de flamme évaluée sur l'iso-contour $c = c_{\max}$

souligner la présence de très faibles valeurs de S_d en comparaison au cas où $L_\Phi = L/20$. Cela est attribué au fait que la distribution de richesse a tendance à évoluer vers les faibles richesses et proches, dans certaines zones, de la limite d'inflammabilité. Par ailleurs, ce constat peut expliquer la diminution du taux de dégagement de chaleur par unité de surface visible sur la Figure 7.6. Par contre, dans le cas LTMH-F-W, on peut noter que la distribution de la vitesse de propagation locale correspond à une plage qui est relativement éloignée de la limite d'inflammabilité et qui est centrée autour de la zone de richesses et de vitesses de déplacement obtenue dans la configuration homogène. Cela donne, ainsi, des éléments pour mieux comprendre l'évolution de la réponse volumique globale observée dans ce cas.

Un autre point intéressant pouvant être relevé de cette évolution, c'est que les PDFs de richesses initiales imposées pour les cas considérés sont bimodales, alors que d'après les PDFs jointes reportées sur la Figure 7.7 une forme différente émerge. Cela est particulièrement attendu en présence des structures turbulentes qui ont tendance à homogénéiser le mélange. Par contre, pour un taux de ségrégation initial fixé, la PDF globale des richesses dans les gaz frais est analogue, puisque les deux distributions de richesse ($L_\Phi = L/10$ et $L_\Phi = L/20$) évoluent en se mélangeant dans le même champ de fluctuations de vitesse turbulentes. L'étude de l'évolution des deux distributions sur le front de flamme vers leurs états finaux, permettra de comprendre les mécanismes donnant lieu aux différences observées.

7.4 Propagation préférentielle

L'évolution temporelle de la distribution de la fraction de mélange du côté des réactifs frais, en terme de PDF et de variance, est illustrée par la [Figure 7.8](#). L'effet de l'homogénéisation du mélange par les structures turbulentes est observable dans les quatre cas et se manifeste par une tendance de la PDF de la fraction de mélange à rejoindre celle du cas homogène. Cela dépend des caractéristiques du champ imposé de fluctuations de richesse. En effet, les poches du champ de richesse locale caractérisées par une petite échelle de longueur seront rapidement atténuées par le champ turbulent, et le champ de richesse résultant rejoindra, ainsi, plus rapidement l'état homogène (cas LTMM-F-W et LTMH-F-W). Cependant, en présence des poches de taille plus importante, l'efficacité du mélange du champ turbulent diminuant avec le temps, la convergence du champ de richesse locale vers l'état homogène est plus lente (cas LTBM-F-W et LTBH-F-W). La turbulence a également un effet destructeur sur le gradient. Le temps caractéristique de l'homogénéisation d'un champ scalaire est effectivement proportionnel à son taux de ségrégation. On peut noter cela, en particulier, en comparant les PDFs de la fraction de mélange associées aux cas LTMM-F-W et LTBM-F-W par rapport à LTMH-F-W et LTBH-F-W. Effectivement, les cas appartenant à la première catégorie de faible taux de ségrégation évoluent, pour atteindre l'état homogène, plus rapidement que la seconde catégorie.

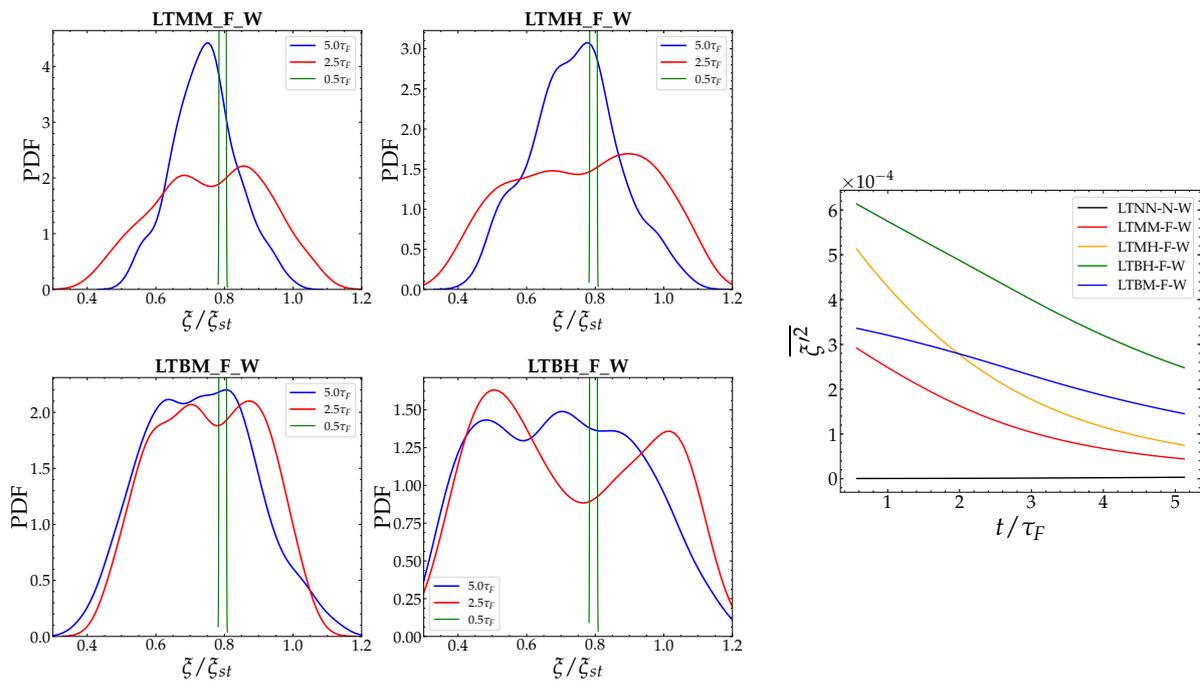


Figure 7.8 – Évolution de la distribution de la fraction de mélange du côté des réactifs frais à l'isocourant $c = 0.1$ entre les instants 0.5 , 2.5 et $5\tau_F$ (à gauche). Évolution temporelle de la variance de la fraction de mélange (à droite).

Dans leur évolution vers l'état homogène, les distributions de la fraction de mélange sur les fronts des flammes stratifiées, tendent en moyenne vers une condition plus pauvre que celle du cas homogène. Cela est une conséquence directe de la propagation préférentielle, dans le cas présent, du front de flamme dans les zones les plus riches. En d'autres termes, les

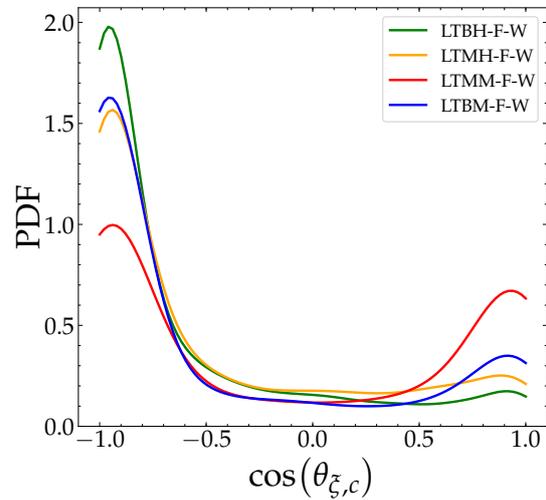
zones les plus riches rencontrées par le front de flamme dans les gaz frais sont consommées plus rapidement que les zones les plus pauvres, ce qui engendre une accumulation de ces derniers au voisinage du front de flamme. Toutefois, ce phénomène s'accroît en présence des grandes échelles de longueur caractéristique de la stratification. Dans ce cas, en raison de la grande taille caractéristique des poches, les échelles de temps caractéristiques du mélange turbulent sont plus faibles que les temps caractéristiques chimiques dans les zones riches. Par conséquent, les gaz frais dans ces zones sont consommés avant que les structures turbulentes les mélangent avec ceux des zones pauvres. Avec un raisonnement analogue, l'augmentation du taux de ségrégation induit une accumulation de poches pauvres sur le front de flamme.

Une illustration de cet effet, pourrait être obtenue par le biais de l'alignement entre les gradients scalaires de la fraction de mélange et la variable de progrès. Dans cette optique, on définit $\theta_{\xi,c}$ l'angle entre les normales aux iso-surfaces de c et de ξ :

$$\theta_{\xi,c} = \mathbf{n}_c \cdot \mathbf{n}_\xi = \frac{\nabla \xi \cdot \nabla c}{\|\nabla \xi\| \|\nabla c\|}$$

La normale au front de flamme est orientée dans le sens opposé à celui du gradient de la variable de progrès. Ainsi, $\theta_{\xi,c} = \pi$ indique que la flamme se propage dans un mélange plus riche le long du gradient de la fraction du mélange. Inversement, $\theta_{\xi,c} = 0$ équivaut à une propagation de la flamme vers un mélange localement plus pauvre le long du gradient de la fraction de mélange.

Figure 7.9 – PDF de l'angle d'alignement entre le gradient de la variable de progrès et de celui de la fraction de mélange sur le front de flamme à l'instant $t = 4\tau_F$.



Les PDFs reportées sur la [Figure 7.9](#), montrent que la valeur la plus probable de $\cos(\theta_{\xi,c})$ est -1, ce qui équivaut à un alignement préférentiel de la direction de la propagation de la flamme avec la direction de l'augmentation de la fraction de mélange. Cela confirme, les évolutions de la fraction de mélange observées. En l'occurrence, la probabilité associée à la valeur π de l'angle $\theta_{\xi,c}$ augmente avec l'augmentation de la taille caractéristique des poches et du taux de ségrégation. Toutefois, dans le cas où les stratifications sont à petites échelles et caractérisées par une faible intensité (*i.e.*, LTMM-F-W), il n'y a pas d'alignement clairement dominant, mais un angle $\theta_{\xi,c} = \pi$ est plus probable. Cela est attribué au fait que, dans ces

conditions, la flamme stratifiée est proche d'une flamme homogène.

7.5 Analyse de la topologie de la flamme

7.5.1 Mécanismes opérant sur la surface de flamme

Dans les sections précédentes, il a été montré que dans les conditions de l'étude, la stratification, par le biais de la propagation préférentielle dans les zones les plus riches, conduit à un mécanisme de plissement supplémentaire dont l'amplitude dépend de l'échelle de longueur et de l'intensité des fluctuations caractérisée par le taux de ségrégation dans cette étude. En conséquence de cet effet, la surface du front de flamme augmente par rapport à sa contrepartie homogène. Dans un contexte analogue où la flamme se propage dans un milieu turbulent subit des plissements comparables, le taux de variation instantané de sa surface A peut être calculé selon Pope [64] et Candel et Poinso [54] à partir du taux d'étirement dans le plan tangent a_t , de la courbure locale κ et de la vitesse de déplacement comme suit :

$$\frac{1}{A} \frac{dA}{dt} = a_t + s_d \kappa \quad (7.1)$$

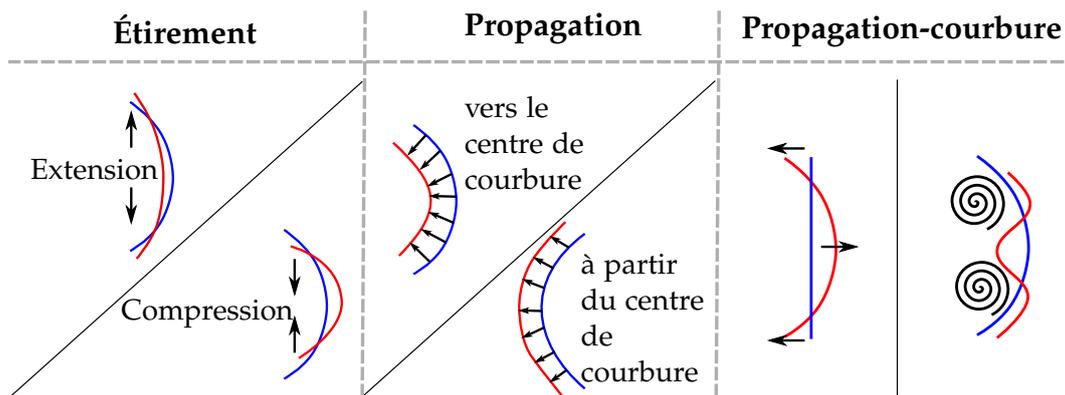


Figure 7.10 – Schématisation des mécanismes modifiant le comportement d'un élément de surface de flamme en propagation [64].

Le premier terme du second membre représente le taux d'augmentation de la surface de flamme due aux contraintes hydrodynamiques. En effet, les étirements dans le sens de l'extension ont tendance à augmenter la surface contrairement aux étirements dans le sens de compression. Le second terme correspond aux changements potentiels de surface d'un front de flamme courbé en propagation : la surface diminue dans le cas d'une propagation vers le centre de courbure et augmente dans le cas d'une propagation dans le sens opposé, *i.e.*, vers l'extérieur. On peut ainsi, par le biais de cette équation, exprimer la dépendance fondamentale de la surface de la flamme à l'étirement et à la courbure en découplant leurs effets respectifs sur la structure de flamme. Cette dépendance apparaît également dans l'équation de transport de la fonction de densité de surface de flamme présentée précédemment. Dans cette dernière, Pope [64] et Candel et Poinso [54], ont distingué trois effets régissant l'évolution des éléments de la surface de flamme (*cf.* Figure 7.10) : (i) l'étirement, (ii) la propagation et (iii) les effets

hydrodynamiques résultant de la combinaison des effets de la propagation et de la courbure induite par les structures de l'écoulement. Dans la suite, on se propose d'étudier l'influence des hétérogénéités de composition sur chacun de ces mécanismes.

7.5.2 Alignement préférentiel du front de flamme

Les PDFs de courbure du front de flamme (normalisée par l'épaisseur de flamme laminaire δ_L^0) sont présentées sur la [Figure 7.11a](#). Les valeurs prises par la distribution de la courbure suggèrent que les éléments des fronts de flammes ont tendance à être plutôt convexes dans la direction des réactifs frais (courbures positives). Néanmoins, hormis le cas LTMH-F-W, on note que le pic des PDFs des flammes stratifiées apparaît pour des valeurs légèrement négatives qui correspondent à des zones convexes contrairement au cas homogène où la valeur la plus probable de la courbure est positive. En outre, les PDFs de courbure du front de flamme sont plus larges que leur contrepartie homogène. Toutefois, ces résultats montrent que la courbure du front de flamme est faiblement influencée par la stratification. Les similitudes observées sur les PDFs associées à des cas homogènes et à des flammes stratifiées, suggèrent que le plissement supplémentaire induit par les hétérogénéités de composition reste modéré par rapport à celui induit par la turbulence.

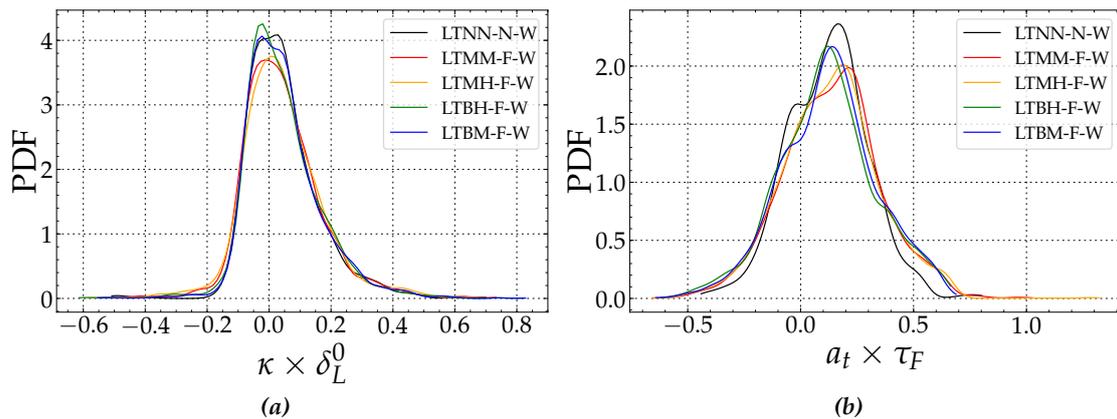


Figure 7.11 – PDF de la courbure (à gauche) et de du taux d'étirement tangential sur le front de flamme à l'instant $t = 5\tau_F$.

Par ailleurs, les PDFs du taux d'étirement tangential a_t (normalisé par le temps caractéristique de propagation de la flamme laminaire) sont présentées sur la [Figure 7.11b](#). Elles sont caractérisées par une forme quasi-symétrique, avec plus d'excursions du côté des valeurs positives (extension). Les positions relatives des pics des PDFs sont légèrement modifiées avec la présence des hétérogénéités. Pour une distribution de richesse locale caractérisée par de petites poches, la valeur la plus probable du taux d'étirement tangential augmente, tandis qu'elle diminue en présence d'hétérogénéités à grande échelle. De plus, comme pour la courbure, la PDF de a_t est élargie par la stratification.

Un comportement typique observé dans les flammes prémélangées homogènes turbulentes et mis en évidence par [Haworth et Poinso](#) [132], consiste en une forte corrélation entre

le taux d'étirement tangentiel et la courbure du front de flamme. Les éléments du front de flamme convexes par rapport au réactifs frais et concaves par rapport aux produits, *i.e.*, de courbures positives, sont en alignés avec la direction de compression caractérisée par des valeurs négatives du taux d'étirement tangentiel, tandis que les zones concaves par rapport au réactifs frais et convexes par rapport aux gaz brûlés sont alignées avec la direction d'extension dont la signature est la prépondérance des valeurs positives de a_t . Toutefois, il existe certaines régions fortement courbées corrélées à des taux d'étirement tangentiel en compression et inversement.

La Figure 7.12 regroupe les PDFs jointes de la courbure et du taux d'étirement tangentiel du front de flamme à l'instant $t = 5\tau_F$ pour les flammes stratifiées et la condition homogène considérée. Dans le cas homogène on peut retrouver l'effet d'alignement, qui se traduit par un coefficient de corrélation négatif assez élevé¹. La présence des hétérogénéités diminue, relativement, cette corrélation suite à la modification des distributions de κ et de a_t . On peut noter que l'intensité de cet effet, augmente avec l'augmentation de l'intensité des hétérogénéités et de leur taille caractéristique. En revanche, dans l'ensemble, les stratifications n'altèrent pas la corrélation des courbures positives avec la direction de compression et de celles de courbures négatives avec la direction d'extension.

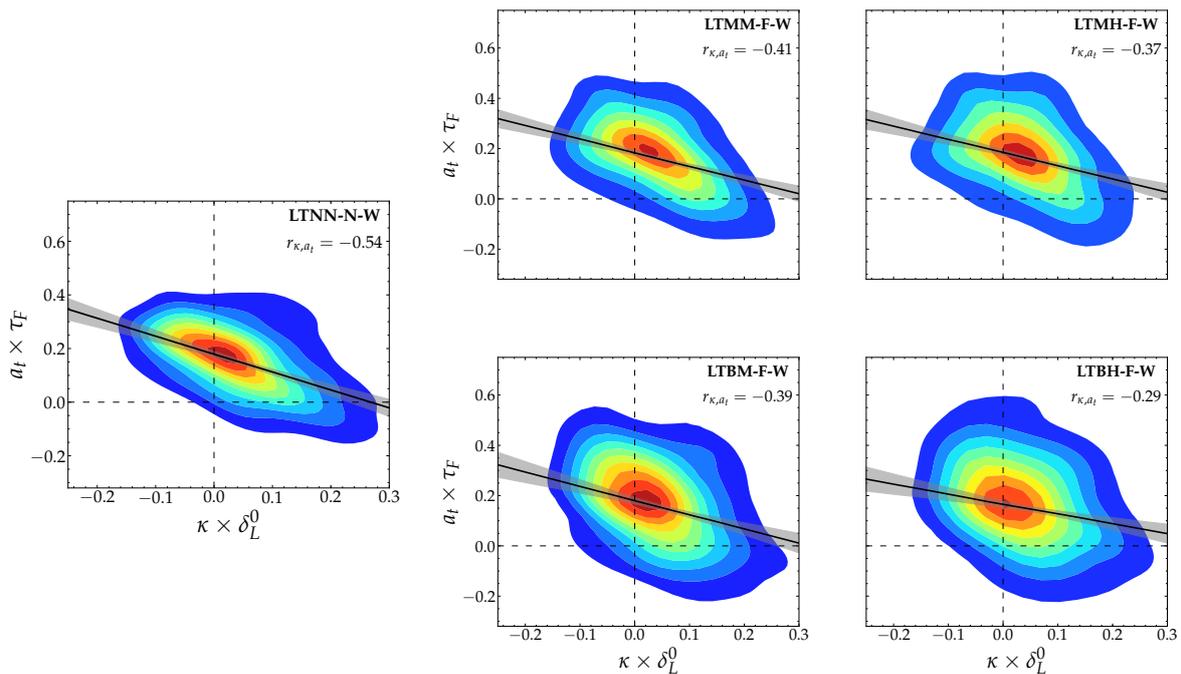


Figure 7.12 – PDF jointe de la courbure de du taux d'étirement tangentiel à l'instant $t = 5\tau_F$.

Les PDFs jointes de κ et a_t présentées ci-dessus, montrent une tendance (que l'on peut noter également sur la Figure 7.11b) consistant dans la dominance des valeurs positives dans la distribution du taux d'étirement tangentiel. Cela pourrait être signe de l'existence d'un alignement préférentiel de la flamme avec la direction de l'extension. En effet, dans le cas

1. Les coefficients de corrélations utilisés ici, correspondent à la définition de Pearson, dans laquelle, un coefficient de corrélation est entre -1 et 1. Un coefficient qui s'approche de 1 en valeur absolue est synonyme de forte corrélation entre les variables considérées, le signe de ce coefficient, quant à lui représente le signe de la corrélation

homogène, on peut observer une corrélation positive entre la vitesse de déplacement du front de flamme et a_t (cf. Figure 7.13), si bien que la vitesse de déplacement du front de flamme croît avec l'augmentation de l'étirement dans la direction de l'extension. Comme mentionné précédemment, l'introduction des hétérogénéités de composition induit un élargissement de la PDF de a_t , surtout du côté des valeurs positives. Cela aura pour effet une intensification de l'alignement entre la flamme et la direction d'extension, qui se manifeste par une augmentation du coefficient de corrélation entre S_d et a_t , surtout pour les valeurs élevées du taux de ségrégation, comme on peut le voir sur la Figure 7.13.

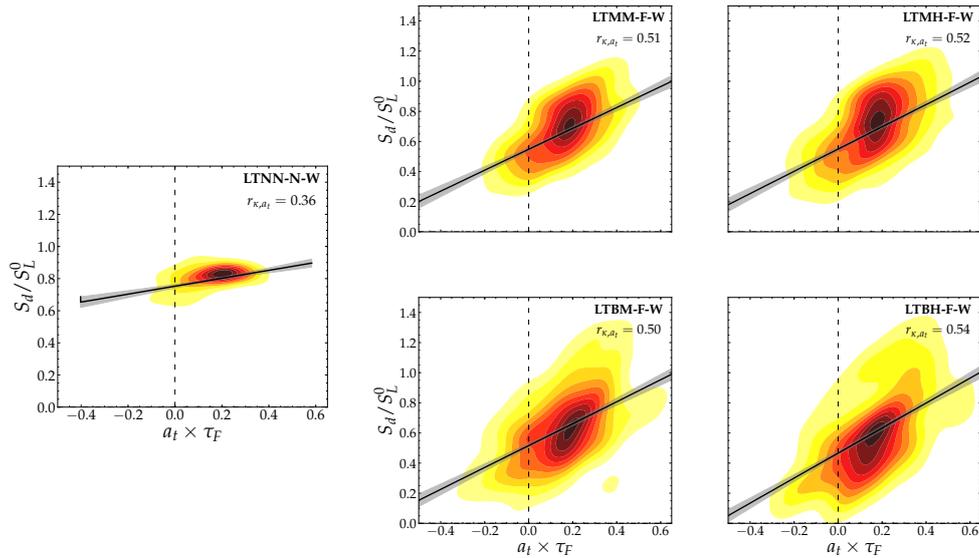


Figure 7.13 – PDF jointe de la vitesse de déplacement et du taux d'étirement tangentiel sur le front de flamme à l'instant $t = 5\tau_F$.

Ainsi, du fait de la corrélation des zones de courbure négatives par rapport aux réactifs avec la direction de l'extension, on peut s'attendre à ce que ces dernières soient celles où la propagation du front de flamme est plus rapide. Cela est illustré par les PDFs jointes de κ et S_d reportées sur la Figure 7.14, qui montre une très forte corrélation entre ces deux quantités dans le cas homogène (facteur de corrélation ≈ -0.9). Cette dernière est moins intense dans les cas hétérogènes, et elle diminue avec l'augmentation de la taille caractéristique des poches et du taux de ségrégation de la distribution de la richesse locale.

7.5.3 Bilan de la densité de surface de flamme

Jusqu'à présent, nous avons analysé les comportements des mécanismes d'étirement et de courbure du front de flamme. Toutefois, il n'a pas encore été question de quantifier leurs contributions respectives à la variation de la surface de flamme. Par ailleurs, en plus de ces deux quantités, nous avons mentionné, précédemment, l'effet de la propagation dans la modification de la surface du front de flamme. Ce dernier n'étant pas encore abordé, on se propose d'évaluer la contribution de chacun de ces trois mécanismes, par le biais de l'analyse du bilan de l'équation de transport de la fonction densité de surface de flamme (SDF). Contrairement à l'analyse ci-dessus, faite sur le front de flamme défini par l'iso-surface $c = 0.1$, l'analyse de

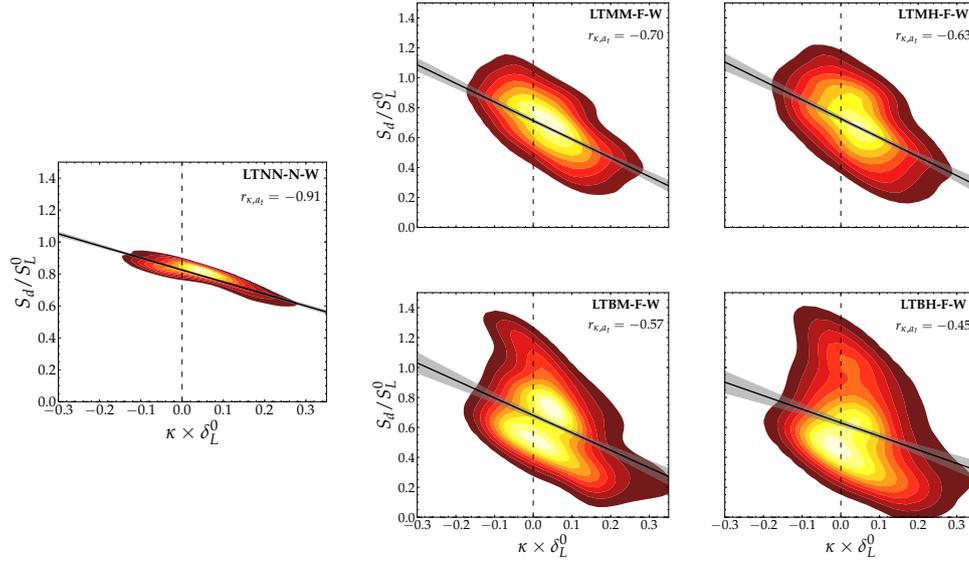


Figure 7.14 – PDF jointe de la vitesse de déplacement et de la courbure sur le front de flamme à l’instant $t = 5\tau_F$.

bilan sera réalisée sur l’ensemble de l’épaisseur de la flamme, *i.e.* sur toutes les valeurs de la variable de progrès. À titre de rappel, l’équation de transport de la SDF s’exprime comme suit :

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\sigma) = \underbrace{(\nabla \cdot \mathbf{u} - \mathbf{nn} : \nabla \mathbf{u})\sigma}_{\mathcal{T}_{\sigma,1} : \text{étirement}} + \underbrace{S_d \nabla \mathbf{n}\sigma}_{\mathcal{T}_{\sigma,2} : \text{courbure}} - \underbrace{\nabla(S_d \sigma \nabla \mathbf{n})}_{\mathcal{T}_{\sigma,3} : \text{propagation}} \quad (7.2)$$

La [Figure 7.15](#) illustre la dispersion des termes apparaissant l’équation de transport de la SDF $\|\nabla c\|$ en fonction de la variable de progrès c , pour le cas homogène LTNN-N-W à $t = 5\tau_F$. Le comportement moyen conditionné par la variable de progrès est également représenté sur la [Figure 7.15b](#). À partir de ces dernières, on note que le terme combinant les effets instationnaires et de convection (*LHS* sur la [Figure 7.15](#)), se comporte comme un terme de production du côté des gaz frais ($c < \approx 0.6$) mais en tant que terme puits vis-à-vis des produits ($c > 0.6$). En effet, avec la propagation instationnaire du front de flamme, la surface est générée au niveau du front de flamme et elle est détruite dans les produits brûlés.

Le profil du terme de propagation de la SDF est similaire (avec des signes opposés) à celui du terme combinant les effets instationnaires et de convection, leur amplitude est comparable. Cela montre que la contribution des termes d’étirement et de courbure est minimale pour la flamme homogène considérée. Ce comportement n’est pas altéré par la présence des stratifications de richesse. En effet, dans la zone des gaz frais et celle des gaz brûlés, l’ordre de grandeur des moyennes conditionnées des termes d’étirement et de courbure des flammes stratifiées est comparable à celui associé au cas homogène, et il est négligeable par rapport de propagation (*cf.* [Figure 7.16](#)). En revanche, dans la zone de transition entre les deux états, $c \approx 0.6$, les contributions de a_i et de κ atteignent leur valeur maximale qui deviennent donc comparables à l’effet de propagation. Dans cette zone et le long de toute l’épaisseur de flamme, les termes de courbure et d’étirement dans l’équation (7.2) ont des valeurs positives, et contribuent donc à la génération de la surface de la flamme par unité de volume.

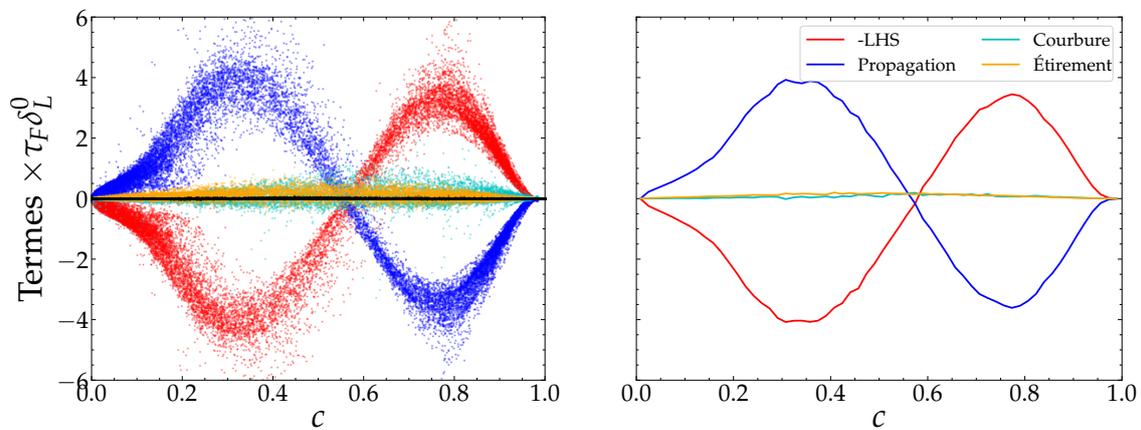


Figure 7.15 – Termes de l'équation de transport de la fonction densité de surface de flamme $\|\nabla c\|$ en fonction de la variable de progrès pour le cas *LTNN-N-W* à $t = 5\tau_F$. Les points en noir correspondent à la différence entre le premier et le second membre de l'équation (7.2). À gauche : dispersion du nuage de points, à droite : moyennes conditionnées par c .

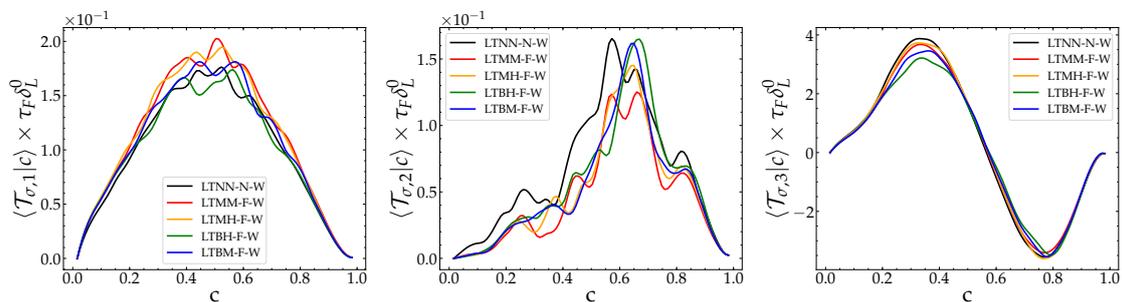


Figure 7.16 – Moyennes conditionnées des termes de l'équation de transport de la fonction densité de surface de flamme $\|\nabla c\|$ en fonction de la variable de progrès à $t = 5\tau_F$.

Dans l'ensemble, les hétérogénéités de composition modifient légèrement l'amplitude des termes associées à la courbure et à l'étirement. Cependant, le fait que la contribution de ces deux derniers demeure modérée, en comparaison de celle de la propagation, implique que la surface générée par les hétérogénéités de composition, n'est pas due, au premier ordre, à la modification du comportement de ces deux mécanismes, mais plutôt, au mécanisme de la propagation via la vitesse de déplacement.

7.6 Analyse de la vitesse de déplacement du front de flamme

Que cela porte sur la propagation préférentielle, sur le plissement du front de flamme, ou encore sur la génération de la surface de la flamme, les analyses précédentes ont montré que les effets potentiels de la stratification en richesse se manifestent par la modification du comportement de la vitesse de déplacement. En particulier, l'analyse de cette quantité a été réalisée en considérant son évolution pour une iso-valeur de la variable de progrès qui, dans notre cas, fait référence au front de flamme. En guise de récapitulatif, il a été montré qu'en présence de la stratification, la PDF de la vitesse de déplacement du front de flamme s'élargit, compte tenu de la variation des valeurs de la fraction de mélange locale, (cf. Figure 7.17a). Il a été mentionné également que la distribution de cette dernière a tendance à évoluer dans le sens où ses valeurs diminuent, causant ainsi la réduction de la vitesse de déplacement sur le front de flamme au fur et à mesure de l'expansion du noyau de flamme, comme illustré sur la (Figure 7.17b). De surcroît, il a été noté que ce phénomène s'accroît avec l'augmentation de l'échelle de longueur caractéristique des hétérogénéités.

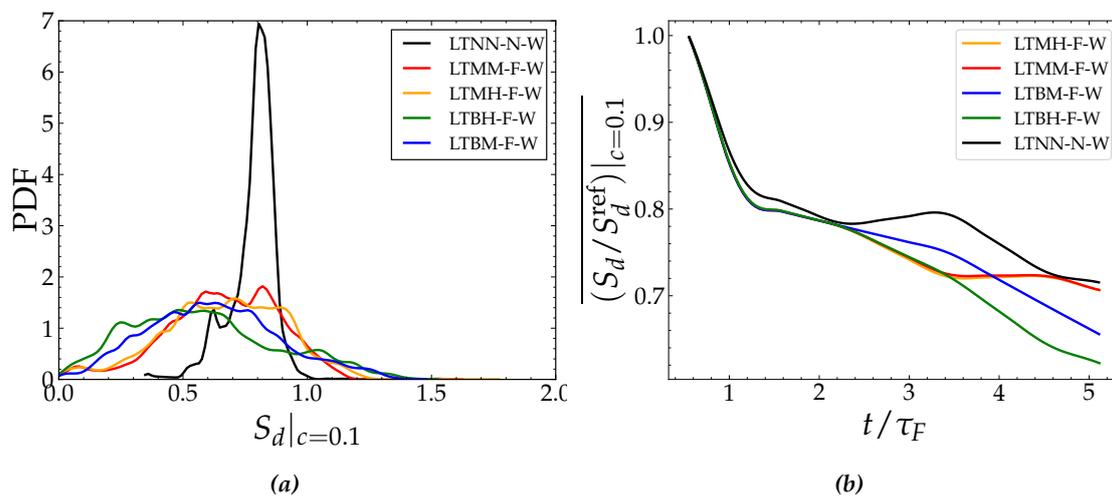


Figure 7.17 – Impact des hétérogénéités de composition sur la vitesse de déplacement du front de flamme (iso- $c=0.1$). À gauche : PDF à l'instant $t = 5\tau_F$, à droite : évolution temporelle.

7.6.1 Effet de la diffusion différentielle

À présent, on se propose d'étudier l'influence des hétérogénéités de composition sur l'évolution de la vitesse de déplacement, non seulement sur une iso-valeur de la variable de pro-

grès, mais sur toute l'étendue de la flamme. Pour y parvenir, les différentes composantes de la vitesse de déplacement seront analysées par la suite. Ces composantes étant basées sur celles de la variable de progrès, il convient d'abord d'examiner le comportement de ces dernières, via l'analyse de leur poids dans le bilan représenté par l'équation de transport de c , dont l'expression est rappelée ci-après :

$$\rho \frac{Dc}{Dt} = \underbrace{\nabla(\rho D_c \nabla c)}_{\mathcal{T}_{c,1}} + \underbrace{\dot{\omega}_c}_{\mathcal{T}_{c,2}} + \underbrace{\mathcal{A}_{\xi} c \chi_{\xi}}_{\mathcal{T}_{c,3}} + \underbrace{2\mathcal{B}_{\xi} \chi_{c,\xi}}_{\mathcal{T}_{c,4}} + \underbrace{\frac{\mathcal{B}_{\xi} c}{\rho} \nabla [\rho(D_c - D_{\xi}) \nabla \xi]}_{\mathcal{T}_{c,5}} \quad (7.3)$$

avec, pour la définition de la variable de progrès retenue, *i.e.*, $c = (Y_{\text{CO}_2} + Y_{\text{CO}}) / (Y_{\text{CO}_2}^{eq} + Y_{\text{CO}}^{eq})$:

$$\mathcal{Y}^{eq} = Y_{\text{CO}_2}^{eq} + Y_{\text{CO}}^{eq} \quad , \quad \dot{\omega}_c = (\dot{\omega}_{\text{CO}_2} + \dot{\omega}_{\text{CO}}) / \mathcal{Y}^{eq}$$

$$\mathcal{A}_{\xi} = \frac{\rho}{\mathcal{Y}^{eq}} \frac{d^2 \mathcal{Y}^{eq}}{d\xi^2} \quad , \quad \mathcal{B}_{\xi} = \frac{\rho}{\mathcal{Y}^{eq}} \frac{d\mathcal{Y}^{eq}}{d\xi}$$

Dans l'équation (7.3), les termes $\mathcal{T}_{c,i}$ (avec i allant de 1 à 5) représentent respectivement, (1) les effets de diffusion, (2) de réaction, (3) de dissipation scalaire de la fraction de mélange, (4) de dissipation scalaire croisée de la variable de progrès et de la fraction de mélange et enfin (5) les effets associés à la diffusion différentielle entre c et ξ .

Un exemple d'un tel bilan est fourni sur la [Figure 7.18a](#) pour la configuration LTBH-F-W. La fermeture de ce bilan est un indicateur du respect du niveau de précision requis dans la simulation et la procédure de post-traitement. La [Figure 7.18c](#) montre l'erreur résiduelle résultant de la fermeture du bilan de la variable de progrès conformément à l'équation (7.3). L'erreur numérique présente dans le calcul considéré est nettement inférieure (d'environ trois ordres de grandeur) au plus petit terme mis en jeu dans l'équation.

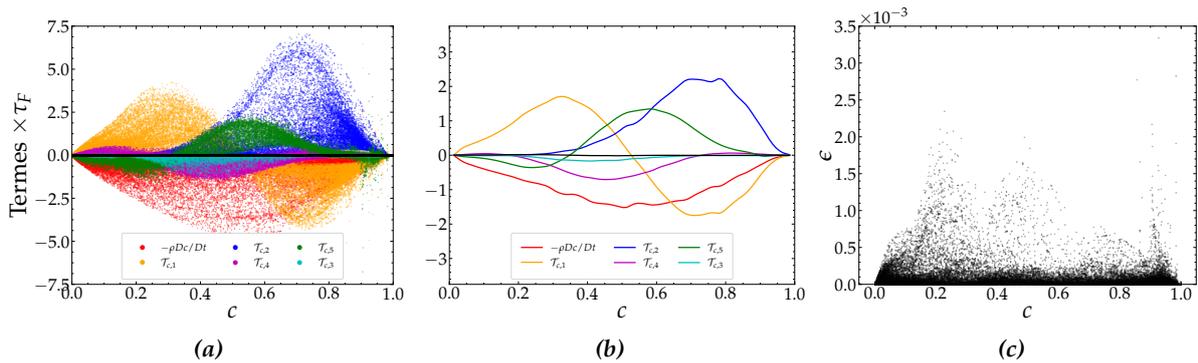


Figure 7.18 – Bilan de l'équation de transport de la variable de progrès c pour le cas LTBH-F-W à $t = 5\tau_F$. À gauche : dispersion du nuage de points, au milieu : moyennes conditionnées par c , à droite : résidu du bilan.

À partir des figures 7.18a et 7.18b, on note la prédominance du terme de réaction $\mathcal{T}_{c,2}$, qui est bien évidemment un terme de production, dans cette équation. Par ordre de poids, le terme de diffusion, $\mathcal{T}_{c,1}$, arrive après ce dernier, et se comporte comme un terme de pro-

duction du côté des réactifs jusqu'à $c \approx 0.5$, point au-delà duquel il intervient en tant qu'un terme de destruction, avec une intensité comparable à celle du terme réactif. Le rôle du mécanisme associé à la dissipation scalaire de la fraction de mélange, $\mathcal{T}_{c,3}$ reste quant à lui modéré par rapport aux autres contributions, en particulier celle associée à la dissipation scalaire croisée $\mathcal{T}_{c,4}$, dont l'amplitude n'est significative que sur une plage relativement réduite de la variable de progrès ([0.2,0.7]). Cela est attribué au fait que la somme des fractions massiques à l'équilibre des espèces impliqués dans la définition de c , *i.e.* $\mathcal{Y}^{eq} = Y_{\text{CO}_2}^{eq} + Y_{\text{CO}}^{eq}$, correspond à une fonction quasi affine de la fraction de mélange dans les conditions retenues, c'est à dire $\mathcal{Y}^{eq} = f(\xi) \approx \alpha\xi + \beta$, où α et β des coefficients constants. La Figure 7.19 illustre cet effet qui a été également discuté par Bray *et al.* [61]. Enfin, il est important de souligner que le terme exprimant les effets résultant de la diffusion différentielle des espèces $\mathcal{T}_{c,5}$ présente un poids non négligeable dans le bilan de la variable de progrès avec une amplitude comparable, dans certaines zones, à celles des termes diffusif et réactif.

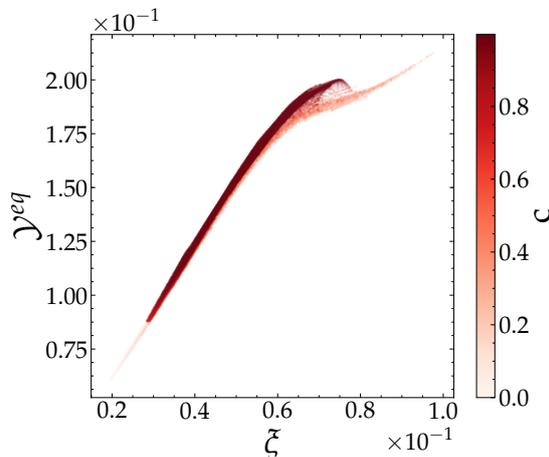


Figure 7.19 – Somme des fractions massiques de CO et CO₂ à l'équilibre en fonction de la fraction de mélange pour le cas LTBH-F-W à l'instant $t = 5\tau_F$.

L'effet associé à la diffusion différentielle exprimée ici via le terme $\mathcal{T}_{c,5}$ est souvent négligé, en l'occurrence dans les études antérieures portant sur les effets de la stratification sur la propagation de la flamme. En effet, dans ces dernières, l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire est souvent adoptée. Cela ne se traduit pas seulement par une égalité des effets de diffusion moléculaire et de diffusion thermique, mais aussi par une hypothèse selon laquelle toutes les espèces diffusent à l'échelle moléculaire de la même manière, impliquant, ainsi, la suppression du terme $\mathcal{T}_{c,5}$ de l'équation (7.3).

Dans la présente étude, la considération de cet effet a été motivée par le fait que les valeurs du nombre de Lewis du combustible considéré, ainsi que les espèces à partir desquelles la variable de progrès est construite, sont très différents de l'unité (*cf.* Figure 7.20a), montrant ainsi que cette hypothèse ne peut pas être adoptée, compte tenu que la fermeture du bilan Eq.(7.3) ne peut pas être obtenue avec une telle approximation. En outre, sur la base de calculs de flammes laminaires mono-dimensionnelles, une différence assez prononcée au niveau de la vitesse de propagation a été relevée en comparant les valeurs obtenues par l'approche basée sur l'approximation Hirschelder-Curtiss [11] et celles calculées en adoptant le formalisme d'un nombre de Lewis unitaire, notamment dans la plage de richesses considérées dans les

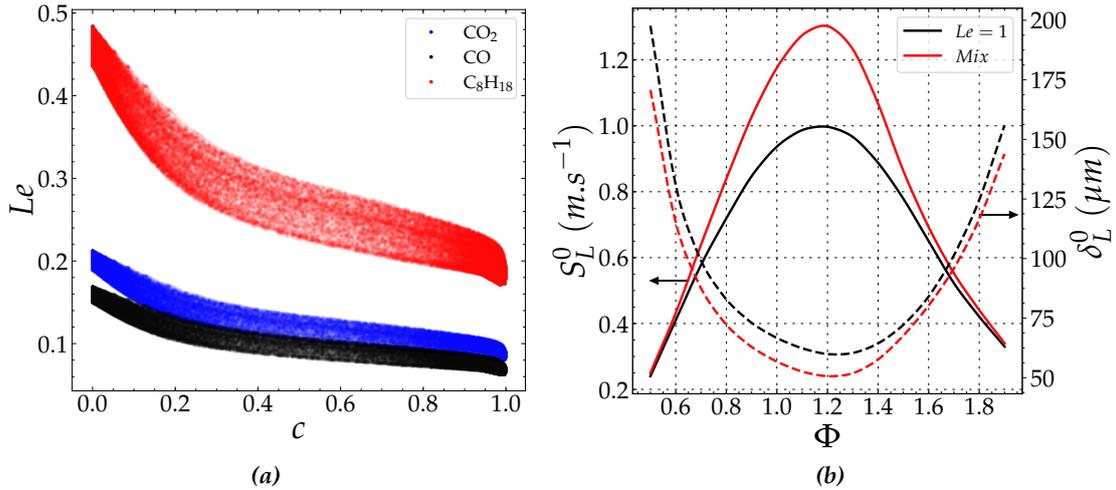


Figure 7.20 – Influence de l'hypothèse du nombre de Lewis unitaire. À gauche : Evolution du nombre de Lewis du combustible, de CO et de CO_2 en fonction de la variable de progrès pour le cas LTBH-F-W à l'instant $t = 5\tau_F$, à droite : Profils de la vitesse et de l'épaisseur de flamme laminaire dans les plages de variations considérées.

configurations de notre étude (cf. Figure 7.20b). Une conséquence directe de l'omission des effets de la diffusion différentielle serait une sous-estimation de la différence des vitesses de propagation locales et par conséquent une diminution de l'effet de plissement supplémentaire introduit par les hétérogénéités.

7.6.2 Analyse du bilan de la vitesse de déplacement

En décomposant la contribution de la diffusion dans l'équation de transport de la variable de progrès Eq.(7.3), en sa composante normale et sa composante tangentielle, il est possible de décomposer la vitesse de déplacement suivant :

$$\begin{aligned}
 S_d = & \underbrace{-\mathcal{L}\mathbf{n} \cdot \nabla(\rho D_c \|\nabla c\|)}_{\mathcal{T}_{S_d,1}} + \underbrace{-2\mathcal{L}D_c\kappa}_{\mathcal{T}_{S_d,2}} + \underbrace{\mathcal{L}\dot{\omega}_c}_{\mathcal{T}_{S_d,3}} \\
 & + \underbrace{\mathcal{L}\mathcal{A}_{\xi}c\chi_{\xi}}_{\mathcal{T}_{S_d,4}} + \underbrace{2\mathcal{L}\mathcal{B}_{\xi}\chi_{c,\xi}}_{\mathcal{T}_{S_d,5}} + \underbrace{\mathcal{L}\frac{\mathcal{B}_{\xi}c}{\rho}\nabla[\rho(D_c - D_{\xi})\nabla\xi]}_{\mathcal{T}_{S_d,6}}
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

avec : $\mathcal{L}^{-1} = \rho\|\nabla c\|$.

D'après l'analyse précédente portant sur le bilan de la variable de progrès, il est clair que les termes $\mathcal{T}_{S_d,4}$ et $\mathcal{T}_{S_d,5}$ sont d'amplitude plus faible par rapport au termes réactif $\mathcal{T}_{S_d,3}$, de diffusion différentielle $\mathcal{T}_{S_d,6}$ et de la somme des termes diffusifs $\mathcal{T}_{S_d,1}$ et $\mathcal{T}_{S_d,2}$. Ce dernier, lié à la courbure, a été étudié précédemment en se basant sur la fonction de densité de surface de flamme, et il a été démontré que son effet reste relativement modéré aux autres mécanismes. Ainsi, il est attendu que les composantes $\mathcal{T}_{S_d,1}$, $\mathcal{T}_{S_d,3}$ et $\mathcal{T}_{S_d,6}$ soient dominantes dans le bilan de la vitesse de déplacement. Une illustration de cette tendance est donnée par la Figure 7.21

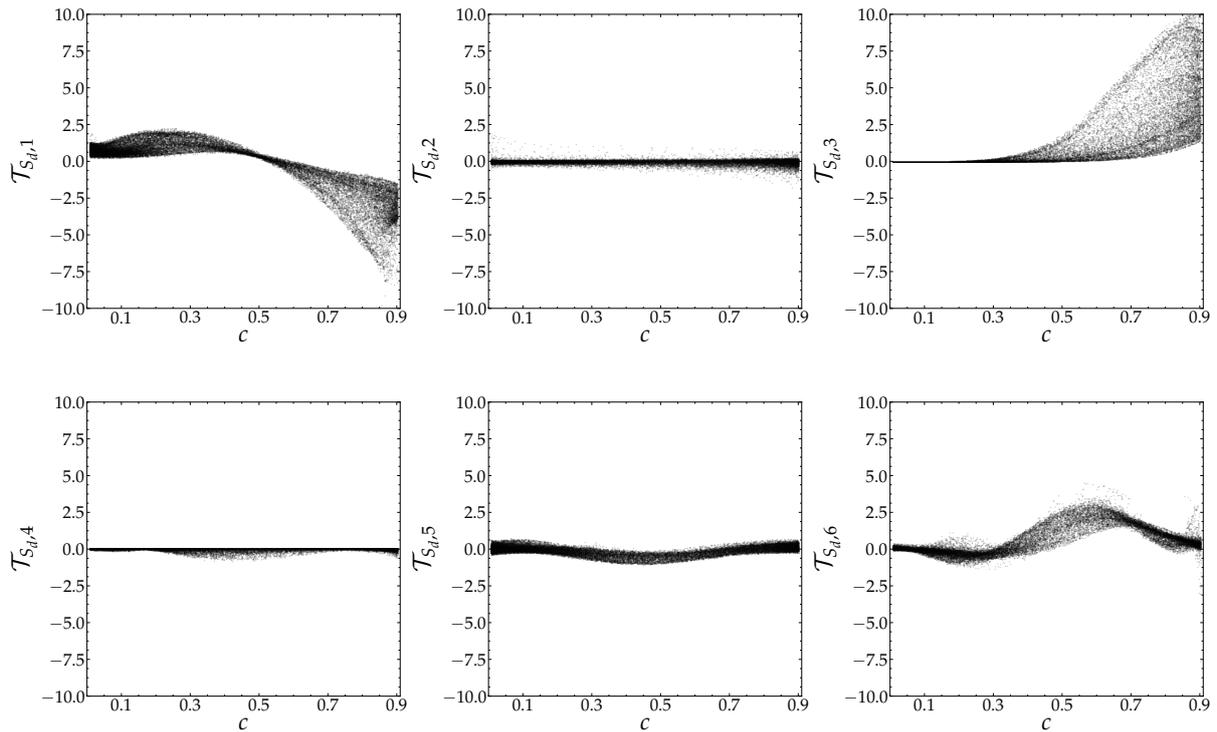


Figure 7.21 – Évolution des composantes de la vitesse de déplacement en fonction de la variable de progrès pour le cas LTBH-F-W à l’instant $t = 5\tau_F$.

qui regroupe les évolutions respectives de chacune des dites composantes en fonction de la variable de progrès pour le cas LTBH-F-W.

L’importance relative de chaque composante étant mise en évidence, l’étude de l’influence des hétérogénéités de composition sur la vitesse de déplacement sera limitée dans la suite aux trois termes dominants dans le bilan de la vitesse de déplacement. Cela sera réalisé via la comparaison de l’évolution de chaque composante sur des iso-valeurs de c représentatives des trois zones de la flamme : zone de préchauffage, zone de réaction et la zone correspondant aux gaz brûlés.

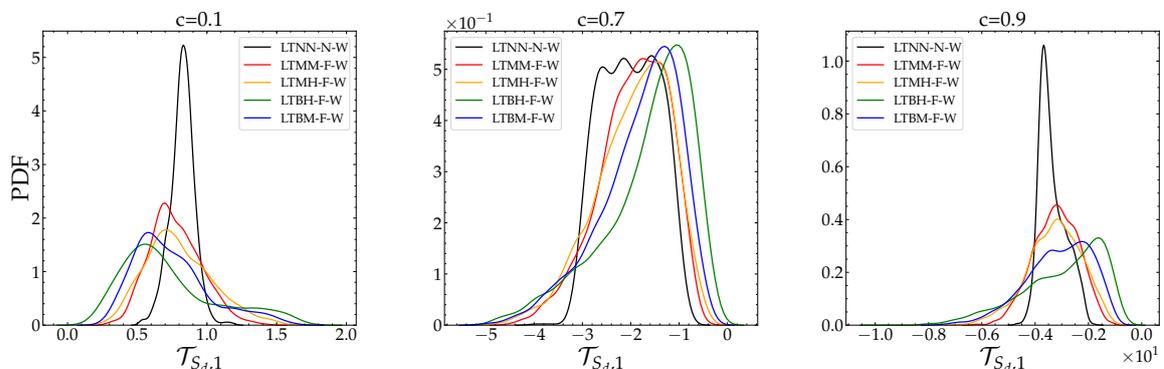
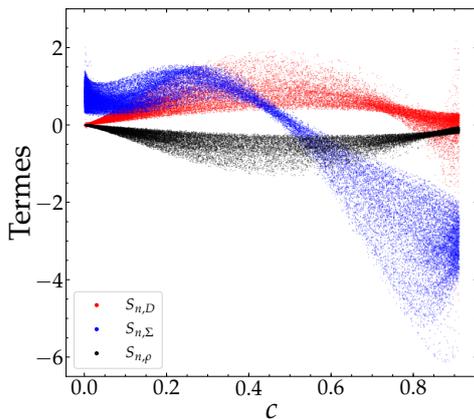


Figure 7.22 – Évolution de la PDF de la composante normale de la vitesse de déplacement pour trois niveaux de la variable de progrès à l’instant $t = 5\tau_F$.

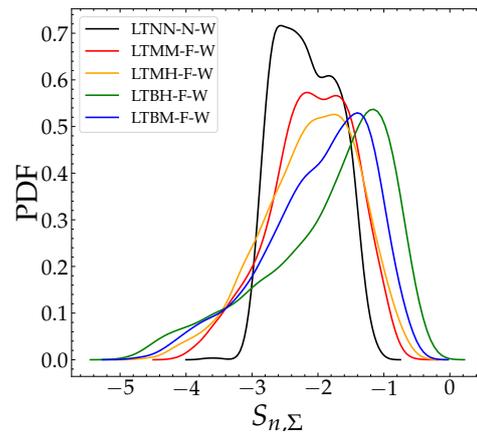
L'évolution de la PDF de la composante normale de la vitesse de déplacement sur trois niveaux de la variable de progrès, à l'instant $t = 5\tau_F$, pour l'ensemble des flammes considérées est reportée sur la [Figure 7.22](#). Du côté des gaz frais, l'élargissement de la PDF de la composante normale de S_d se fait de part et d'autre de la valeur moyenne de $\mathcal{T}_{S_d,1}$ associé à la condition homogène, avec plus d'excursion du côté des valeurs supérieures à partir de celle-ci. Néanmoins, la valeur la plus probable de $\mathcal{T}_{S_d,1}$ dans les flammes stratifiées diminue par rapport à son homologue homogène, avec l'accroissement de la longueur caractéristique de la distribution de richesse locale. L'effet du taux de ségrégation sur cette diminution de $\mathcal{T}_{S_d,1}$ reste, quant à lui, faiblement prononcé à ce stade. Cependant, pour les valeurs de c supérieures, *i.e.*, $c = 0.7$ et $c = 0.9$, où $\mathcal{T}_{S_d,1}$ change de signe pour devenir négatif, un comportement opposé au précédent est observé : les hétérogénéités de richesse tendent à augmenter la valeur de cette vitesse et cet effet est intensifié par l'augmentation de la taille des poches et légèrement impacté par l'accroissement de l'intensité des hétérogénéités. Il est à noter que la vitesse de déplacement normale du front de flamme $\mathcal{T}_{S_d,1}$ se décompose également en trois contributions représentant les effets de variations (i) du coefficient de diffusion, (ii) de la masse volumique, et (iii) de la densité de surface de flamme, ce qui s'exprime comme suit :

$$\mathcal{T}_{S_d,1} = \underbrace{-\mathbf{n} \cdot \nabla(D_c)}_{S_{n,D}} + \underbrace{-\mathbf{n} \cdot D_c \nabla \ln(\rho)}_{S_{n,\rho}} + \underbrace{-\mathbf{n} \cdot D_c \nabla \ln(\|\nabla c\|)}_{S_{n,\Sigma}} \quad (7.5)$$

Une évolution typique des contributions $S_{n,D}$, $S_{n,\rho}$ et $S_{n,\Sigma}$ est donnée sur la [Figure 7.23a](#). Sur toute l'étendue de la flamme, les amplitudes des contributions $S_{n,D}$ et $S_{n,\rho}$ sont comparables et de signes opposés. Ainsi, le terme lié aux variations de la densité de surface $S_{n,\Sigma}$ se présente comme la contribution dominante dans la vitesse de déplacement normale. Cela est notable également sur la PDF de $S_{n,\Sigma}$, *cf.* [Figure 7.23b](#) sur l'iso-valeur $c = 0.7$, qui est suffisamment similaire à celle montrée sur la [Figure 7.22a](#), pour conforter la prédominance des effets de variation de la densité de surface de flamme dans la propagation normale.



(a) Illustration des contributions relatives aux variations de la surface, de la densité et de la diffusion, dans la vitesse normale, pour le cas LTBH-F-W à l'instant $t = 5\tau_F$.



(b) PDF de la contribution liée aux variations de la densité de surface de flamme dans la vitesse de déplacement normale sur l'iso-contour $c = 0.7$

Par ailleurs, un déplacement de la distribution de la fraction de mélange vers des valeurs

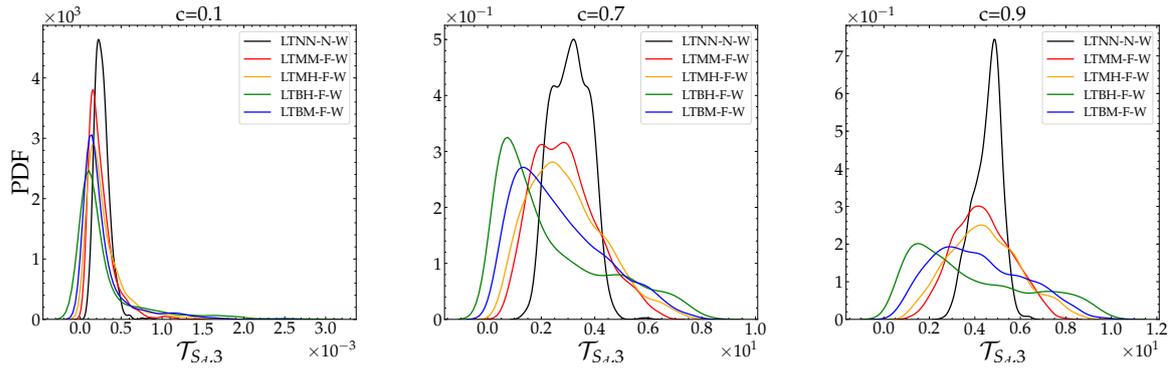


Figure 7.23 – Évolution de la PDF de la composante réactive de la vitesse de déplacement pour trois niveaux de la variable de progrès à l’instant $t = 5\tau_F$.

plus faibles a été mis en évidence précédemment. Ce dernier entraîne une diminution de la vitesse de propagation par la diminution des taux de réaction notamment ceux de CO et CO_2 , et réduit donc, la composante réactive de S_d . Il a été montré également, que cet effet de réduction est accentué dans les stratifications à grandes échelles caractéristiques, ce que l’on retrouve encore dans les résultats reportés sur la [Figure 7.23](#).

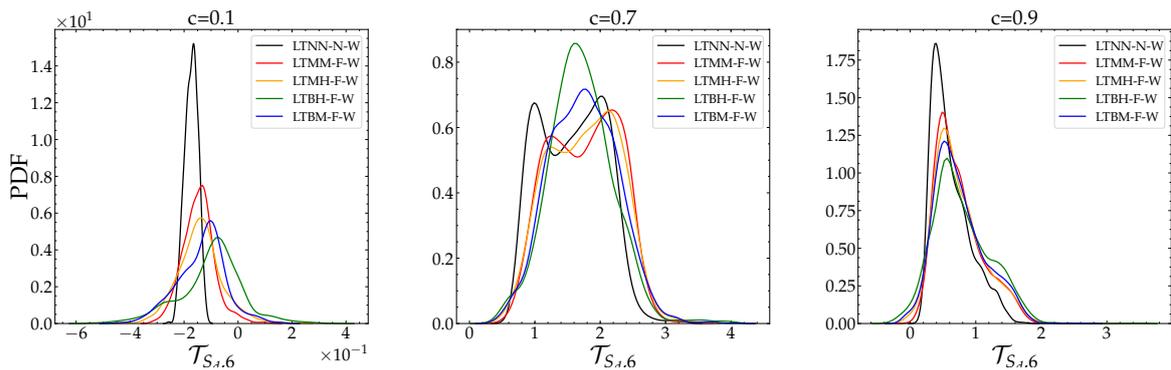


Figure 7.24 – Évolution de la PDF de la composante de diffusion différentielle de la vitesse de déplacement pour trois niveaux de la variable de progrès à l’instant $t = 5\tau_F$.

Enfin, dans la zone de préchauffage et dans les gaz brûlés, la composante de la diffusion différentielle présente des PDFs plus larges dans les flammes stratifiées que dans le cas homogène. Les valeurs médianes de $\mathcal{T}_{S_{i,6}}$ ont tendance à augmenter avec l’introduction des hétérogénéités de composition, surtout, lorsque l’échelle de longueur caractéristique à ces derniers est relativement grande (cf. [Figure 7.24](#)). Cette tendance n’est pas perceptible dans la zone de réaction, *i.e.*, $c = 0.7$.

Après l’analyse portant sur l’influence des hétérogénéités de composition sur les composantes dominantes de la vitesse de déplacement, au niveau du front de flamme, de la zone de réaction et dans les gaz brûlés, une estimation plus quantitative est proposée. Cette dernière se base sur la mesure de la moyenne des déviations de ces quantités par rapport au cas homogène tout le long de la zone de la flamme.

La [Figure 7.25](#) présente les déviations relatives moyennes des composantes normale, ré-

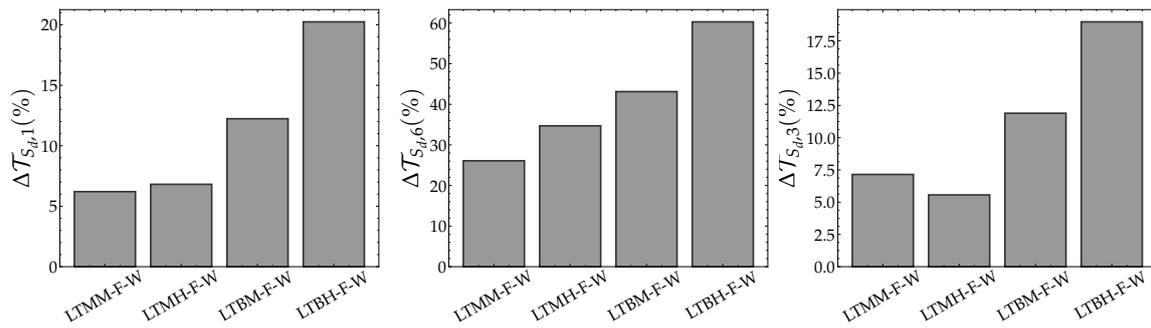


Figure 7.25 – Déviations relatives moyennes des composantes normale (à gauche), réactive (à droite) et de diffusion différentielle (au milieu) par rapport à leurs contreparties homogènes à l’instant $t = 5\tau_F$.

active et de diffusion différentielle par rapport à leurs contreparties homogènes à l’instant $t = 5\tau_F$. À l’exception de la déviation de la composante réactive du cas LTMH-F-W, on peut noter que les déviations relatives des quantités observées augmentent avec la taille caractéristique et le taux de ségrégation. En outre, on continue à noter l’effet dominant de L_Φ par rapport à celui de S_Φ , qui se traduit par des déviations relatives plus importantes. De plus, il est notable que la vitesse de déplacement normale et en particulier la contribution de la diffusion, sont plus sensibles aux stratifications de richesse que le terme de réaction. Cependant, la sensibilité de $\mathcal{T}_{S_d,1}$ et $\mathcal{T}_{S_d,1}$ aux hétérogénéités est *occultée* dans le bilan global *i.e.* S_d compte tenu du poids important du terme réactif dans le bilan de la vitesse de déplacement.

7.7 Structure locale de flamme

Nous allons nous intéresser maintenant à l’effet de la présence de la stratification en richesse sur la structure de la flamme. Cet effet peut être étudié à partir d’une analyse des modifications éventuelles de la fonction densité de surface de flamme induites par la présence des hétérogénéités. La [Figure 7.26](#) montre la dispersion de cette grandeur normalisée par l’épaisseur de flamme laminaire δ_L^0 en fonction de la variable de progrès à l’instant $t = 5\tau_F$. Nous pouvons noter sur cette figure une augmentation des fluctuations de la SDF $\|\nabla c\|$ autour de son profil moyen conditionné par c lorsque les hétérogénéités sont introduites. Comme pour les autres grandeurs locales étudiées précédemment, cette dispersion augmente avec le taux de ségrégation. Néanmoins, il a été remarqué que $\langle \|\nabla c\| | c \rangle$ diminue, légèrement, dans les flammes stratifiées en comparaison à la flamme homogène. Cette diminution augmente plus sensiblement avec la taille caractéristique.

La dispersion des valeurs de la SDF, notamment sur l’iso-valeur de c associé au maximum de $\|\nabla c\|$, indique que la flamme a une épaisseur variable. Compte tenu des dispersions observées, les hétérogénéités de composition ont pour effet l’élargissement du domaine de variation de l’épaisseur locale de flamme. Cela est conforté par les PDFs des épaisseurs mesurées dans les deux configurations stratifiées et homogène, et qui sont reportées sur la [Figure 7.27](#). En effet, les PDFs sont d’autant plus larges dans les flammes stratifiées que la taille caractéristique et le taux de ségrégation sont élevés. Cet effet a été également documenté dans le

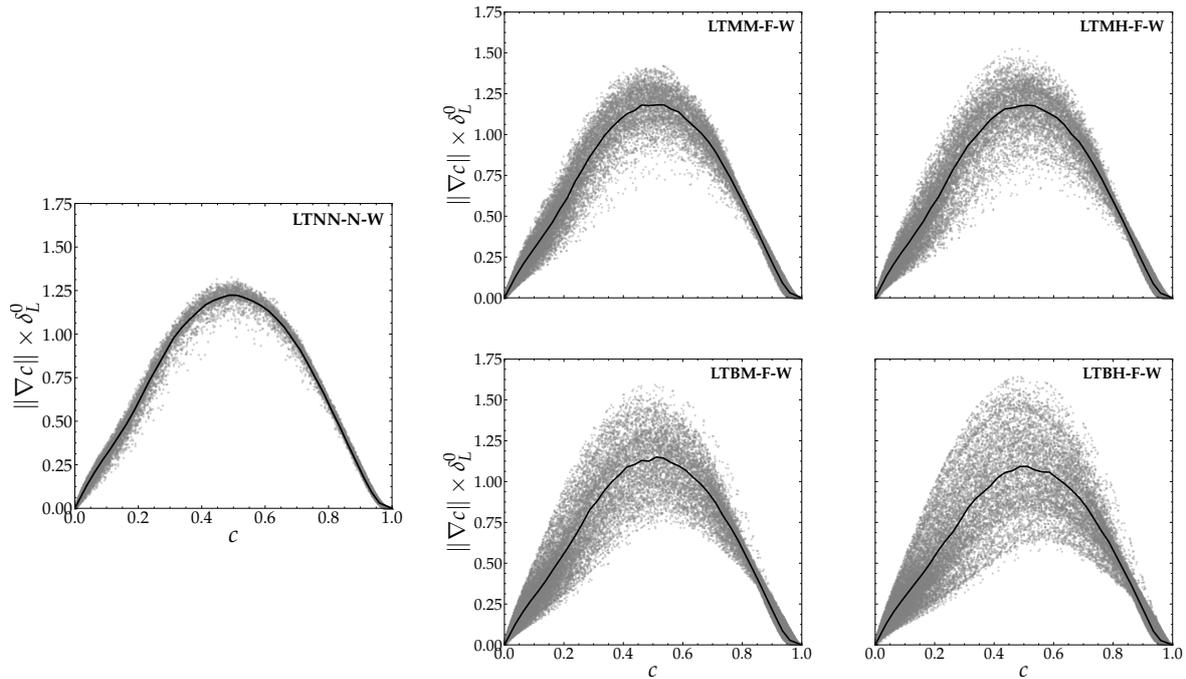


Figure 7.26 – Dispersion de la fonction densité de surface de flamme en fonction de la variable de progrès pour à l'instant $t = 5\tau_F$. Ligne noire : moyenne conditionnée de $\|\nabla c\|$ par c .

chapitre dédié à l'étude des flammes laminaires, où il était plus prononcé. Par ailleurs, les valeurs moyennes des épaisseurs mesurées dans les flammes stratifiées sont légèrement supérieures à celle de la flamme homogène, ce qui est en accord avec le fait que $\langle \|\nabla c\| | c \rangle$ diminue légèrement en présence des hétérogénéités.

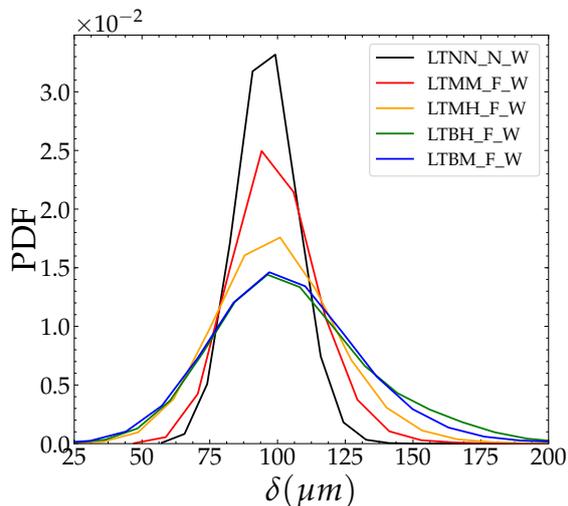
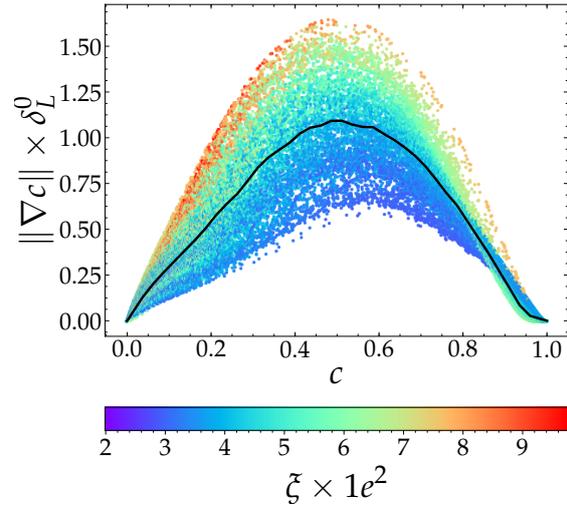


Figure 7.27 – PDFs des épaisseurs de flammes, obtenues par des considérations géométriques, à l'instant $t = 5\tau_F$.

Cet effet d'épaississement est attribué en raison de l'effet, précédemment décrit, de la prédominance des valeurs plus pauvres que la richesse moyenne au niveau du front de flamme. Comme illustré sur la [Figure 7.28](#) qui présente la dispersion de la fonction densité de surface de flamme en fonction de la variable de progrès pour le cas LTBH-F-W à l'instant $t = 5\tau_F$. Ces dernières ont tendance à augmenter l'épaisseur de flamme et diminuer $\|\nabla c\|$. Le fait que ce phénomène s'accroît avec l'augmentation de l'échelle de longueur caractéristique et du taux

de ségrégation, induit un épaississement de flamme plus important.

Figure 7.28 – Dispersion de la fonction densité de surface de flamme en fonction de la variable de progrès pour le cas LTBH-F-W à l'instant $t = 5\tau_F$. Ligne noire : moyenne conditionnée de $\|\nabla c\|$ par c .



7.8 Analyse du mélange turbulent

Du fait de son lien direct avec la fonction densité de surface $\|\nabla c\|$, le taux de dissipation scalaire de la variable de progrès $\chi_c = D_c \|\nabla c\|^2$ est également susceptible d'être influencé par les hétérogénéités de composition. La Figure 7.29 présente la dispersion du taux de dissipation scalaire, normalisé par τ_F , en fonction de la variable de progrès à l'instant $t = 5\tau_F$. Comme cela a été observé pour $\|\nabla c\|$, la dispersion de χ_c est plus large comparée à celle observée dans le cas homogène, et cela est intensifié par l'augmentation de la taille caractéristique ou le taux de ségrégation des hétérogénéités. Cette dispersion montre une variation des échelles de temps caractéristiques de décroissance des fluctuations c par micromélange turbulent. Or, ces dernières sont d'autant plus grandes (*i.e.*, χ_c décroît) que l'échelle de longueur caractéristique et la variance du champ scalaire associé sont élevées, ce qui explique les tendances observées.

On a vu précédemment, dans l'équation de la fonction densité de surface $\|\nabla c\|$ que l'impact des hétérogénéités sur cette quantité a été attribué au terme de propagation, *i.e.*, $\nabla(S_d \sigma \nabla \mathbf{n})$, on peut donc s'attendre à ce que cette conclusion soit valide pour le taux de dissipation scalaire. Pour vérifier ce prédicat, on se propose d'examiner le bilan de χ_c qui s'exprime comme suit :

$$\rho \frac{D\chi_c}{Dt} = \underbrace{-2\rho D_c \nabla c \nabla c : \nabla \mathbf{u}}_{\mathcal{T}_{\chi_c,1}} + \underbrace{4\rho S_d \kappa \chi_c}_{\mathcal{T}_{\chi_c,2}} + \underbrace{2S_d \mathbf{n} \cdot \nabla \rho \chi_c}_{\mathcal{T}_{\chi_c,3}} - \underbrace{2\frac{1}{\sigma} \nabla(\rho S_d \sigma \mathbf{n}) \chi_c}_{\mathcal{T}_{\chi_c,4}} + \underbrace{\rho \frac{D \ln(D_c)}{Dt} \chi_c}_{\mathcal{T}_{\chi_c,5}} \quad (7.6)$$

les termes $\mathcal{T}_{\chi_c,i}$ désignent respectivement l'interaction turbulence scalaire (TSI), les effets combinés de propagation et de courbure, d'expansion thermique, de convection du front de flamme due à la propagation normale et enfin l'influence des variations de la diffusivité moléculaire. Certains de ces termes ont été déjà analysés dans le contexte géométrique de la SDF, tel que le terme de courbure dont le poids était négligeable dans le bilan de $\|\nabla c\|$. Dans le bilan

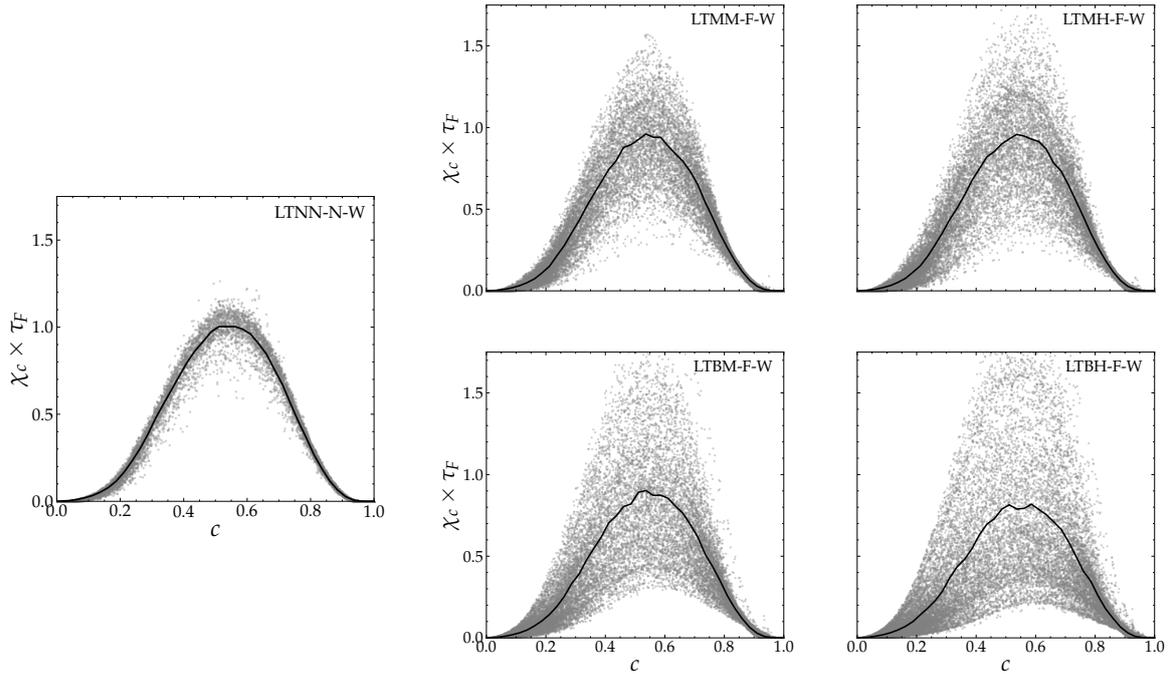


Figure 7.29 – Dispersion du taux de dissipation scalaire en fonction de la variable de progrès à l'instant $t = 5\tau_F$. Ligne noire : moyenne conditionnée de χ_c par c .

de χ_c ce dernier est également de faible poids, tout comme les termes d'expansion thermique et de variation de la diffusivité moléculaire (cf. Figure 7.30). Ainsi, le SDR est principalement régi par (i) les effets de convections par propagation normale et (ii) la contribution dissipative représentée par le terme d'interaction turbulence scalaire (TSI). Il peut être établi que seule la partie symétrique S_{ij} du tenseur des gradients de vitesse contribue à ce terme. Dès lors, il est classique d'analyser la contribution de ce terme dans l'espace des vecteurs propres du tenseur des taux de déformations S_{ij} . Ce terme a été étudié de manière exhaustive dans le contexte de la combustion turbulente qu'elle soit pré-mélangée ou non à travers l'analyse de la variable de progrès pour les conditions pré-mélangées. Toutefois, il a été moins étudié du point de vue de la fraction de mélange pour les conditions non pré-mélangées.

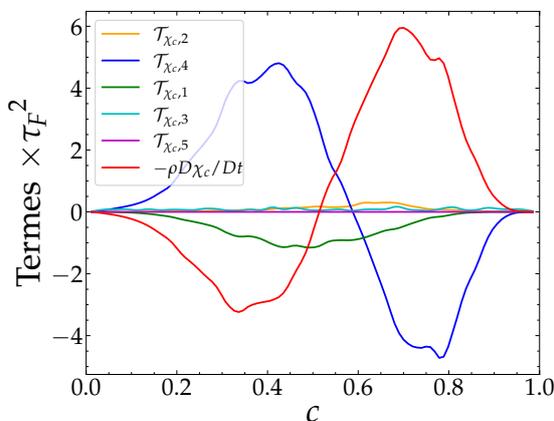
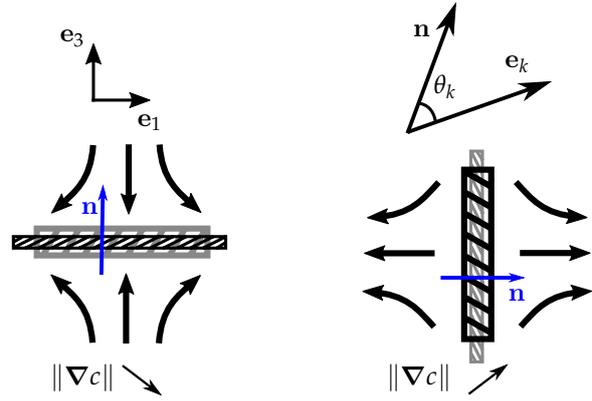


Figure 7.30 – bilan de l'équation de transport du taux de dissipation scalaire χ_c conditionné par c pour le cas LTBH-F-W à $t = 5\tau_F$.

Le comportement du terme TSI est principalement déterminé par l'alignement entre ∇c et

Figure 7.31 – Schématisation de l'action du champ de vitesse sur le champ scalaire.



les taux de déformations principaux locaux, ce qui s'exprime comme suit :

$$\mathcal{T}_{\chi_c,1} = -2\rho D_c \nabla c \nabla c : \nabla \mathbf{u} = -2\rho \chi_c \sum_{k=1}^{dim} \lambda_k \cos^2(\theta_k) \quad (7.7)$$

où λ_k sont les valeurs propres du tenseur des taux de déformation S_{ij} dont la plus grande λ_1 et la plus petite λ_3 indiquent respectivement les directions principales d'étirement e_1 et de compression e_3 ². θ_1 et θ_3 représentent les angles entre ∇c et les vecteurs propres associés aux directions d'extension et de compression respectivement. Par conséquent, l'alignement de ∇c suivant une direction de déformation principale peut être caractérisé par l'amplitude du cosinus de l'angle entre le gradient scalaire et le vecteur propre correspondant à la composante principale en question.

En effet, La [Figure 7.31](#) illustre l'influence de ces orientations sur l'amplitude de ∇c . Lorsque le gradient scalaire est aligné avec la direction principale de compression e_3 , l'épaisseur caractéristique de la couche de scalaire c tend à diminuer ce qui entraîne l'augmentation du gradient ainsi que du SDR. Inversement, si le gradient ∇c s'aligne avec la direction principale d'étirement, la norme du gradient tend à décroître. Autrement dit, l'amplification du gradient scalaire par le champ de vitesse requiert un alignement privilégié avec la direction principale de compression.

Les PDFs des $|\cos(\theta_i)|$ pour trois différentes valeurs de \bar{c} sont présentées sur la [Figure 7.32](#). La probabilité d'obtenir $|\cos(\theta_i)| = 1$ correspond à la situation où un parfait alignement existe entre le gradient de c et la direction e_i . Les résultats présentés sur la [Figure 7.32](#), indiquent que, hormis quelques légères différences, pour chaque des valeurs de \bar{c} considérée la tendance est la même pour les flammes hétérogènes et homogènes, c'est-à-dire qu'à ce niveau les hétérogénéités n'altèrent pas le comportement de la flamme homogène turbulente qui varie, d'ailleurs, en fonction de la zone de la flamme considérée. En effet, dans la zone à faible dégagement de chaleur $\bar{c} = 0.1$ on trouve une prédominance de l'alignement avec la direction de l'extension. Cela, en particulier, conforte les résultats obtenus avec l'approche géométrique. Cependant, dans la zone à fort dégagement de chaleur, *i.e.* $\bar{c} = 0.7$, le comportement est

2. Dans le cas tridimensionnel, une direction intermédiaire e_2 doit être prise en compte

différent du précédent et un alignement préférentiel avec la direction de compression apparaît. Pour les valeurs plus élevées de \bar{c} (par exemple 0.9) la tendance observée vers les faibles valeurs de \bar{c} est à nouveau retrouvée.

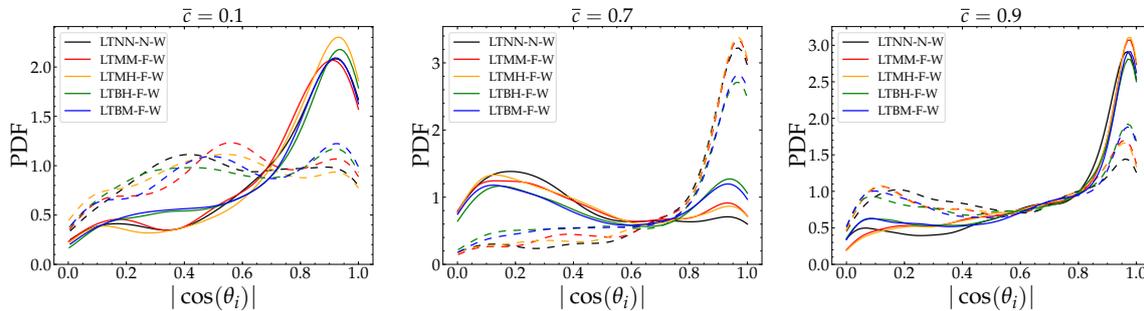


Figure 7.32 – PDFs du cosinus de l'angle entre le gradient de la variable de progrès ∇c et les vecteurs propres du tenseur des taux de déformations S_{ij} à l'instant $t = 5\tau_F$. Les lignes continues : direction de l'extension, lignes en trait : direction de compression.

7.9 Influence de l'intensité de turbulence

Dans ce qui précède, nous nous sommes intéressés au développement du noyau de flamme dans un milieu hétérogène sous l'action des fluctuations de vitesse turbulentes. À l'issue de cette étude, certaines propriétés de la flamme se voient modifiées en présence des hétérogénéités, notamment l'efficacité de la combustion globale. Le cas de fluctuations turbulentes modérées étant un cas intermédiaire entre un écoulement laminaire et un écoulement fortement turbulent, on souhaite à présent examiner le comportement des flammes stratifiées lorsque les fluctuations turbulentes, données en terme de la moyenne quadratique des fluctuations de vitesse u_{rms} , sont plus intenses.

La [Figure 7.33](#) fournit un exemple de l'évolution du noyau de flamme dans de telles conditions. En fonction des caractéristiques du champ hétérogène retenu, la structure et la forme de la flamme montrent des comportements différents, notamment lorsqu'il s'agit des effets d'extinction locale causés par la turbulence, comme on peut le voir dans les cas correspondants à des grandes échelles caractéristiques, *i.e.*, LTBH-F-H et LTBM-F-H. Dans ces derniers cas, les plissements du front de flamme induites par les structures turbulentes sont assez prononcées au point où on peut observer un détachement du noyau de flamme formant ainsi une zone de réaction séparée. Cet effet se traduit par une augmentation de la surface de flamme.

En dépit du fait que la discussion précédente ne concernait qu'un seul tirage du champ de vitesse et une seule distribution scalaire, les moyennes d'ensemble de la longueur de flamme, exprimées en terme de rayon équivalent, montrent également cet effet. Ce dernier est plus notable dans ce cas que lorsque l'intensité turbulente est faible. La sensibilité de cet effet par rapport aux caractéristiques de la stratification, quant à elle, reste la même que celle observée dans le cas de faible turbulence. Cependant, dans le cas présent et lorsque le champ hétérogène

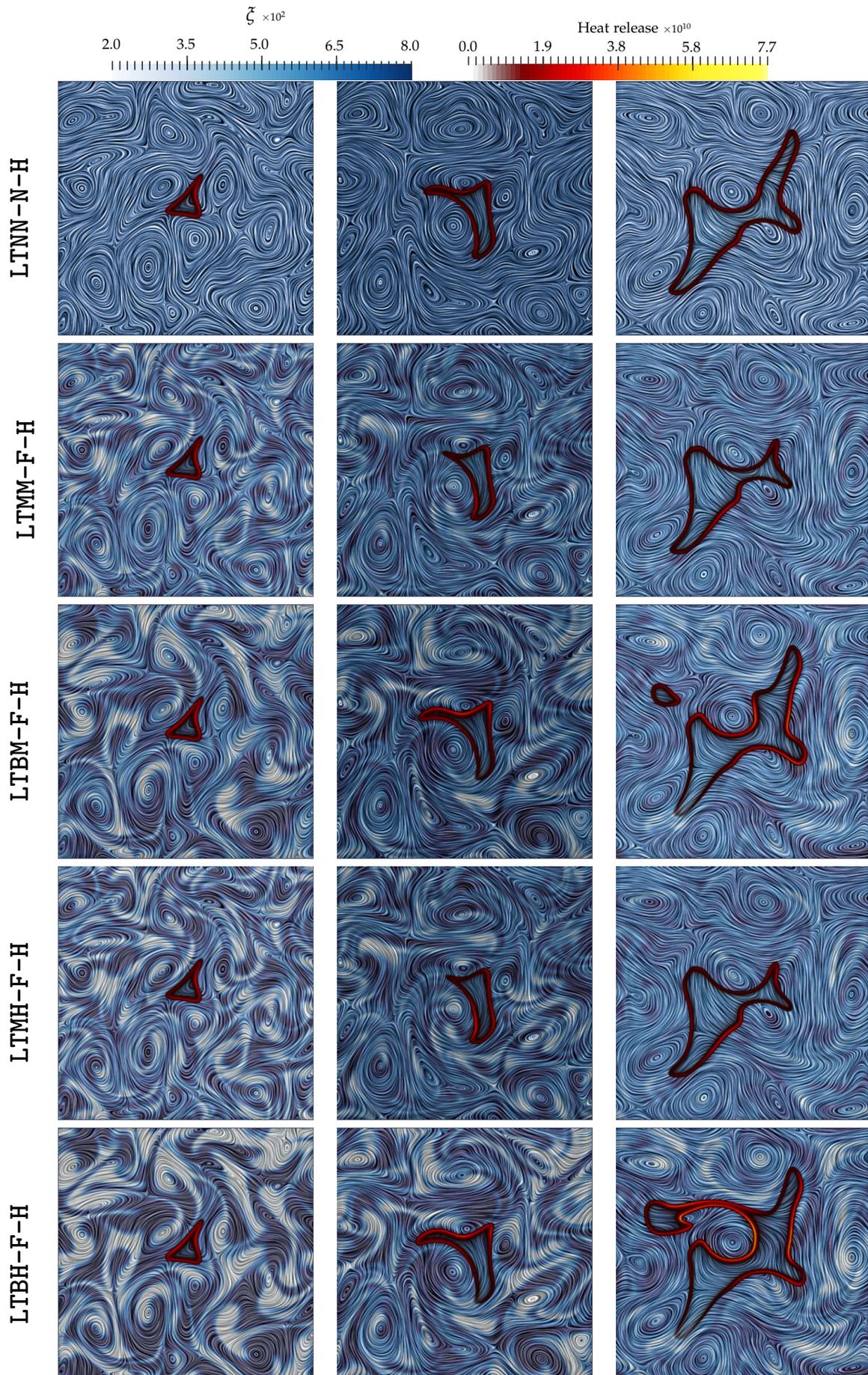


Figure 7.33 – Propagation de flamme turbulente, illustrée par le taux de dégagement de chaleur, dans un mélange de composition hétérogène de richesse moyenne $\bar{\Phi} = 0.8$. De gauche à droite, le temps est τ_t , $2.5 \tau_t$, $4 \tau_t$, de haut en bas : champs de fraction de mélange des configurations *LTNN-N-H*, *LTMM-F-H*, *LTBM-F-H*, *LTMH-F-H*, *LTBH-F-H*, obtenus avec un tirage de scalaire et un tirage de champ de vitesse turbulent.

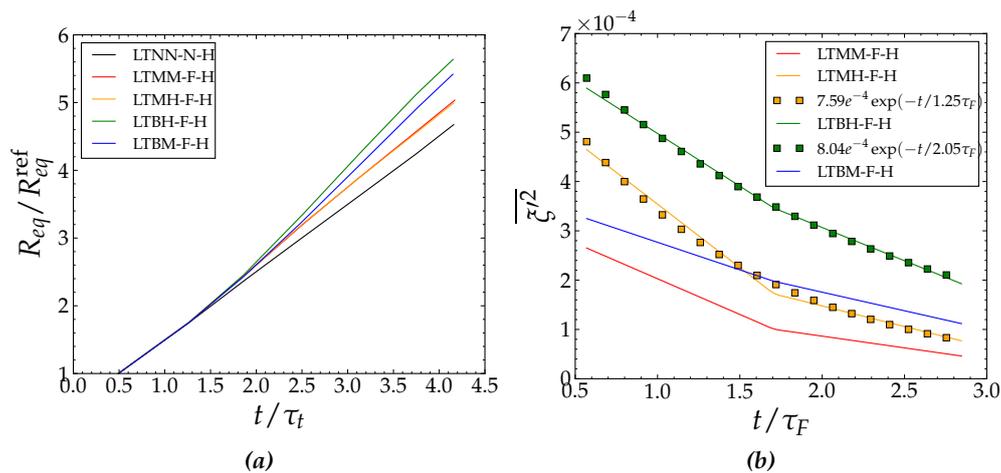


Figure 7.34 – Évolutions temporelles du rayon équivalent (à gauche) et de la variance de la fraction de mélange (à droite).

est caractérisé par des petites tailles de poches, l'influence du taux de ségrégation est très limitée. Cela est dû au fait que, dans ce dernier cas, l'efficacité des gradients de composition est très faible lorsque le noyau de flamme rencontre le champ de richesse hétérogène. En effet, l'échelle de temps diffusive des poches est très comparable à τ_F (cf. Figure 7.34b). En revanche, lorsque la taille des poches de scalaire est relativement élevée, un effet positif de l'augmentation du taux de ségrégation peut être noté.

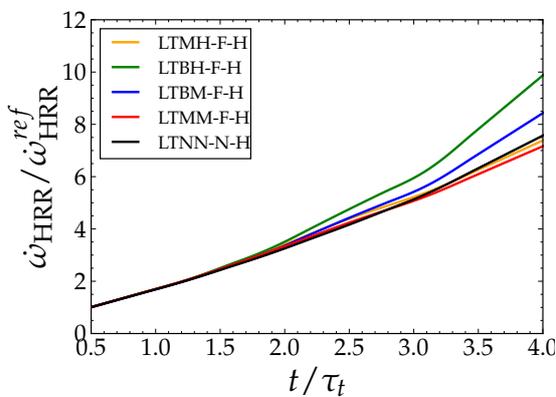


Figure 7.35 – Évolution temporelle du rayon équivalent de flamme pour l'ensemble de flammes considérées (à droite) et évolution temporelle de la variance de la fraction de mélange.

7.10 Analyse de flammes tridimensionnelles

Jusqu'à présent, les analyses réalisées sur le développement du noyau de flamme dans un mélange hétérogène ont été basées sur des configurations bidimensionnelles. En effet, comme il a été mentionné précédemment, les topologies localement bidimensionnelles sont les plus probables même si le champ d'écoulement devant ces flammes est entièrement tridimensionnel [133, 134]. En terme de tendance mais pas nécessairement en magnitude, seules des différences minimales sont donc attendues lors du passage des configurations 2D aux configurations 3D. Toutefois, en présence d'une stratification, il est probable que les flammes 3D soient différentes de leurs homologues 2D en raison de l'effet éventuel du changement de la sensibilité de

la flamme au macro et au micro-mélange. Pour cette raison, des cas de flammes homogènes et hétérogènes tridimensionnelles sont réalisées, en gardant les mêmes conditions que dans les cas 2D. En revanche, il convient de mentionner qu'il ne s'agit pas ici d'une analyse complète, mais plutôt une validation des tendances observées en 2D.

Les calculs 3D ont été réalisés en utilisant le modèle de chimie globale optimisée, permettant de s'affranchir des coûts CPU élevés des DNS 3D tout en restituant correctement les caractéristiques fondamentales de la flamme laminaire. Nous allons nous limiter dans cette analyse, au cas du développement du noyau de flamme dans un champ de vitesse turbulent de $u_{rms} = 1.2$.

La surface de la flamme tridimensionnelle a été évaluée par un algorithme de *Marching cubes* de la librairie *scikit-image* et son évolution temporelle est reportée sur la Figure 7.36b. Malgré le fait que le facteur d'augmentation de la surface de la flamme dans les cas 3D est beaucoup plus élevé que l'augmentation correspondante de la longueur de la flamme dans les calculs bidimensionnels, on note la même tendance observée dans les cas bidimensionnels : les plissements induits par la présence des hétérogénéités ont donné lieu à une génération de la surface de flamme, et que cet effet est intensifié plutôt par l'augmentation de l'échelle de longueur caractéristique que le taux de ségrégation.

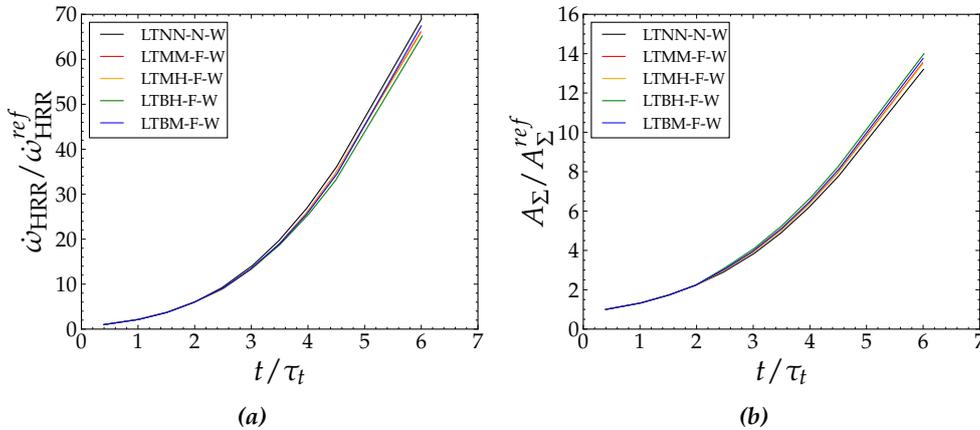


Figure 7.36 – Évolution temporelle de l'intégrale volumique du taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_{HRR}$ et de la surface du noyau de flamme pour la richesse moyenne initiale $\bar{\Phi} = 0.8$.

En termes de propriétés locales du front de flamme, hormis le fait que les PDFs associées aux cas stratifiées sont légèrement plus larges, aucune différence notable n'a été observée au niveau de la courbure du front de flamme (cf. Figure 7.37a), ce qui rejoint les conclusions des analyses 2D. De même, les PDFs du taux d'étirement tangentiel sont plus larges avec une probabilité plus grande pour les valeurs positives de a_t (cf. Figure 7.37b). Ces deux tendances étant inchangées par les effets de turbulence tridimensionnelles, il est attendu que le comportement de la flamme stratifiée, en terme d'alignement préférentiel à la direction de l'extension au niveau du front de flamme, soit présent également en 3D.

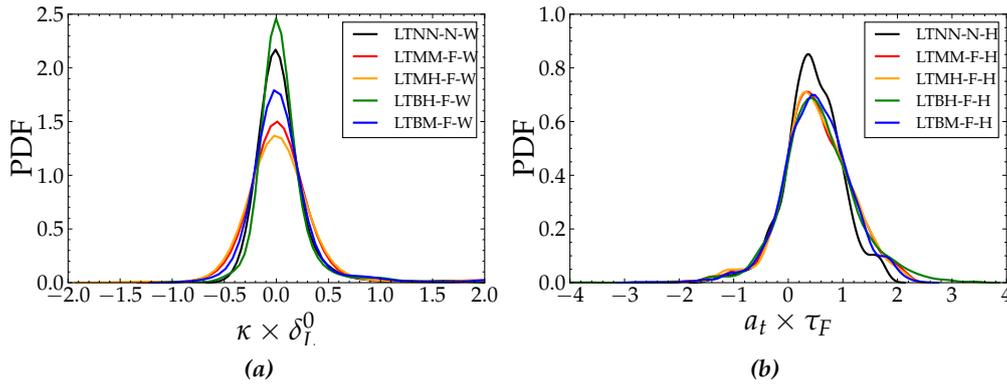


Figure 7.37 – PDF de la courbure (à gauche) et de du taux d'étirement tangentiel sur le front de flamme à l'instant $t = 4\tau_f$.

Ce dernier effet a été examiné, via les analyses d'orientation du gradient de la variable de progrès par rapport aux directions principales de l'étirement qui sont reportées dans la Figure 7.38 pour trois valeurs de \bar{c} . Le PDFs du cosinus des angles entre ∇c et les vecteurs propres du tenseur des taux de déformations S_{ij} sont très similaires dans les cas homogène et hétérogènes indépendamment de la zone de la flamme considérée. Ce qui suggère que les hétérogénéités n'altèrent pas le comportement de la flamme pré-mélangée tel qu'il est mis en évidence dans le cas homogène. Il consiste en un alignement préférentiel à la direction de l'extension du côté des gaz frais et brûlés et un alignement privilégié avec la direction de compression au niveau de la zone à fort taux de dégagement de chaleur.

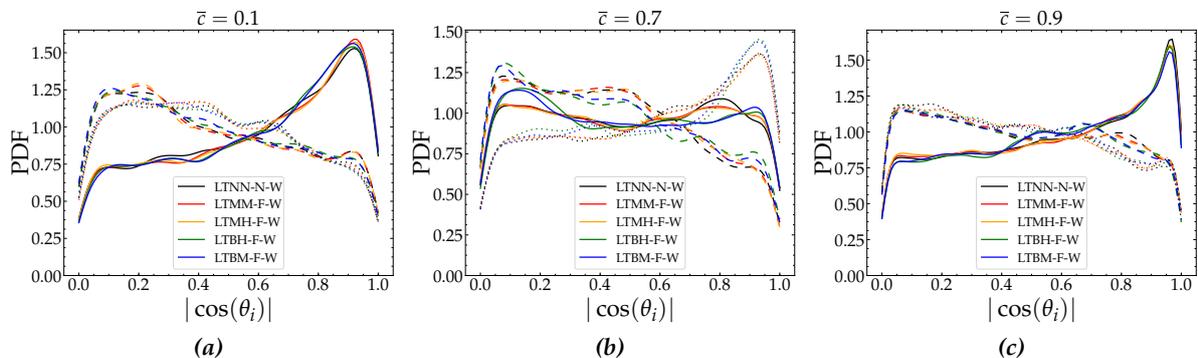


Figure 7.38 – PDFs du cosinus de l'angle entre le gradient de la variable de progrès ∇c et les vecteurs propres du tenseur des taux de déformations S_{ij} à l'instant $t = 5\tau_f$. Les lignes continues : direction d'extension, lignes pointillées : direction intermédiaire, ligne en tirets : direction de compression

7.11 Étude dynamique et cinématique des orientations scalaire-vitesse

Dans les analyses basées sur les mélange turbulent évoquées dans la section qui précède, nous nous sommes contentés d'analyser les statistiques d'orientation du gradient de la variable de progrès dans le repère propre du tenseur de contraintes sans nous préoccuper des processus qui les déterminent. Dans cette section, un accent particulier est mis sur la ciné-

matique de cette orientation, qui est étudiée par le biais de l'analyse directe de l'équation de transport de l'orientation du gradient d'un scalaire réactif quelconque Y . Les équations de transport des angles entre les normales aux iso-surfaces de scalaire $\mathbf{n}_Y \equiv \nabla Y / |\nabla Y|$ avec les trois vecteurs propres \mathbf{e}_i du tenseur de contraintes de déformation \mathbf{S} , i.e., $\hat{n}_i = \mathbf{n}_Y \cdot \mathbf{e}_i$ avec $i = 1, \dots, 3$ s'écrivent comme suit :

$$\begin{aligned} \frac{D\hat{\mathbf{n}}}{Dt} &= \mathbf{R}^T \cdot \frac{D\mathbf{n}_Y}{Dt} + \frac{D\mathbf{R}^T}{Dt} \cdot \mathbf{n}_Y \\ &= \underbrace{\frac{(\mathbf{R}^T \cdot \mathcal{I})}{|\nabla Y|} \cdot \nabla \left(\frac{DY}{Dt} \right)}_{\text{GR}} - \underbrace{\mathbf{R}^T \cdot (\mathcal{I} \cdot \mathbf{S}) \cdot \mathbf{n}_Y}_{\text{TS}} \\ &\quad - \underbrace{\frac{\mathbf{R}^T \cdot \mathcal{I}}{2} \cdot (\mathbf{n}_Y \times \boldsymbol{\omega})}_{\text{TW}} + \underbrace{\frac{D\mathbf{R}^T}{Dt} \cdot \mathbf{n}_Y}_{\text{WN}}. \end{aligned} \quad (7.8)$$

avec $\boldsymbol{\omega}$ le vecteur vorticit , i.e., $\nabla \times \mathbf{u}$, \mathbf{R} la matrice de passage   la base propre de \mathbf{S} , i.e., $\mathbf{R} \equiv [e_1|e_2|e_3]$ et enfin \mathcal{I} une matrice d finie par :

$$\mathcal{I} \equiv \mathbf{I} - \mathbf{n}_Y \mathbf{n}_Y^T, \quad (7.9)$$

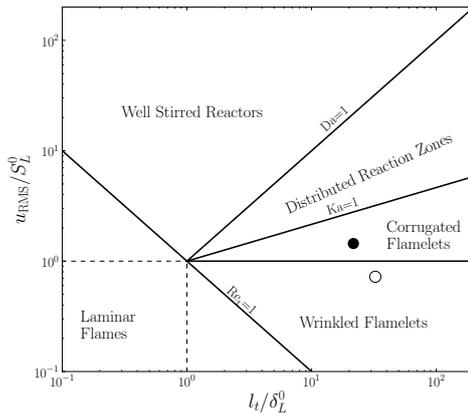
Les diff rentes contributions qui apparaissent dans le second membre de ces  quations de transport sont  valu es   partir des bases de donn es DNS. Ils sont li s (i) aux processus mol culaires agissant directement sur le champ scalaire (diffusion mol culaire et r actions chimiques), (ii) aux effets directs de l' tirement, (iii)   la vorticit  et enfin (iv)   la rotation des axes principaux du tenseur de contraintes.

On se contente dans cette section d'illustrer les deux principaux r sultats qui en sont issus. On consid rera uniquement le cas homog ne en raison de la faible influence des h t rog nit s de composition sur les statistiques d'orientation du gradient de la variable de progr s dans le rep re propre du tenseur de d formation. Ce travail a fait l'objet d'une publication dans *Combustion and Flame* [220].

Deux simulations DNS distinctes sont consid r es ici. Les conditions de temp rature, de pression et de richesse sont identiques   celles des configurations pr sent es dans la section pr c dente. En revanche, les caract ristiques de turbulence des deux cas sont diff rentes et les valeurs de l' chelle de longueur int grale (l_t), de la fluctuation de vitesse turbulente (u_{RMS}), du nombre de Reynolds turbulent ($\text{Re}_t \equiv u_{\text{RMS}} l_t / \nu$) et l' chelle de longueur de Kolmogorov (η_K) des champs de flux turbulents initiaux correspondants sont rassembl s dans [Tableau 7.1](#). Les deux conditions sont not es F1 et F2, et la moyenne quadratique des fluctuations de vitesse est environ deux fois plus grande dans le deuxi me cas. Bas  sur l'hypoth se d'un nombre de Reynolds de flamme unitaire ($\text{Re}_f \equiv S_L^0 \delta_L^0 / \nu = 1$), les valeurs des nombres de Damk hler et les nombres de Karlovitz sont  valu s et les r gimes de combustion associ s sont d crits dans un diagramme de combustion standard, qui est report  sur la [Figure 7.39](#).

Tableau 7.1 – Caractéristiques de l'interaction turbulence-combustion pour les deux cas de simulation

Simulation	l_t/δ_L^0 (-)	u_{RMS}/S_L^0 (-)	Da (-)	Ka (-)
F1	32.8	0.71	44.9	0.11
F2	21.9	1.43	14.9	0.37

**Figure 7.39** – Représentation dans le diagramme de combustion standard des régimes de combustion turbulente. Cercle creux : F1. Cercle plein : F2.

Sur la [Figure 7.41](#), les moyennes conditionnées des quatre contributions présentes dans le second membre de l'équation (7.8) sont tracées en fonction de la variable de progrès. La [Figure 7.41](#) montre les évolutions des trois composantes associées aux directions extensive ($D\hat{n}_1/Dt$), intermédiaire ($D\hat{n}_2/Dt$) et compressive ($D\hat{n}_3/Dt$). À partir de cet ensemble d'évolutions, on peut conclure que la contribution associée à la rotation de la base propre (*i.e.* \mathbf{WN}) est la contribution dominante à la variation de l'orientation. Elle est même d'environ un ordre de grandeur plus grand que les autres termes. Par exemple, dans la [Figure 7.41a](#), les courbes obtenues pour $\langle \mathbf{WN} || c \rangle_1$ suggèrent que, dans le cas F1, le terme $\langle \mathbf{WN} || c \rangle_1$ est beaucoup plus grand que zéro dans la plage $0 < c < 0.1$, ce qui est assez similaire à la dérivée particulière totale $D\hat{n}_1/Dt$ (*cf.* [7.40c](#)). Ceci est également parfaitement compatible avec la forte augmentation de \hat{n}_1 observée dans cette plage de variables de progrès, comme indiqué dans la [Figure 7.40a](#).

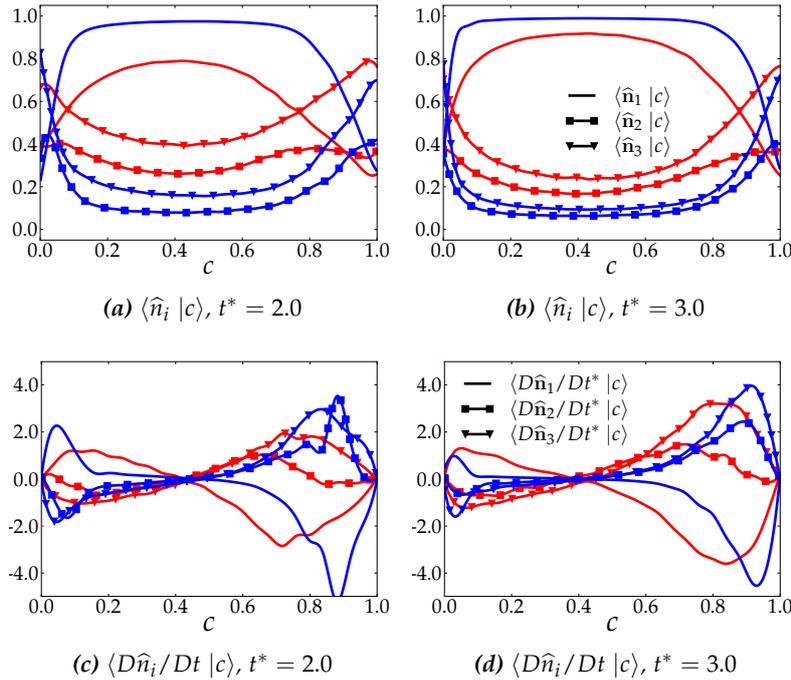


Figure 7.40 – Moyennes conditionnées des composantes de l'orientation (a, b) et de leurs dérivées (c, d) tracées en fonction de la variable de progrès. Ligne bleue : cas F1, ligne rouge : cas F2.

La rotation de la base propre du tenseur de contraintes de déformation à travers la flamme peut même être détectée à partir de l'analyse directe du champ d'écoulement instantané au voisinage du front de la flamme. Ceci est illustré sur la [Figure 7.42](#), où la direction principale la plus extensive de la base propre du taux de déformation (*i.e.* e_1) est représentée sur un plan de coupe de la simulation F2 à différents instants sur la position d'une particule fluide traversant la flamme. La particule de fluide correspondante est choisie de telle sorte qu'elle corresponde à un minimum local du critère Q à $t = 2.0\tau_F$ (*cf.* [Figure 7.42a](#)). Ce point est ensuite suivi jusqu'à $t = 3.0\tau_F$. Il est clair qu'à l'instant initial $t = 2.0\tau_F$, lorsque la particule est encore située dans les réactifs, la direction principale la plus extensive associée est presque parallèle aux iso-contours de la variable de progrès (ligne en pointillé), par conséquent, les iso-contours du scalaire devraient être étirés par la structure turbulente correspondante. Ensuite, la position de cette particule fluide (c'est-à-dire son ensemble de coordonnées x_p) est suivi d'une manière lagrangienne, *i.e.*, $Dx_p/Dt = \mathbf{u}(x_p, t)$.

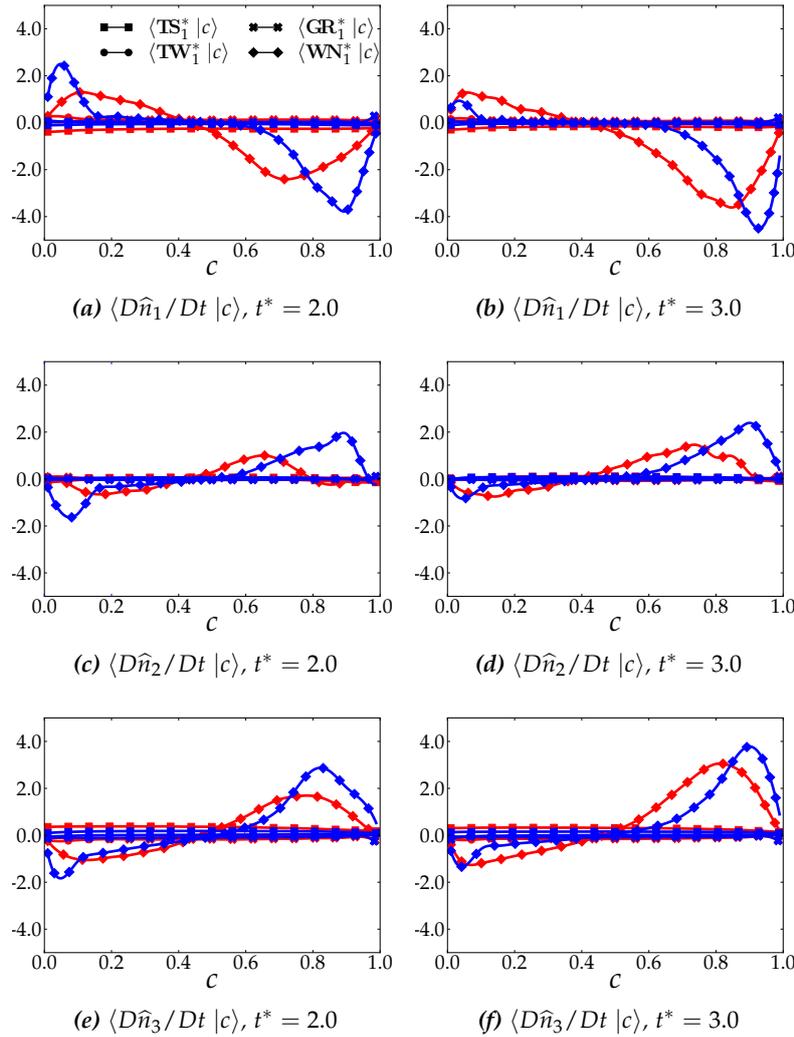


Figure 7.41 – Moyennes conditionnées des termes présents dans l'équation de transport des composantes d'orientation (Eq. (7.8)). Ligne bleue : cas F1, ligne rouge : cas F2.

et la direction de e_1 à sa position est indiquée ainsi que les valeurs normalisées du critère Q et d'une iso-contour de variable de progrès. En s'approchant du point x_p , on trouve que le vecteur propre e_1 tourne afin de devenir normal aux iso-contours du scalaires, comme indiqué sur la Figure 7.42b -7.42d. À $t = 2.8\tau_F$ (cf. Figure 7.42e). Une fois que la particule de fluide correspondante est à l'intérieur de la flamme, la direction associée au vecteur propre le plus extensif est pratiquement perpendiculaire aux iso-contours de la variable de progrès. Ensuite, le vecteur propre e_1 commence à quitter cette orientation et le processus de rotation se déroule de manière à favoriser son alignement préférentiel avec le gradient scalaire. Ainsi, on constate que, même pour une particule fluide située à l'intérieur d'une structure turbulente assez stable, telle que celle initialement envisagée ici, la base propre pivote de plus de 90 degrés lorsqu'elle évolue vers le front de flamme prémélangée.

La dynamique des valeurs propres et des orientations des gradients de scalaire dans la base propre de S sont étroitement liés. Il est possible, par exemple, d'établir l'équation de

transport des valeurs propres λ_i comme suit :

$$\begin{aligned}
 \frac{D\lambda_i}{Dt} &= \left(\mathbf{R}^T \frac{D\mathbf{S}}{Dt} \mathbf{R} \right)_{ii} \\
 &= \underbrace{-\lambda_i^2}_{\mathbf{T}_{1i}} + \underbrace{\frac{1}{4}(1 - \delta_{ik})\hat{\omega}_k^2}_{\mathbf{T}_{2i}} + \underbrace{\left[\mathbf{R}^T \left(-\frac{1}{\rho} \nabla(\nabla p) \right) \mathbf{R} \right]}_{\mathbf{\Pi}_i} \\
 &\quad + \underbrace{\left[\mathbf{R}^T \left(\frac{1}{2\rho^2} (\nabla p^T \nabla \rho + \nabla \rho^T \nabla p) \right) \mathbf{R} \right]}_{\mathbf{T}_{4i}} + \mathbf{T}_{vi}
 \end{aligned} \tag{7.10}$$

où \mathbf{T}_v représente les effets visqueux.

Cette équation fait intervenir la matrice hessienne de la pression $\mathbf{\Pi} = \nabla(\nabla p)$ ce qui implique que la pression contribue aux effets liés à rotation de la base propre.

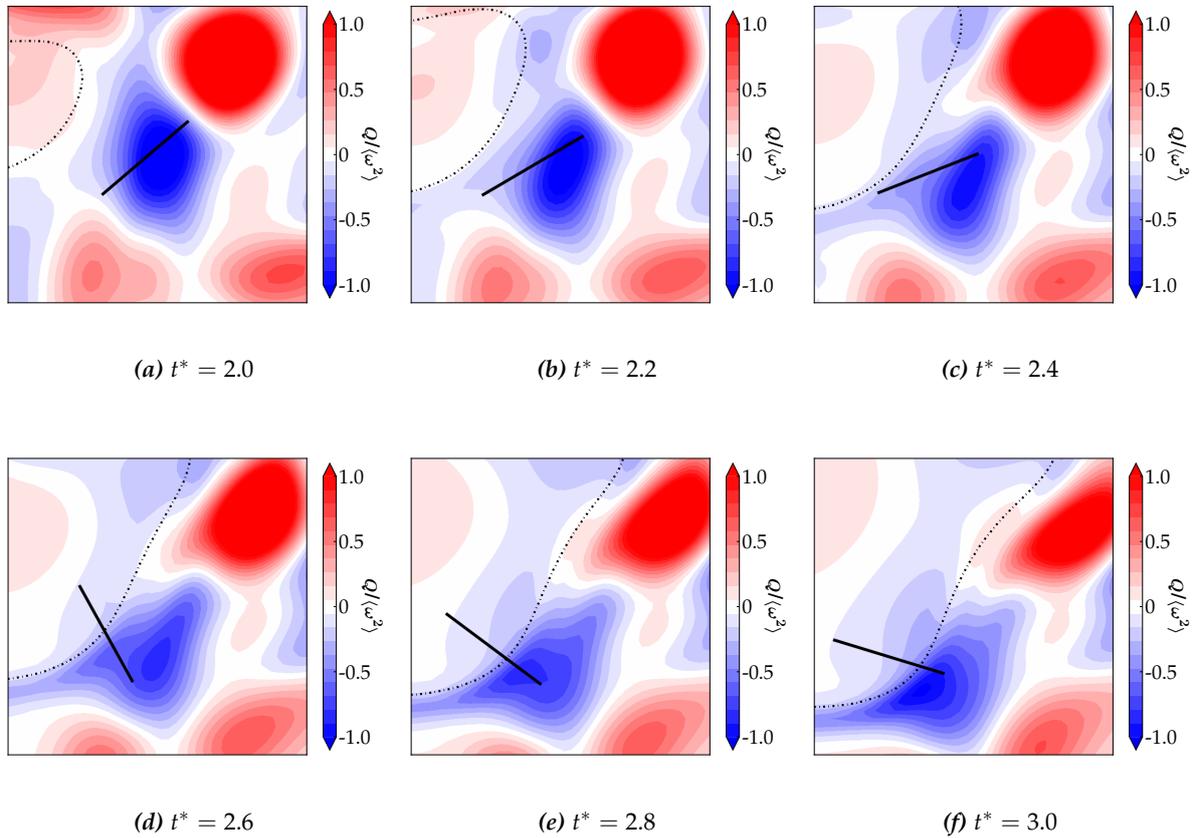


Figure 7.42 – Évolution de la direction la plus extensive du vecteur propre du tenseur de contraintes de déformation \mathbf{e}_1 à la position d'une particule fluide présentant le minimum du critère Q à l'instant $t^* = 2.0$. Projection de \mathbf{e}_1 sur le plan de coupe considéré (ligne continue) et l'iso-contour $c = 0.8$ (ligne en pointillé) superposées au champ du critère Q .

Les PDF des termes relatifs à la pression obtenus pour la valeur propre λ_1 sont fournis dans la Figure 7.43. Les termes correspondants ont été normalisés par $(\tau_L^0)^2$. Dans les réactifs frais, les PDFs de $\mathbf{\Pi}_1$ sont nettement plus larges que ceux de \mathbf{T}_{41} . Les PDFs de $\mathbf{\Pi}_1$ sont

également biaisés vers des valeurs positives, alors que, sans surprise, les valeurs moyennes de \mathbf{T}_{41} sont presque nulles car la densité ne varie pas dans cette région de l'écoulement. Dans la zone de flamme, les PDFs de Π_1 restent plus larges que ceux de \mathbf{T}_{41} . D'après la Figure 7.43, il semble que la contribution \mathbf{T}_{41} reste inférieure à Π_1 . Ceci est confirmé par les valeurs des moyennes conditionnées, qui sont $\langle \mathbf{T}_{41} \mid 0.01 < c < 0.99 \rangle = 0.3\tau_L^0$ (resp. $0,06\tau_L^0$) et $\langle \Pi_1 \mid 0.01 < c < 0.99 \rangle = 1.7\tau_L^0$ (resp. $0.6\tau_L^0$) dans le cas F1 (resp. F2). Ceci confirme le rôle important joué par la hessienne de la pression sur la topologie locale du champ d'écoulement réactif turbulent.

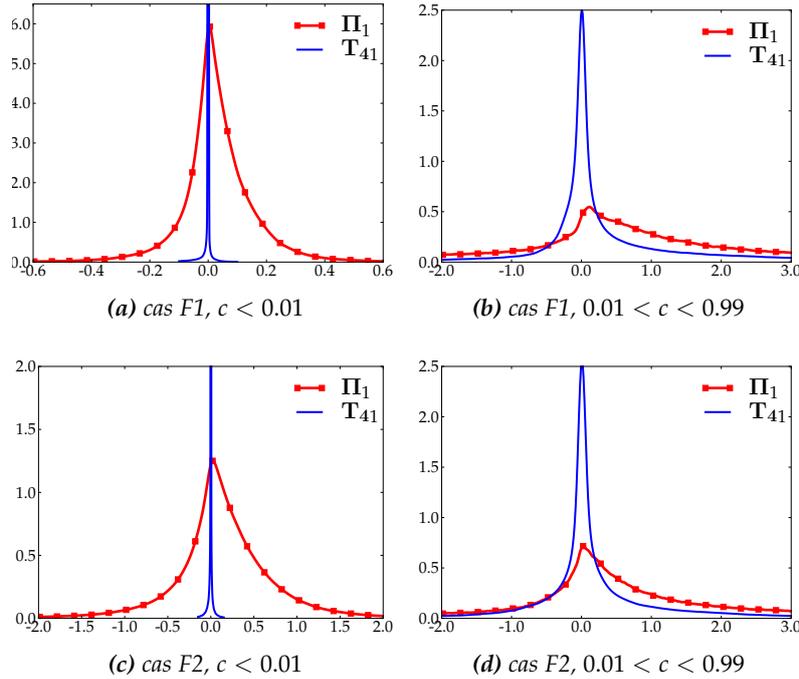


Figure 7.43 – PDFs des termes \mathbf{T}_{41} et Π_1 dans l'équation (7.10). Colonne de gauche : réactifs, colonne de droite : zone de réaction. Toutes les quantités sont adimensionnées avec δ_L^0 et $\tau_L^0 = \delta_L^0 / S_L^0$.

7.12 Conclusion

En considérant un noyau de flamme en expansion dans un milieu turbulent, les conclusions concernant la nature des hétérogénéités, *i.e.* les effets limités de la stratification en température, sont également valables dans ces conditions, confortant ainsi le choix de l'orientation de l'étude vers les hétérogénéités en richesse. Lorsque l'intensité des fluctuations turbulente est modérée, les réponses volumiques des flammes stratifiées ont montré (i) une efficacité comparable entre celles-ci et la flamme homogène associée, avec une légère déviation (diminution ou augmentation) par rapport à cette dernière suivant les caractéristiques de la distribution du champ de réactif hétérogène (ii) une augmentation de la longueur (ou la surface) de la flamme en présence des hétérogénéités. Cet effet de génération de la surface de la flamme est dû aux plissements supplémentaires induits par la stratification s'ajoutant à celui engendré par la turbulence qui résulte de la différence des vitesses de propagation locales au niveau du front de flamme. En effet, dans le cas où le mélange est pauvre en moyenne (*i.e.* $\bar{\Phi} = 0.8$),

on a montré que le front de flamme se propage de manière préférentielle dans les endroits les plus favorables à la propagation (zones plus riches) entraînant ainsi une accumulation des richesses pauvres au niveau du front de flamme au fur et à mesure que ce dernier se propage. Concernant les mécanismes opérant sur la surface de la flamme, les PDFs de courbure et du taux d'étirement tangentielle ont été faiblement impactées par les hétérogénéités de richesse. Par conséquent, hormis quelques différences en magnitude, la présence des hétérogénéités n'a pas altéré le comportement classique observé dans les flammes prémélangées homogènes. Ce comportement consiste en alignement préférentiel de la flamme avec la direction la plus extensive du côté des réactifs et des gaz brûlés, et avec la direction compressive dans les zones à fort taux de dégagement de chaleur. Ce propos a été confirmé par l'analyse du mélange turbulent via le terme de l'Interaction Turbulence Scalaire (TSI), montrant que le gradient de la variable de progrès s'aligne avec la direction principale extensive (compressive) du tenseur des contraintes de déformation aux bords du front de flamme (au voisinage des zones de taux de dégagement de chaleur maximal). Cet effet a été attribué au fait que les hétérogénéités agissent plutôt sur les termes associés à la propagation dans les équations de transport de la fonction densité de surface de flamme et du taux de dissipation scalaire. Les analyses de ces termes via la vitesse de déplacement ont révélé que l'influence des hétérogénéités de composition sur le développement du noyau de flamme se manifeste plutôt dans les contributions réactive et de diffusion différentielle. D'ailleurs, il a été noté que cette dernière contribution, souvent négligée dans les études antérieures, a un poids non négligeable dans la vitesse de déplacement S_d comparé aux autres contributions. Ensuite, la comparaison de la structure locale des flammes stratifiées et homogène a confirmé l'impact observé en laminaire des hétérogénéités sur l'épaisseur de flamme locale qui augmente sous l'effet d'accumulation de richesses pauvres au niveau du front réactif.

Enfin, lorsque l'intensité des fluctuations turbulentes est plus élevée, les effets observés en turbulence modérée sont maintenus avec un changement en magnitude. Par exemple, l'effet de la génération de surface devient plus prononcé avec l'augmentation de la moyenne quadratique des fluctuations de vitesse turbulente et entraîne une augmentation de l'efficacité de la combustion par rapport au cas homogène. Pareillement, l'intensité de cet effet croît avec l'augmentation de l'échelle caractéristique de longueur et du taux de ségrégation.

Les analyses précédentes ont été ensuite étendues à des écoulements tridimensionnels. Les résultats obtenus ont permis de confirmer les tendances observées dans les configurations bidimensionnelles, comme par exemple, la faible influence des hétérogénéités sur les orientations du gradient de la variable de progrès par rapport aux directions principales du tenseur des contraintes de déformation \mathbf{S} . Ainsi, le cas homogène a été considéré pour des analyses des processus qui déterminent les statistiques de ces orientations par le biais d'une étude dynamique et cinématique des orientations scalaire-vitesse. À l'issue de cette dernière, nous avons montré la prédominance des effets de la rotation de la base propre de \mathbf{S} dans le bilan des angles entre les normales aux iso-surfaces de la variable de progrès avec les trois directions principales de \mathbf{S} .

Conclusions et perspectives

Conclusions générales

Ce travail de thèse avait pour objectif d'étudier les effets des hétérogénéités de composition sur le développement et la propagation d'un noyau de flamme prémélangée à l'aide de la simulation numérique directe. Une base de données DNS bidimensionnelles considérant des flammes homogènes et hétérogènes, en écoulements laminaires et turbulents d'iso-octane/air a été générée. La combustion iso-octane/air est représentée par une description cinétique représentative largement validée avec des données expérimentales dans une large gamme de conditions de richesse, de pressions et de températures. Cette description considère 29 espèces chimiques et 48 réactions élémentaires. La base de données DNS générée compte 78 configurations distinctes réparties sur cinq paramètres principaux caractérisant la distribution spatiale et statistique du champ hétérogène de réactifs ainsi que les fluctuations du champ de vitesse turbulent. Ces paramètres sont : (i) la richesse moyenne du champ hétérogène, (ii) son échelle de longueur caractéristique, (iii) son taux de ségrégation, (iv) la nature de l'hétérogénéité considérée ainsi que (v) l'intensité des fluctuations turbulentes. Afin d'obtenir des statistiques convergentes et par conséquent des tendances représentatives des phénomènes physiques, une multiplication des réalisations DNS a été effectuée pour chaque configuration menant ainsi à un nombre total de 452 calculs DNS bidimensionnels.

Afin d'isoler les contributions des hétérogénéités de composition dans l'ensemble du phénomène de la propagation d'un front de flamme dans un milieu turbulent hétérogène, les effets associés à la turbulence ont été omis dans un premier temps et l'étude de l'évolution d'un noyau de flamme a été réalisée dans un contexte laminaire. Les effets conjoints des hétérogénéités de richesse et de température ont été également découplés en considérant trois natures de stratification : richesse, température et couplage richesse-température. Il a été montré suite à l'analyse de la réponse globale de la flamme que les effets de la stratification en richesse ainsi que la stratification couplée richesse-température sont comparables, de manière à ce que l'effet de la stratification en température soit négligeable. Par conséquent, l'étude s'est orientée exclusivement vers les stratifications en richesse. Ensuite, il a été montré que, dans les conditions de cette étude, l'efficacité de la flamme stratifiée diminue, ou au mieux reste similaire par rapport aux conditions homogènes, et ce indépendamment de la valeur moyenne du champ de fluctuations de richesse. La diminution de l'efficacité de flamme est

attribuée à une évolution de la distribution de la richesse ou de la fraction de mélange vers des zones défavorables à la propagation (zones plus pauvres lorsque le mélange est pauvre en moyenne (*i.e.* $\bar{\Phi} = 0.8$), zones plus pauvres et plus riches lorsque $\bar{\Phi} = 1.2$). De plus, il a été observé que les déviations relatives, par rapport aux conditions homogènes, dépendent des caractéristiques de la distribution du champ de richesse locale, de sorte qu'elles augmentent avec l'accroissement de la taille caractéristique et du taux de ségrégation, avec néanmoins une prédominance des effets associés à l'échelle de longueur caractéristique. Dans le cas où la stratification est caractérisée par une échelle de longueur importante et une forte ségrégation, l'étude des propriétés locales de la flamme a montré un élargissement des PDFs de vitesses de propagation (des épaisseurs de flammes) locales avec des valeurs plus petites (grandes) au point que le temps caractéristique moyen devient 2.5 fois plus élevé que celui associé aux conditions homogènes.

En considérant un noyau de flamme en expansion dans un milieu turbulent, les conclusions concernant la nature des hétérogénéités, *i.e.* les effets limités de la stratification en température, sont également valables dans ces conditions, confortant ainsi le choix de l'orientation de l'étude vers les hétérogénéités en richesse. Lorsque l'intensité des fluctuations turbulente est modérée, les réponses volumiques des flammes stratifiées ont montré (i) une efficacité comparable entre celles-ci et la flamme homogène associée, avec une légère déviation (diminution ou augmentation) par rapport à cette dernière suivant les caractéristiques de la distribution du champ de réactif hétérogène (ii) une augmentation de la longueur (ou la surface) de la flamme en présence des hétérogénéités. Cet effet de génération de la surface de la flamme est dû aux plissements supplémentaires induits par la stratification s'ajoutant à celui engendré par la turbulence qui résulte de la différence des vitesses de propagation locales au niveau du front de flamme. En effet, dans le cas où le mélange est pauvre en moyenne (*i.e.* $\bar{\Phi} = 0.8$), on a montré que le front de flamme se propage de manière préférentielle dans les endroits les plus favorables à la propagation (zones plus riches) entraînant ainsi une accumulation des richesses pauvres au niveau du front de flamme au fur et à mesure que ce dernier se propage. Concernant les mécanismes opérant sur la surface de la flamme, les PDFs de courbure et du taux d'étirement tangentielle ont été faiblement impactées par les hétérogénéités de richesse. Par conséquent, hormis quelques différences en magnitude, la présence des hétérogénéités n'a pas altéré le comportement classique observé dans les flammes prémélangées homogènes. Ce comportement consiste en alignement préférentiel de la flamme avec la direction la plus extensive du côté des réactifs et des gaz brûlés, et avec la direction compressive dans les zones à fort taux de dégagement de chaleur. Ce propos a été confirmé par l'analyse du mélange turbulent via le terme de l'Interaction Turbulence Scalaire (TSI), montrant que le gradient de la variable de progrès s'aligne avec la direction principale extensive (compressive) du tenseur des contraintes de déformation aux bords du front de flamme (au voisinage des zones de taux de dégagement de chaleur maximal). Cet effet a été attribué au fait que les hétérogénéités agissent plutôt sur les termes associés à la propagation dans les équations de transport de la fonction densité de surface de flamme et du taux de dissipation scalaire. Les analyses de ces termes via la vitesse de déplacement ont révélé que l'influence des hétérogénéités de compo-

sition sur le développement du noyau de flamme se manifeste plutôt dans les contributions réactive et de diffusion différentielle. D'ailleurs, il a été noté que cette dernière contribution, souvent négligée dans les études antérieures, a un poids non négligeable dans la vitesse de déplacement S_d comparé aux autres contributions. Ensuite, la comparaison de la structure locale des flammes stratifiées et homogène a confirmé l'impact observé en laminaire des hétérogénéités sur l'épaisseur de flamme locale qui augmente sous l'effet d'accumulation de richesses pauvres au niveau du front réactif. Enfin, lorsque l'intensité des fluctuations turbulentes est plus élevée, les effets observés en turbulence modérée sont maintenus avec un changement en magnitude. Par exemple, l'effet de la génération de surface devient plus prononcé avec l'augmentation de la moyenne quadratique des fluctuations de vitesse turbulente et entraîne une augmentation de l'efficacité de la combustion par rapport au cas homogène. Pareillement, l'intensité de cet effet croît avec l'augmentation de l'échelle caractéristique de longueur et du taux de ségrégation.

Afin d'étendre les analyses précédentes à un écoulement tridimensionnel, il était nécessaire de s'affranchir de la limitation de coûts élevés des DNS en chimie détaillée. Pour atteindre cet objectif, un modèle chimique optimisé en une seule étape (OSS) est développé pour simuler la propagation des flammes prémélangées dans des réactifs homogènes ou des mélanges stratifiés. L'approche incorpore des procédures d'optimisation pour restituer (i) la température des gaz brûlés en tenant compte de l'influence de l'oxydation partielle et de la dissociation, (ii) la vitesse de propagation de la flamme prémélangée laminaire et (iii) l'épaisseur de la flamme prémélangée laminaire. Ceci conduit à la définition d'un modèle chimique OSS basé sur une loi d'Arrhenius modifiée pour la vitesse de réaction et impliquant une espèce virtuelle dont les propriétés sont déterminées par le biais de calculs préliminaires conduits avec une description cinétique détaillée. La pertinence du modèle OSS a été d'abord évaluée dans un contexte laminaire pour une large gamme de conditions, y compris les variations de la richesse, la température, la pression et la dilution ainsi qu'en considérant plusieurs combustibles, par exemple le méthane, le propane et les PRF (n-heptane et l'iso-octane). Les comparaisons effectuées entre les modèles OSS correspondants avec des descriptions chimiques de référence (réduites ou détaillées) confirment, sans aucun doute, que le modèle simplifié reproduit avec précision les caractéristiques ciblées sur une large gamme de conditions initiales. La réponse chimique du modèle OSS est également examinée dans le cas de flammes de diffusion étirées et les résultats obtenus confirment la pertinence de l'approche proposée. Dans une dernière étape de la procédure de validation, nous avons considéré un modèle OSS et la description chimique de référence correspondante pour simuler la propagation des noyaux de flamme d'iso-octane /air soumis à la courbure, aux effets d'étirement et aux hétérogénéités de richesse. Les simulations sont conduites à la fois dans des conditions laminaires et turbulentes. Les résultats obtenus montrent que, même dans des conditions turbulentes ou en présence de variations de richesse, le modèle de chimie OSS est capable de reproduire de façon satisfaisante la dynamique du front réactif.

Le développement du modèle OSS a permis l'extension des analyses des effets de stratifi-

cation de richesse à des cas tridimensionnels. Les résultats obtenus ont permis de confirmer les tendances observées dans les configurations bidimensionnelles, comme par exemple, la faible influence des hétérogénéités sur les orientations du gradient de la variable de progrès par rapport aux directions principales du tenseur des contraintes de déformation \mathbf{S} . Ainsi, le cas homogène a été considéré pour des analyses des processus qui déterminent les statistiques de ces orientations par le biais d'une étude dynamique et cinématique des orientations scalaire-vitesse. À l'issue de cette dernière, nous avons montré la prédominance des effets de la rotation de la base propre de \mathbf{S} dans le bilan des angles entre les normales aux iso-surfaces de la variable de progrès avec les trois directions principales de \mathbf{S} .

Perspectives

À l'issue de ce travail, certaines orientations futures recommandées pouvant être explorées pour étendre les recherches actuelles.

En terme d'analyse physique, ce travail a mis en évidence que la sensibilité de la réponse de la flamme aux hétérogénéités de composition est d'autant plus élevée que l'échelle de longueur caractéristique du champ hétérogène est grande. On peut ainsi étendre cette étude en considérant une plage plus large des variations de cette quantité en se basant par exemple sur le paramètre L_Φ/δ_L^0 . Il serait également intéressant d'exploiter la base de données DNS actuelle à des fins de validation de modèles existants voire, le développement de nouveaux modèles. Compte tenu de la large gamme des entrées de cette base de données, le choix peut s'orienter vers un modèle indépendant du régime tel que les modèles de PDF présumées ou une extension des modèles de combustion turbulente prémélangée aux configurations hétérogènes en composition. En outre, dans ce travail, les fluctuations de richesse et de température ont été prescrites en imposant une échelle de longueur caractéristique et une PDF de la richesse du mélange des gaz frais. Cela peut être complété par une étude dans laquelle le champ hétérogène contient des gaz brûlés résiduels et/ou résulte de l'évaporation d'un spray de gouttelettes de liquide.

Les suggestions présentées ci-avant nécessitent une optimisation de l'outil de calcul pour une meilleure exploitation des ressources de calcul. En effet, bien que la scalabilité du code utilisée a été améliorée au cours de cette thèse par l'utilisation des bibliothèques `HYPRE` et `CVODE` pour la résolution de l'équation de Poisson et l'intégration raide des termes sources chimiques, une meilleure répartition de charge "*load balancing*" entre les unités de calculs s'impose par la nature de la configuration retenue où la zone de réaction ne représente pas une grande partie du domaine de calcul, impliquant ainsi des temps d'attente non négligeables des CPU qui sont en dehors de cette zone. Cela peut être surmonté grâce à (i) l'implémentation d'un gestionnaire basé sur une approche "maître-esclave" tel que le "*scheduler*" dynamique mentionné dans la référence [221], ou bien (ii) à l'implémentation d'une méthode de raffinement de maillage adaptatif. Des bibliothèques offrant cette dernière possibilité existent et permettent de réduire le temps de développement. Parmi ces solutions, les performances de la bibliothèque `P4EST` [222] ont

attiré notre attention, en particulier en terme d'équilibrage de charge. sa facilité d'utilisation et d'implémentation ont été mises en avant par [Drui *et al.* \[223\]](#).

Concernant le modèle OSS, deux directions distinctes peuvent être envisagées pour améliorer l'approche proposée. Le premier concerne la tabulation ou la proposition d'une loi pour l'énergie d'activation. Par souci de simplicité, elle a été considérée comme constante dans ces travaux. Cependant, l'énergie d'activation est connue pour être plus grande pour les mélanges riches ou pauvres, que pour les mélanges stœchiométriques ou modérément pauvres, voir par exemple [Fernandez-Tarrazo *et al.* \[183\]](#). Une meilleure caractérisation de cette dernière permettra d'étendre les capacités du modèle pour prédire les délais d'auto-inflammation, par exemple. Une autre direction possible pour les développements futurs peut consister à considérer une chimie en deux étapes qui généralise le modèle OSS. Un tel modèle permet d'introduire une espèce fictive qui représente un ensemble d'espèces intermédiaires énergétiques, voir par exemple [Zeldovich *et al.* \[82\]](#) ou [Dold \[181\]](#), Les espèces correspondantes (ou l'ensemble d'intermédiaires) pourraient être qualifiées d'espèces radicalaires bien qu'elles seraient généralement constituées de nombreuses espèces différentes, dont seulement une petite proportion pourrait être des radicaux actifs. Une telle description en deux étapes offre un moyen possible d'améliorer la description de la structure interne de la flamme ($c, \|\nabla c\|$) et de la PDF interne correspondante dans les cas turbulents.

Dérivation de l'équation de transport de la variable de progrès

En supposant que la variable de progrès c est définie à l'aide des fractions massiques de certaines espèces présentes dans le mélanges Y_k et de la fraction de mélange ζ sous la forme :

$$c = \frac{\sum_{k \in \mathcal{S}} Y_k}{\sum_{k \in \mathcal{S}} Y_k^{eq}(\zeta)} \quad (\text{A.1})$$

où \mathcal{S} est l'ensemble des espèces choisies pour construire la variable de progrès c et $Y_k^{eq}(\zeta)$ la fraction massique de l'espèce k à l'équilibre. Pour alléger les expressions par la suite nous adoptons la notation suivante :

$$\mathcal{Y} = \sum_{k \in \mathcal{S}} Y_k, \quad \mathcal{Y}^{eq}(\zeta) = \sum_{k \in \mathcal{S}} Y_k^{eq}(\zeta) \quad (\text{A.2})$$

À partir de la sommation terme à terme des équation de transport des espèces contenues dans \mathcal{S} :

$$\sum_{k \in \mathcal{S}} \rho \frac{DY_k}{Dt} = \sum_{k \in \mathcal{S}} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_k} \right) + \sum_{k \in \mathcal{S}} \dot{\omega}_k \quad (\text{A.3})$$

Il est possible d'exprimer l'équation de transport de \mathcal{Y} comme :

$$\rho \frac{D\mathcal{Y}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_y \frac{\partial \mathcal{Y}}{\partial x_k} \right) + \dot{\omega}_y \quad (\text{A.4})$$

avec :

$$\dot{\omega}_y = \sum_{k \in \mathcal{S}} \dot{\omega}_k \quad (\text{A.5a})$$

$$D_y = \sum_{k \in \mathcal{S}} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_k} \left(\sum_{k \in \mathcal{S}} \frac{\partial Y_k}{\partial x_k} \right)^{-1} \quad (\text{A.5b})$$

D'après l'équation (A.1), la fraction massique \mathcal{Y} peut être considérée comme une fonction de c et ζ :

$$\mathcal{Y}(x_i, t) = \mathcal{Y}[c(x_i, t), \zeta(x_i, t)] \quad (\text{A.6})$$

Ce qui permet d'exprimer sa dérivée particulaire comme :

$$\frac{D\mathcal{Y}}{Dt} = \frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial c} \frac{Dc}{Dt} + \frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial\tilde{\xi}} \frac{D\tilde{\xi}}{Dt} \quad (\text{A.7})$$

En réorganisant cette équation, l'équation de transport de c s'exprime :

$$\rho \frac{Dc}{Dt} = \left(\frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial c} \right)^{-1} \left[\rho \frac{D\mathcal{Y}}{Dt} - \rho \frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial\tilde{\xi}} \frac{D\tilde{\xi}}{Dt} \right] \quad (\text{A.8})$$

ou encore en tant compte de l'équation (A.4) :

$$\rho \frac{Dc}{Dt} = \left(\frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial c} \right)^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_y \frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial x_k} \right) + \dot{\omega}_y - \rho \frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial\tilde{\xi}} \frac{D\tilde{\xi}}{Dt} \right] \quad (\text{A.9})$$

Les dérivées spatiales de \mathcal{Y} se décomposent également en des dérivées partielles par rapport à c et $\tilde{\xi}$:

$$\frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial x_k} = \frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial x_k} + \frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial\tilde{\xi}} \frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_k} \quad (\text{A.10})$$

de manière à ce que l'on puisse réécrire le terme diffusif de \mathcal{Y} en :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_y \frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial x_k} \right) &= \frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial c} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_y \frac{\partial c}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial\tilde{\xi}} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_y \frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_k} \right) \\ &+ \rho \chi_c \frac{\partial^2\mathcal{Y}}{\partial c^2} + \rho \chi_{\tilde{\xi}} \frac{\partial^2\mathcal{Y}}{\partial\tilde{\xi}^2} + 2\rho \chi_{c,\tilde{\xi}} \frac{\partial^2\mathcal{Y}}{\partial c \partial\tilde{\xi}} \end{aligned}$$

avec :

$$\chi_c = D_y \frac{\partial c}{\partial x_k} \frac{\partial c}{\partial x_k} \quad (\text{A.11})$$

$$\chi_{\tilde{\xi}} = D_y \frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_k} \frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_k} \quad (\text{A.12})$$

$$\chi_{c,\tilde{\xi}} = D_y \frac{\partial c}{\partial x_k} \frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_k} \quad (\text{A.13})$$

D'autre part, les dérivées partielles de \mathcal{Y} par rapport à c et $\tilde{\xi}$ s'expriment :

$$\begin{aligned} \frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial c} &= \mathcal{Y}^{eq} \quad , \quad \frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial\tilde{\xi}} = c \frac{d\mathcal{Y}^{eq}}{d\tilde{\xi}} \\ \frac{\partial^2\mathcal{Y}}{\partial c \partial\tilde{\xi}} &= \frac{d\mathcal{Y}^{eq}}{d\tilde{\xi}} \quad , \quad \frac{\partial^2\mathcal{Y}}{\partial\tilde{\xi}^2} = \frac{d^2\mathcal{Y}^{eq}}{d\tilde{\xi}^2} \quad , \quad \frac{\partial^2\mathcal{Y}}{\partial c^2} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

et donc :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_y \frac{\partial\mathcal{Y}}{\partial x_k} \right) &= \mathcal{Y}^{eq} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_y \frac{\partial c}{\partial x_k} \right) + c \frac{d\mathcal{Y}^{eq}}{d\tilde{\xi}} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_y \frac{\partial\tilde{\xi}}{\partial x_k} \right) \\ &+ \rho \frac{d^2\mathcal{Y}^{eq}}{d\tilde{\xi}^2} \chi_{\tilde{\xi}} + 2\rho \frac{d\mathcal{Y}^{eq}}{d\tilde{\xi}} \chi_{c,\tilde{\xi}} \end{aligned}$$

L'équation (A.9) devient ensuite :

$$\begin{aligned} \rho \frac{Dc}{Dt} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_y \frac{\partial c}{\partial x_k} \right) + \frac{c}{\mathcal{Y}^{eq}} \frac{d\mathcal{Y}^{eq}}{d\zeta} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_y \frac{\partial \zeta}{\partial x_k} \right) + \rho \frac{1}{\mathcal{Y}^{eq}} \frac{d^2 \mathcal{Y}^{eq}}{d\zeta^2} \chi_\zeta + 2\rho \frac{1}{\mathcal{Y}^{eq}} \frac{d\mathcal{Y}^{eq}}{d\zeta} \chi_{c,\zeta} \\ &+ \frac{\dot{\omega}_y}{\mathcal{Y}^{eq}} - \rho \frac{c}{\mathcal{Y}^{eq}} \frac{d\mathcal{Y}^{eq}}{d\zeta} \frac{D\zeta}{Dt} \end{aligned}$$

que l'on reformule avec des notations compactes en :

$$\rho \frac{Dc}{Dt} = \nabla(\rho D_c \nabla c) + \dot{\omega}_c + \mathcal{A}_\zeta c \chi_\zeta + 2\mathcal{B}_\zeta \chi_{c,\zeta} - \frac{\mathcal{B}_\zeta c}{\rho} \left(\rho \frac{D\zeta}{Dt} - \nabla(\rho D_c \nabla \zeta) \right) \quad (\text{A.15})$$

avec :

$$\begin{aligned} D_c &= D_y \quad , \quad \dot{\omega}_c = \dot{\omega}_y / \mathcal{Y}^{eq} \\ \mathcal{A}_\zeta &= \frac{\rho}{\mathcal{Y}^{eq}} \frac{d^2 \mathcal{Y}^{eq}}{d\zeta^2} \quad , \quad \mathcal{B}_\zeta = \frac{\rho}{\mathcal{Y}^{eq}} \frac{d\mathcal{Y}^{eq}}{d\zeta} \end{aligned}$$

Enfin, comme :

$$\rho \frac{D\zeta}{Dt} = \nabla(\rho D_\zeta \nabla \zeta) \quad (\text{A.16})$$

l'équation de transport de la variable de progrès s'écrit :

$$\rho \frac{Dc}{Dt} = \nabla(\rho D_c \nabla c) + \dot{\omega}_c + \mathcal{A}_\zeta c \chi_\zeta + 2\mathcal{B}_\zeta \chi_{c,\zeta} + \frac{\mathcal{B}_\zeta c}{\rho} \nabla [\rho (D_c - D_\zeta) \nabla \zeta] \quad (\text{A.17})$$

Dérivation de l'équation de transport du taux de dissipation scalaire

Il est possible de récrire l'équation de transport du SDR en occultant les termes supplémentaires provenant des effets de diffusivité et de ceux des hétérogénéités de composition. Cette écriture alternative fera appel aux grandeurs présentes dans le cadre de l'approche géométrique : la SDF $\sigma = \|\nabla c\|$, les normales au front de flamme $\mathbf{n} = -\nabla c / \|\nabla c\|$ et sa courbure $\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n} / 2$.

L'équation de transport de c , s'écrit sous sa forme propagative :

$$\frac{Dc}{Dt} = -S_d \mathbf{n} \cdot \nabla c = S_d \|\nabla c\| \quad (\text{B.1})$$

Afin de dériver l'équation de transport pour le SDR instantané $\chi_c = D_c \nabla c \cdot \nabla c$, nous allons différencier cette équation par rapport à l'espace puis multiplier par $D_c \nabla c$:

$$\nabla \left[\rho \frac{Dc}{Dt} \right] \cdot D_c \nabla c = \nabla [S_d \|\nabla c\|] \cdot D_c \nabla c \quad (\text{B.2})$$

La dérivée $\nabla \left[\rho \frac{Dc}{Dt} \right]$ se décompose en :

$$\nabla \left[\rho \frac{Dc}{Dt} \right] = \nabla \rho \frac{Dc}{Dt} + \rho \nabla \left[\frac{Dc}{Dt} \right] = \nabla \rho \frac{Dc}{Dt} + \rho \left[\frac{\partial \nabla c}{\partial t} + \nabla (\mathbf{u} \cdot \nabla c) \right]$$

or :

$$\nabla (\mathbf{u} \cdot \nabla c) = \mathbf{u} \cdot \nabla (\nabla c) + \nabla (\mathbf{u}) \cdot \nabla c \quad (\text{B.3})$$

donc :

$$\begin{aligned} \nabla \left[\rho \frac{Dc}{Dt} \right] &= \nabla (\rho) \frac{Dc}{Dt} + \rho \left[\frac{\partial \nabla c}{\partial t} + \nabla (\mathbf{u} \cdot \nabla c) \right] = \nabla \rho \frac{Dc}{Dt} + \rho \left[\frac{\partial \nabla c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla (\nabla c) + \nabla (\mathbf{u}) \cdot \nabla c \right] \\ &= \nabla \rho \frac{Dc}{Dt} + \rho \frac{D \nabla c}{Dt} + \rho \nabla (\mathbf{u}) \cdot \nabla c \end{aligned}$$

Il s'ensuit donc que :

$$\nabla \left[\rho \frac{Dc}{Dt} \right] = \nabla \rho \frac{Dc}{Dt} + \rho \frac{D \nabla c}{Dt} + \rho \nabla (\mathbf{u}) \cdot \nabla c \quad (\text{B.4})$$

Ainsi :

$$\nabla \left[\rho \frac{Dc}{Dt} \right] \cdot D_c \nabla c = D_c \frac{Dc}{Dt} \nabla \rho \cdot \nabla c + \rho \frac{D\chi_c}{Dt} - \rho \frac{\|\nabla c\|^2}{2} \frac{Dc}{Dt} + \rho D_c \nabla c \nabla c : \nabla(\mathbf{u}) \quad (\text{B.5})$$

En remplaçant $\frac{Dc}{Dt}$ par $S_d \|\nabla c\|$ dans (B.5) on obtient :

$$2\nabla [\rho S_d \|\nabla c\|] \cdot D_c \nabla c = 2D_c S_d \|\nabla c\| \nabla \rho \cdot \nabla c + \rho \frac{D\chi_c}{Dt} - \rho \|\nabla c\|^2 \frac{DD_c}{Dt} + 2\rho D_c \nabla c \nabla c : \nabla(\mathbf{u}) \quad (\text{B.6})$$

■ Le premier terme du second membre de (B.5) se réécrit :

$$2D_c S_d \|\nabla c\| \nabla \rho \cdot \nabla c = 2D_c S_d \frac{\|\nabla c\|^2}{\|\nabla c\|} \nabla \rho \cdot \nabla c = -2D_c S_d \chi_c \nabla \rho \cdot \mathbf{n} \quad (\text{B.7})$$

■ Le premier terme du premier membre de (B.5) se décompose en :

$$\begin{aligned} 2\nabla [\rho S_d \|\nabla c\|] \cdot D_c \nabla c &= 2D_c [\rho S_d \nabla(\|\nabla c\|) + \nabla(\rho S_d) \|\nabla c\|] \cdot \nabla c \\ &= 2\rho S_d \nabla(\|\nabla c\|) \cdot \nabla c + 2D_c \|\nabla c\| \nabla(\rho S_d) \cdot \nabla c \\ &= 2\rho S_d \nabla(\|\nabla c\|) \cdot \nabla c + 2\rho D_c S_d \nabla^2 c \|\nabla c\| - 2\rho D_c S_d \nabla^2 c \|\nabla c\| + 2D_c \|\nabla c\| \nabla(\rho S_d) \cdot \nabla c \\ &= 2\rho S_d D_c \left[\nabla(\|\nabla c\|) \cdot \nabla c - \nabla^2 c \|\nabla c\| \right] + 2D_c \|\nabla c\| \left[\rho S_d \nabla^2 c + \nabla(\rho S_d) \cdot \nabla c \right] \\ &= 2\rho S_d D_c \|\nabla c\|^2 \left[\frac{\nabla(\|\nabla c\|)}{\|\nabla c\|^2} \cdot \nabla c - \frac{\nabla \cdot \nabla c}{\|\nabla c\|} \right] + 2\rho D_c \|\nabla c\| [\rho S_d \nabla \cdot \nabla c + \nabla(\rho S_d) \cdot \nabla c] \\ &= 2\rho S_d D_c \|\nabla c\|^2 \left[-\nabla \left(\frac{1}{\|\nabla c\|} \right) \cdot \nabla c - \frac{\nabla \cdot \nabla c}{\|\nabla c\|} \right] + 2\rho D_c \|\nabla c\| [\rho S_d \nabla \cdot \nabla c + \nabla(\rho S_d) \cdot \nabla c] \\ &= 2\rho S_d D_c \|\nabla c\|^2 \nabla \cdot \left(-\frac{\nabla c}{\|\nabla c\|} \right) + 2\rho D_c \|\nabla c\| \nabla(\rho S_d \nabla c) \\ &= 2\rho S_d \chi_c \nabla \cdot \mathbf{n} - 2\rho D_c \|\nabla c\| \nabla(\rho S_d \|\nabla c\| \mathbf{n}) \end{aligned}$$

Enfin l'équation se réarrange comme :

$$\begin{aligned} \rho \frac{D\chi_c}{Dt} &= -2\rho D_c \nabla c \nabla c : \nabla \mathbf{u} + 2\rho S_d \chi_c \nabla \cdot \mathbf{n} - 2\rho D_c \|\nabla c\| \nabla(\rho S_d \|\nabla c\| \mathbf{n}) + 2S_d \chi_c \mathbf{n} \cdot \nabla \rho + \rho \|\nabla c\|^2 \frac{DD_c}{Dt} \\ &= -2\rho D_c \nabla c \nabla c : \nabla \mathbf{u} + 4\rho S_d \chi_c \kappa - 2D_c \sigma \nabla(\rho S_d \sigma \mathbf{n}) + 2S_d \chi_c \mathbf{n} \cdot \nabla \rho + \rho \|\nabla c\|^2 \frac{DD_c}{Dt} \\ &= -2\rho D_c \nabla c \nabla c : \nabla \mathbf{u} + 2S_d (2\rho \kappa + \mathbf{n} \cdot \nabla \rho) \chi_c - 2D_c \sigma \nabla(\rho S_d \sigma \mathbf{n}) + \rho \|\nabla c\|^2 \frac{DD_c}{Dt} \\ &= -2\rho D_c \nabla c \nabla c : \nabla \mathbf{u} + 2S_d (2\rho \kappa + \mathbf{n} \cdot \nabla \rho) \chi_c - 2\frac{\chi_c}{\sigma} \nabla(\rho S_d \sigma \mathbf{n}) + \rho \frac{\chi_c}{D_c} \frac{DD_c}{Dt} \\ &= -2\rho D_c \nabla c \nabla c : \nabla \mathbf{u} + \left(4\rho S_d \kappa + 2S_d \mathbf{n} \cdot \nabla \rho - \frac{2}{\sigma} \nabla(\rho S_d \sigma \mathbf{n}) + \rho \frac{D \ln(D_c)}{Dt} \right) \chi_c \end{aligned}$$

D'où :

$$\rho \frac{D\chi_c}{Dt} = -2\rho D_c \nabla c \nabla c : \nabla \mathbf{u} + \left(4\rho S_d \kappa + 2S_d \mathbf{n} \cdot \nabla \rho - \frac{2}{\sigma} \nabla(\rho S_d \sigma \mathbf{n}) + \rho \frac{D \ln(D_c)}{Dt} \right) \chi_c \quad (\text{B.8})$$

Bibliographie

- [1] A. C. ALKIDAS : Combustion advancements in gasoline engines. *Energy Conversion and Management*, 48 (11):2751–2761, 2007.
- [2] M. C. DRAKE et D. C. HAWORTH : Advanced gasoline engine development using optical diagnostics and numerical modeling. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(1):99–124, 2007.
- [3] S. WANG, V. YANG, G. HSIAO, S-Y. HSIEH et H. C. MONGIA : Large-eddy simulations of gas-turbine swirl injector flow dynamics. *Journal of Fluid Mechanics*, 583:99–122, 2007.
- [4] J. HÉLIE et A. TROUVÉ : A modified coherent flame model to describe turbulent flame propagation in mixtures with variable composition. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(1):193–201, 2000.
- [5] R. W. BILGER, S. B. POPE, K. N. C. BRAY et J. F. DRISCOLL : Paradigms in turbulent combustion research. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1):21–42, 2005.
- [6] S. GORDON et B. J. MCBRIDE : Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks, and Chapman-Jouguet detonations. *Nasa sp-273*, 1971.
- [7] F. A. LINDEMANN, S. ARRHENIUS, I. LANGMUIR, N. R. DHAR, J. PERRIN et W. C. MCC. LEWIS : Discussion on “the radiation theory of chemical action”. *Trans. Faraday Soc.*, 17:598–606, 1922.
- [8] R. G. GILBERT, K. LUTHER et J. TROE : Theory of thermal unimolecular reactions in the fall-off range. II. Weak collision rate constants. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, 87(2):169–177, 1983.
- [9] P. H. STEWART, C. W. LARSON et D. M. GOLDEN : Pressure and temperature dependence of reactions proceeding via a bound complex. 2. Application to $2\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}$. *Combustion and Flame*, 75(1):25–31, 1989.
- [10] A. ERN et V. GIOVANGIGLI : *Multicomponent transport algorithms*, volume 24. Springer Science & Business Media, 1994.
- [11] J. O. HIRSCHFELDER, C. F. CURTISS, R. B. BIRD et M. G. MAYER : *Molecular theory of gases and liquids*, volume 26. Wiley New York, 1954.
- [12] V. GIOVANGIGLI : *Multicomponent flow modeling. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology*, 1999.
- [13] C. R. WILKE : A viscosity equation for gas mixtures. *The journal of chemical physics*, 18(4):517–519, 1950.
- [14] S. MATHUR, P. K. TONDON et S. C. SAXENA : Thermal conductivity of binary, ternary and quaternary mixtures of rare gases. *Molecular physics*, 12(6):569–579, 1967.
- [15] J. RÉVEILLON, C. PÉRA et Z. BOUALI : Examples of the potential of DNS for the understanding of reactive multiphase flows. *International Journal of Spray and Combustion Dynamics*, 3(1):63–92, 2011.
- [16] Z. BOUALI, C. PÉRA et J. RÉVEILLON : Numerical analysis of the influence of two-phase flow mass and heat transfer on n-heptane autoignition. *Combustion and Flame*, 159(6):2056–2068, 2012.
- [17] M. CHAUVY, B. DELHOM, J. RÉVEILLON et F-X. DEMOULIN : Flame/wall interactions: laminar study of unburnt HC formation. *Flow, turbulence and combustion*, 84(3):369–396, 2010.

- [18] D. KAH, F. LAURENT, L. FRÉRET, S. DE CHAISEMARTIN, R. O. FOX, J. RÉVEILLON et M. MASSOT : Eulerian quadrature-based moment models for dilute polydisperse evaporating sprays. *Flow, Turbulence and Combustion*, 85(3-4):649–676, 2010.
- [19] J. RÉVEILLON et F-X. DEMOULIN : Effects of the preferential segregation of droplets on evaporation and turbulent mixing. *Journal of Fluid Mechanics*, 583:273–302, 2007.
- [20] J. RÉVEILLON et F-X. DEMOULIN : Evaporating droplets in turbulent reacting flows. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2):2319–2326, 2007.
- [21] L. FRÉRET, O. THOMINE, J. RÉVEILLON, S. de CHAISEMARTIN, F. LAURENT et M. MASSOT : On the role of preferential segregation in flame dynamics in polydisperse evaporating sprays. In *Proceedings of the Summer Program*, pages 383–392, 2010.
- [22] H. MEFTAH, J. RÉVEILLON, A. MIR et F-X. DEMOULIN : SGS analysis of the evolution equations of the mixture fraction and the progress variable variances in the presence of spray combustion. *International Journal of Spray and Combustion Dynamics*, 2(1):21–47, 2010.
- [23] J. DOMBARD, B. LEVEUGLE, L. SELLE, J. RÉVEILLON, T. POINSOT et Y. D’ANGELO : Modeling heat transfer in dilute two-phase flows using the Mesoscopic Eulerian Formalism. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55(5-6):1486–1495, 2012.
- [24] C. PÉRA, S. CHEVILLARD et J. REVEILLON : Effects of residual burnt gas heterogeneity on early flame propagation and on cyclic variability in spark-ignited engines. *Combustion and Flame*, 160(6):1020–1032, 2013.
- [25] C. PÉRA, V. KNOP, S. CHEVILLARD et J. RÉVEILLON : Effects of residual burnt gas heterogeneity on cyclic variability in lean-burn SI engines. *Flow, Turbulence and Combustion*, 92(4):837–863, 2014.
- [26] C. PÉRA, V. KNOP et J. RÉVEILLON : Influence of flow and ignition fluctuations on cycle-to-cycle variations in early flame kernel growth. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(3):2897–2905, 2015.
- [27] S. CHEVILLARD, J-B. MICHEL, C. PÉRA et J. RÉVEILLON : Evaluation of different turbulent combustion models based on tabulated chemistry using DNS of heterogeneous mixtures. *Combustion Theory and Modelling*, 21(3):440–465, 2017.
- [28] A. MAJDA et J. SETHIAN : The derivation and numerical solution of the equations for zero Mach number combustion. *Combustion science and technology*, 42(3-4):185–205, 1985.
- [29] S. K. LELE : Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of computational physics*, 103(1):16–42, 1992.
- [30] A. WRAY : Minimal storage time advancement schemes for spectral methods. *NASA Ames Research Center, California, Report No. MS*, 202, 1990.
- [31] R. J. KEE, F. M. RUPLEY et J. A. MILLER : Chemkin-II: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. Rapport technique, Sandia National Labs., Livermore, CA (USA), 1989.
- [32] Z. BOUALI : *Impact d’une phase liquide dispersée sur le processus d’auto-inflammation : prise en compte d’une chimie détaillée*. Thèse de doctorat, 2011. Thèse de doctorat dirigée par Reveillon, J. Physique Rouen 2011.
- [33] P. N. BROWN, G. D. BYRNE et A. C. HINDMARSH : VODE: A variable-coefficient ODE solver. *SIAM journal on scientific and statistical computing*, 10(5):1038–1051, 1989.
- [34] S. D. COHEN, A. C. HINDMARSH et P. F. DUBOIS : CVODE, a stiff/nonstiff ODE solver in C. *Computers in physics*, 10(2):138–143, 1996.
- [35] A. J. CHORIN : Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of computation*, 22(104):745–762, 1968.
- [36] J. KIM et P. MOIN : Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of computational physics*, 59(2):308–323, 1985.
- [37] J. ADAMS, P. SWARZTRAUER et R. SWEET : FISHPAK: Efficient FORTRAN subprograms for the solution of separable elliptic partial differential equations, Version 3. *National Center for Atmospheric Res, Boulder, Colo*, 1978.
- [38] P. HÉNON, P. RAMET et J. ROMAN : PASTIX: a high-performance parallel direct solver for sparse symmetric positive definite systems. *Parallel Computing*, 28(2):301–321, 2002.
- [39] P. R. AMESTOY, I. S. DUFF et J-Y L’EXCELLENT : Multifrontal parallel distributed symmetric and unsymmetric solvers. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 184(2-4):501–520, 2000.

- [40] D. KOUROUNIS, A. FUCHS et O. SCHENK : Towards the Next Generation of Multiperiod Optimal Power Flow Solvers. *IEEE Transactions on Power Systems*, PP(99):1–10, 2018. ISSN 0885-8950.
- [41] A. H. BAKER, R. D. FALGOUT, T. V. KOLEV et U. M. YANG : Scaling hypre’s multigrid solvers to 100,000 cores. *In High-Performance Scientific Computing*, pages 261–279. Springer, 2012.
- [42] A. BAKER, T. GAMBLIN, . SCHULZ et U. M. YANG : Challenges of scaling algebraic multigrid across modern multicore architectures. Rapport technique, Lawrence Livermore National Lab.(LLNL), Livermore, CA (United States), 2010.
- [43] R. D. FALGOUT et U. M. YANG : hypre: A library of high performance preconditioners. *In International Conference on Computational Science*, pages 632–641. Springer, 2002.
- [44] Y. SAAD : *Iterative methods for sparse linear systems*, volume 82. siam, 2003.
- [45] V. A. SABELNIKOV et A. N. LIPATNIKOV : Recent advances in understanding of thermal expansion effects in premixed turbulent flames. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 49:91–117, 2017.
- [46] F. A. WILLIAMS : Criteria for existence of wrinkled laminar flame structure of turbulent premixed flames. *Combustion and Flame*, 26:269–270, 1976.
- [47] R. BORGHİ : On the structure and morphology of turbulent premixed flames. *In Recent advances in the Aerospace Sciences*, pages 117–138. Springer, 1985.
- [48] N. PETERS : The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *Journal of Fluid mechanics*, 384:107–132, 1999.
- [49] A. MURA et M. CHAMPION : Relevance of the Bray number in the small-scale modeling of turbulent premixed flames. *Combustion and Flame*, 156(3):729–733, 2009.
- [50] D. VEYNANTE et L. VERVISCH : Turbulent combustion modeling. *Progress in energy and combustion science*, 28(3):193–266, 2002.
- [51] H. PITSCH : A consistent level set formulation for large-eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 143(4):587–598, 2005.
- [52] F. A. WILLIAMS : Turbulent combustion. *The mathematics of combustion*, 2:267–294, 1985.
- [53] Frank E MARBLE et James E BROADWELL : The coherent flame model for turbulent chemical reactions. Rapport technique, DTIC Document, 1977.
- [54] S. M. CANDEL et T. J. POINSOT : Flame stretch and the balance equation for the flame area. *Combustion Science and Technology*, 70(1-3):1–15, 1990.
- [55] L. VERVISCH, E. BIDAUX, K. N. C. BRAY et W. KOLLMANN : Surface density function in premixed turbulent combustion modeling, similarities between probability density function and flame surface approaches. *Physics of Fluids*, 7(10):2496–2503, 1995.
- [56] RW BILGER : The structure of turbulent nonpremixed flames. *In Symposium (International) on Combustion*, volume 22, pages 475–488. Elsevier, 1989.
- [57] C. M. MÜLLER, H. BREITBACH et N. PETERS : Partially premixed turbulent flame propagation in jet flames. *In Symposium (International) on Combustion*, volume 25, pages 1099–1106. Elsevier, 1994.
- [58] T. POINSOT, D. VEYNANTE, A. TROUVÉ et G. RUETSCH : Turbulent flame propagation in partially premixed flames. 1996.
- [59] J. HÉLIE et A. TROUVÉ : Turbulent flame propagation in partially premixed combustion. *In Symposium (International) on Combustion*, volume 27, pages 891–898. Elsevier, 1998.
- [60] D. HAWORTH, R. J. BLINT, B. CUENOT et T. POINSOT : Numerical simulation of turbulent propane–air combustion with nonhomogeneous reactants. *Combustion and Flame*, 121(3):395–417, 2000.
- [61] K. BRAY, P. DOMINGO et L. VERVISCH : Role of the progress variable in models for partially premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 141(4):431–437, 2005.
- [62] A. TROUVÉ et T. POINSOT : The evolution equation for the flame surface density in turbulent premixed combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 278:1–31, 1994.
- [63] F. FICHOT, F. LACAS, D. VEYNANTE et S. CANDEL : One-dimensional propagation of a premixed turbulent flame with a balance equation for the flame surface density. *Combustion science and technology*, 90(1-4):35–60, 1993.

- [64] S. B. POPE : The evolution of surfaces in turbulence. *International journal of engineering science*, 26(5):445–469, 1988.
- [65] S. B. POPE : Computations of turbulent combustion: progress and challenges. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 23, pages 591–612. Elsevier, 1991.
- [66] R. BORGHİ : Turbulent premixed combustion: Further discussions on the scales of fluctuations. *Combustion and Flame*, 80(3-4):304–312, 1990.
- [67] T. MANTEL et R. BORGHİ : A new model of premixed wrinkled flame propagation based on a scalar dissipation equation. *Combustion and Flame*, 96(4):443–457, 1994.
- [68] A. MURA et R. BORGHİ : Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion. *Combustion and flame*, 133:193–196, 2003.
- [69] N. SWAMINATHAN et K. N. C. BRAY : Effect of dilatation on scalar dissipation in turbulent premixed flames. *Combustion and Flame*, 143(4):549–565, 2005.
- [70] N. CHAKRABORTY, J. W. ROGERSON et N. SWAMINATHAN : A priori assessment of closures for scalar dissipation rate transport in turbulent premixed flames using direct numerical simulation. *Physics of Fluids*, 20(4):045106, 2008.
- [71] T. LIEUWEN, Y. NEUMEIER et B. T. ZINN : The role of unmixedness and chemical kinetics in driving combustion instabilities in lean premixed combustors. *Combustion Science and Technology*, 135(1-6):193–211, 1998.
- [72] A. H. LEFEBVRE : *Gas turbine combustion*. CRC press, 1998.
- [73] J. F. DRISCOLL et C. C. RASMUSSEN : Correlation and analysis of blowout limits of flames in high-speed airflows. *Journal of propulsion and power*, 21(6):1035–1044, 2005.
- [74] D. J. MICKA et J. F. DRISCOLL : Stratified jet flames in a heated (1390 K) air cross-flow with autoignition. *Combustion and Flame*, 159(3):1205–1214, 2012.
- [75] E. ACHLEITNER, H. BÄCKER et A. FUNAIOLI : Direct injection systems for otto engines. Rapport technique, SAE Technical Paper, 2007.
- [76] P. G. ALEIFERIS, Y. HARDALUPAS, A. M. K. P. TAYLOR, K. ISHII et Y. URATA : Flame chemiluminescence studies of cyclic combustion variations and air-to-fuel ratio of the reacting mixture in a lean-burn stratified-charge spark-ignition engine. *Combustion and Flame*, 136(1-2):72–90, 2004.
- [77] M. C. DRAKE, T. D. FANSLER et A. M. LIPPERT : Stratified-charge combustion: modeling and imaging of a spray-guided direct-injection spark-ignition engine. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(2):2683–2691, 2005.
- [78] Y. YANG, J. E. DEC, N. DRONNIU et M. SJÖBERG : Tailoring HCCI heat-release rates with partial fuel stratification: Comparison of two-stage and single-stage-ignition fuels. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2):3047–3055, 2011.
- [79] N. PASQUIER, B. LECORDIER, M. TRINITE et A. CESSOU : An experimental investigation of flame propagation through a turbulent stratified mixture. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(1):1567–1574, 2007.
- [80] Y. S. CHO et D. A. SANTAVICCA : The effect of incomplete fuel-air mixing on spark-ignited flame kernel growth. Rapport technique, SAE Technical Paper, 1993.
- [81] J. ZHOU, K. NISHIDA, T. YOSHIZAKI et H. HIROYASU : Effects of mixture heterogeneity on flame propagation in a constant volume combustion chamber. Rapport technique, SAE Technical Paper, 1997.
- [82] I. A. ZELDOVICH, G. I. BARENBLATT, V. B. LIBROVICH et G. M. MAKHVILADZE : *Mathematical theory of combustion and explosions*. Consultants Bureau, New York, NY, 1985.
- [83] N. PETERS : *Turbulent combustion*. Cambridge university press, 2000.
- [84] F. A. WILLIAMS : *Combustion Theory* 2nd, 1985.
- [85] A. N. LIPATNIKOV : Stratified turbulent flames: Recent advances in understanding the influence of mixture inhomogeneities on premixed combustion and modeling challenges. *Progress in Energy and Combustion Science*, 62:87–132, 2017.
- [86] P. GIRARD, M. HUNEAU, C. RABASSE et J. C. LEYER : Flame propagation through unconfined and confined hemispherical stratified gaseous mixtures. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 17, pages 1247–1255. Elsevier, 1979.

- [87] S. MEARES et A. R. MASRI : A modified piloted burner for stabilizing turbulent flames of inhomogeneous mixtures. *Combustion and Flame*, 161(2):484–495, 2014.
- [88] S. MEARES, V. N. PRASAD, G. MAGNOTTI, R. S. BARLOW et A. R. MASRI : Stabilization of piloted turbulent flames with inhomogeneous inlets. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(2):1477–1484, 2015.
- [89] R. LAUVERGNE et F. N. EGOLFOPOULOS : Unsteady response of C₃H₃/Air laminar premixed flames submitted to mixture composition oscillations. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(2):1841–1850, 2000.
- [90] R. SANKARAN et H. G. IM : Dynamic flammability limits of methane/air premixed flames with mixture composition fluctuations. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(1):77–84, 2002.
- [91] M. S. SWEENEY, S. HOCHGREB, M. J. DUNN et R. S. BARLOW : The structure of turbulent stratified and premixed methane/air flames I: Non-swirling flows. *Combustion and flame*, 159(9):2896–2911, 2012.
- [92] M. S. SWEENEY, S. HOCHGREB, M. J. DUNN et R. S. BARLOW : The structure of turbulent stratified and premixed methane/air flames II: Swirling flows. *Combustion and Flame*, 159(9):2912–2929, 2012.
- [93] N. ISHIKAWA : A diffusion combustor and methane-air flame propagation in concentration gradient fields. *Combustion Science and Technology*, 30(1-6):185–203, 1983.
- [94] N. ISHIKAWA : Combustion of stratified methane/air layers. *Combustion Science and Technology*, 30(1-6):311–325, 1983.
- [95] A. PIRES DA CRUZ, A. M. DEAN et J. M. GRENDA : A numerical study of the laminar flame speed of stratified methane/air flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(2):1925–1932, 2000.
- [96] C. GALIZZI et D. ESCUDIÉ : Experimental analysis of an oblique laminar flame front propagating in a stratified flow. *Combustion and flame*, 145(3):621–634, 2006.
- [97] T. KANG et D. C. KYRITSIS : Methane flame propagation in compositionally stratified gases. *Combustion science and technology*, 177(11):2191–2210, 2005.
- [98] T. KANG et D. C. KYRITSIS : Departure from quasi-homogeneity during laminar flame propagation in lean, compositionally stratified methane–air mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(1):1075–1083, 2007.
- [99] T. KANG et D. C. KYRITSIS : Phenomenology of methane flame propagation into compositionally stratified, gradually richer mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(1):979–985, 2009.
- [100] T. KANG et D. C. KYRITSIS : Theoretical investigation of flame propagation through compositionally stratified methane–air mixtures. *Combustion Theory and Modelling*, 13(4):705–719, 2009.
- [101] T. STAHLER, D. GEYER, G. MAGNOTTI, P. TRUNK, M. J. DUNN, R. S. BARLOW et A. DREIZLER : Multiple conditioned analysis of the turbulent stratified flame A. *Proceedings of the Combustion Institute*, 36(2):1947–1955, 2017.
- [102] O. DEGARDIN, B. RENOU et A. M. BOUKHALFA : Simultaneous measurement of temperature and fuel mole fraction using acetone planar induced fluorescence and Rayleigh scattering in stratified flames. *Experiments in Fluids*, 40(3):452–463, 2006.
- [103] V. ROBIN, A. MURA, M. CHAMPION, O. DEGARDIN, B. RENOU et M. BOUKHALFA : Experimental and numerical analysis of stratified turbulent V-shaped flames. *Combustion and flame*, 153(1-2):288–315, 2008.
- [104] J. ZHOU, K. NISHIDA, T. YOSHIZAKI et H. HIROYASU : Flame propagation characteristics in a heterogeneous concentration distribution of a fuel-air mixture. Rapport technique, SAE Technical Paper, 1998.
- [105] C. JIMÉNEZ, B. CUENOT, T. POINSOT et D. HAWORTH : Numerical simulation and modeling for lean stratified propane-air flames. *Combustion and Flame*, 128(1-2):1–21, 2002.
- [106] D. GARRIDO-LOPEZ et S. SARKAR : Effects of imperfect premixing coupled with hydrodynamic instability on flame propagation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1):621–628, 2005.
- [107] R. W. GROUT, N. SWAMINATHAN et R. S. CANT : Effects of compositional fluctuations on premixed flames. *Combustion Theory and Modelling*, 13(5):823–852, 2009.
- [108] P. ANSELMO-FILHO, S. HOCHGREB, R. S. BARLOW et R. S. CANT : Experimental measurements of geometric properties of turbulent stratified flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(2):1763–1770, 2009.
- [109] M. S. SWEENEY, S. HOCHGREB et R. S. BARLOW : The structure of premixed and stratified low turbulence flames. *Combustion and Flame*, 158(5):935–948, 2011.

- [110] B. BÖHM, J. H. FRANK et A. DREIZLER : Temperature and mixing field measurements in stratified lean premixed turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1):1583–1590, 2011.
- [111] M. S. SWEENEY, S. HOCHGREB, M. J. DUNN et R. S. BARLOW : Multiply conditioned analyses of stratification in highly swirling methane/air flames. *Combustion and Flame*, 160(2):322–334, 2013.
- [112] E. S. RICHARDSON et J. H. CHEN : Analysis of turbulent flame propagation in equivalence ratio-stratified flow. *Proceedings of the Combustion Institute*, 36(2):1729–1736, 2017.
- [113] B. RENOU, E. SAMSON et A. BOUKHALFA : An experimental study of freely propagating turbulent propane/air flames in stratified inhomogeneous mixtures. *Combustion science and technology*, 176(11):1867–1890, 2004.
- [114] A. BONALDO et J. B. KELMAN : Experimental annular stratified flames characterisation stabilised by weak swirl. *Combustion and Flame*, 156(4):750–762, 2009.
- [115] W. J. S. RAMAEKERS, J. A. VAN OIJEN et L. P. H. DE GOEY : Stratified turbulent Bunsen flames: flame surface analysis and flame surface density modelling. *Combustion Theory and Modelling*, 16(6):943–975, 2012.
- [116] J. A. van VAN OIJEN et L. P. H. DE GOEY : Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds. *Combustion Science and Technology*, 161(1):113–137, 2000.
- [117] J. A. VAN OIJEN, A. DONINI, R. J. M. BASTIAANS, J. H. M. ten THIJE BOONKAMP et L. P. H. DE GOEY : State-of-the-art in premixed combustion modeling using flamelet generated manifolds. *Progress in Energy and Combustion Science*, 57:30–74, 2016.
- [118] P. C. VENA, B. DESCHAMPS, G. J. SMALLWOOD et M. R. JOHNSON : Equivalence ratio gradient effects on flame front topology in a stratified iso-octane/air turbulent V-flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1):1551–1558, 2011.
- [119] P. C. VENA, B. DESCHAMPS, H. GUO, G. J. SMALLWOOD et M. R. JOHNSON : Heat release rate variations in a globally stoichiometric, stratified iso-octane/air turbulent V-flame. *Combustion and Flame*, 162(4):944–959, 2015.
- [120] P. C. VENA, B. DESCHAMPS, H. GUO et M. R. JOHNSON : Effects of stratification on locally lean, near-stoichiometric, and rich iso-octane/air turbulent V-flames. *Combustion and Flame*, 162(11):4231–4240, 2015.
- [121] E. S. RICHARDSON, V. E. GRANET, A. EYSSARTIER et J. H. CHEN : Effects of equivalence ratio variation on lean, stratified methane–air laminar counterflow flames. *Combustion Theory and Modelling*, 14(6):775–792, 2010.
- [122] S. P. MALKESON et N. CHAKRABORTY : A Priori Direct Numerical Simulation Assessment of Algebraic Models of Variances and Dissipation Rates in the Context of Reynolds-Averaged Navier-Stokes Simulations for Low Damköhler Number Partially Premixed Combustion. *Combustion Science and Technology*, 182(8):960–999, 2010.
- [123] S. P. MALKESON et N. CHAKRABORTY : Statistical analysis of displacement speed in turbulent stratified flames: A Direct Numerical Simulation study. *Combustion Science and Technology*, 182(11-12):1841–1883, 2010.
- [124] S. P. MALKESON et N. CHAKRABORTY : The modeling of fuel mass fraction variance transport in turbulent stratified flames: a direct numerical simulation study. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, 58(3):187–206, 2010.
- [125] S. P. MALKESON et N. CHAKRABORTY : Statistical analysis of scalar dissipation rate transport in turbulent partially premixed flames: a direct numerical simulation study. *Flow, Turbulence and Combustion*, 86(1):1–44, 2011.
- [126] S. P. MALKESON et N. CHAKRABORTY : Alignment statistics of active and passive scalar gradients in turbulent stratified flames. *Physical Review E*, 83(4):046308, 2011.
- [127] S. P. MALKESON et N. CHAKRABORTY : A Priori DNS Modeling of the Turbulent Scalar Fluxes for Low Damköhler Number Stratified Flames. *Combustion Science and Technology*, 184(10-11):1680–1707, 2012.
- [128] S. P. MALKESON et N. CHAKRABORTY : A-priori direct numerical simulation modelling of co-variance transport in turbulent stratified flames. *Flow, turbulence and combustion*, 90(2):243–267, 2013.
- [129] S. P. MALKESON et N. CHAKRABORTY : Statistical Analysis and a-priori Modelling of Flame Surface Density Transport in Turbulent Stratified Flames: A Direct Numerical Simulation Study. *Flow, turbulence and combustion*, 90(1):143–187, 2013.
- [130] S. P. MALKESON, S. RUAN, N. CHAKRABORTY et N. SWAMINATHAN : Statistics of reaction progress variable and mixture fraction gradients from DNS of turbulent partially premixed flames. *Combustion Science and Technology*, 185(9):1329–1359, 2013.
- [131] X. SHI, J. Y. CHEN et Z. CHEN : Numerical study of laminar flame speed of fuel-stratified hydrogen/air flames. *Combustion and Flame*, 163:394–405, 2016.

- [132] D. C. HAWORTH et T. J. POINSOT : Numerical simulations of Lewis number effects in turbulent premixed flames. *Journal of fluid mechanics*, 244:405–436, 1992.
- [133] R. S. CANT, C. J. RUTLAND et A. TROUVÉ : Statistics for laminar flamelet modeling. In *Proc. of the Summer Program*, pages 271–279, 1990.
- [134] D. VEYNANTE, A. TROUVÉ, K. N. C. BRAY et T. MANTEL : Gradient and counter-gradient scalar transport in turbulent premixed flames. *Journal of Fluid Mechanics*, 332:263–293, 1997.
- [135] R. S. ROGALLO : Numerical experiments in homogeneous turbulence. Rapport technique, NASA Lewis Research Center, 1981.
- [136] T. PASSOT et A. POUQUET : Numerical simulation of compressible homogeneous flows in the turbulent regime. *Journal of Fluid Mechanics*, 181:441–466, 1987.
- [137] J. REVEILLON : Numerical Procedures to Generate and to Visualize Flow Fields from Analytical or Experimental Statistics: Turbulent Velocity, Fluctuating Scalars, and Variable Density Sprays. *Journal of Flow Visualization and Image Processing*, 12(3), 2005.
- [138] B. DESHAIES et G. JOULIN : On the initiation of a spherical flame kernel. *Combustion Science and Technology*, 37(3-4):99–116, 1984.
- [139] C. HASSE, M. BOLLIG, N. PETERS et H. A. DWYER : Quenching of laminar iso-octane flames at cold walls. *Combustion and flame*, 122(1-2):117–129, 2000.
- [140] F. HALTER, F. FOUCHER, L. LANDRY et C. MOUNAÏM-ROUSSELLE : Effect of dilution by nitrogen and/or carbon dioxide on methane and iso-octane air flames. *Combustion Science and Technology*, 181(6):813–827, 2009.
- [141] S. P. MARSHALL, S. TAYLOR, C. R. STONE, T. J. DAVIES et R. F. CRACKNELL : Laminar burning velocity measurements of liquid fuels at elevated pressures and temperatures with combustion residuals. *Combustion and Flame*, 158(10):1920–1932, 2011.
- [142] D. G. GOODWIN, H. K. MOFFAT et R. L. SPETH : Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes, 2016. Version 2.2.1.
- [143] C. GRUSELLE : *Etude du développement d'une flamme soumise à un gradient de concentration : Rôle de la stratification et des EGR*. Thèse de doctorat, 2014. Thèse de doctorat dirigée par Angelo, Y. d' et Moureau, V. Energétique Rouen, INSA 2014.
- [144] C. GRUSELLE, V. MOUREAU et Y. D'ANGELO : Numerical simulation of turbulent stratified flame propagation in a closed vessel. In *ICHMT DIGITAL LIBRARY ONLINE*. Begel House Inc., 2012.
- [145] E. ALBIN et Y. D'ANGELO : Assessment of the Evolution Equation Modelling approach for three-dimensional expanding wrinkled premixed flames. *Combustion and Flame*, 159(5):1932–1948, 2012.
- [146] B. BOUST, Q. MICHALSKI et M. BELLENOUE : Experimental Investigation of Ignition and Combustion Processes in a Constant-Volume Combustion Chamber for Air-Breathing Propulsion. In *52nd AIAA/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*, page 4699, 2016.
- [147] S CHEVILLARD : *Simulation Numérique Directe pour la modélisation de la combustion dans les moteurs à combustion interne*, 2013. Thèse de doctorat dirigée par Reveillon, J. Energétique Rouen, Université de Rouen 2013.
- [148] Y ZELDOVICH : *Kinetics of chemical reactions in flames*. 1946.
- [149] D. B. SPALDING : *Some fundamentals of combustion*, volume 2. Academic Press, 1955.
- [150] J. A. SETHIAN : Numerical methods for propagating fronts. In *Variational methods for free surface interfaces*, pages 155–164. Springer, 1987.
- [151] S. OSHER et J. A. SETHIAN : Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of computational physics*, 79(1):12–49, 1988.
- [152] scikit-fmm. scikit-fmm, an extension python module which implements the fast marching method. <https://pythonhosted.org/scikit-fmm/>.
- [153] A. ER-RAIY, Z. BOUALLI, J. RÉVEILLON et A. MURA : Optimized single-step (OSS) chemistry models for the simulation of turbulent premixed flame propagation. *Combustion and Flame*, 192:130–148, 2018.
- [154] S. B. POPE : PDF methods for turbulent reactive flows. *Progress in energy and combustion science*, 11(2):119–192, 1985.
- [155] C. DOPAZO : Recent developments in pdf methods. *Turbulent reacting flows*, pages 375–474, 1994.

- [156] S. B. POPE : Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modelling*, 1:41–63, 1997.
- [157] B. J. D. LIU et S. B. POPE : The performance of in situ adaptive tabulation in computations of turbulent flames. *Combustion Theory and Modelling*, 9(4):549–568, 2005.
- [158] R. BORGHI : Sur la structure des flammes turbulentes. *Journal de chimie physique*, 81:361–370, 1984.
- [159] N. PETERS : Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 21, pages 1231–1250. Elsevier, 1988.
- [160] H. BARTHS, N. PETERS, A. BREHM, N. and Mack, M. PFITZNER et V. SMILJANOVSKI : Simulation of pollutant formation in a gas-turbine combustor using unsteady flamelets. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 27, pages 1841–1847. Elsevier, 1998.
- [161] H. PITSCH, M. CHEN et N. PETERS : Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames. In *Symposium (international) on combustion*, volume 27, pages 1057–1064. Elsevier, 1998.
- [162] M. OBOUNOU, M. GONZALEZ et R. BORGHI : A Lagrangian model for predicting turbulent diffusion flames with chemical kinetic effects. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 25, pages 1107–1113. Elsevier, 1994.
- [163] L. FALLOT, M. GONZALEZ, R. ELAMRAOUI et M. OBOUNOU : Modelling finite-rate chemistry effects in nonpremixed turbulent combustion: test on the bluff-body stabilized flame. *Combustion and Flame*, 110(3):298–318, 1997.
- [164] A. MURA et F. X. DEMOULIN : Lagrangian intermittent modelling of turbulent lifted flames. *Combustion Theory and Modelling*, 11(2):227–257, 2007.
- [165] R. MOUANGUE, M. OBOUNOU, L. GOMET et A. MURA : Lagrangian intermittent modelling of a turbulent lifted methane-air jet flame stabilized in a vitiated air coflow. *Flow, turbulence and combustion*, 92(3):731–765, 2014.
- [166] U. MAAS et S. B. POPE : Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 24, pages 103–112. Elsevier, 1992.
- [167] U. MAAS et S. B. POPE : Simplifying chemical kinetics: intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combustion and flame*, 88(3-4):239–264, 1992.
- [168] D. A. GOUSSIS et S. H. LAM : A study of homogeneous methanol oxidation kinetics using CSP. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 24, pages 113–120. Elsevier, 1992.
- [169] S. H. LAM et D. A. GOUSSIS : The CSP method for simplifying kinetics. *International Journal of Chemical Kinetics*, 26(4):461–486, 1994.
- [170] M. K. NEOPHYTOU, D. A. GOUSSIS, M. VAN LOON et E. MASTORAKOS : Reduced chemical mechanisms for atmospheric pollution using computational singular perturbation analysis. *Atmospheric Environment*, 38(22):3661–3673, 2004.
- [171] V. BYKOV et U. MAAS : The extension of the ILDM concept to reaction–diffusion manifolds. *Combustion Theory and Modelling*, 11(6):839–862, 2007.
- [172] O. GICQUEL, N. DARABIHA et D. THÉVENIN : Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(2):1901–1908, 2000.
- [173] N. PETERS et R. J. KEE : The computation of stretched laminar methane-air diffusion flames using a reduced four-step mechanism. *Combustion and Flame*, 68(1):17–29, 1987.
- [174] W. P. JONES et R. P. LINDSTEDT : Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combustion and flame*, 73(3):233–249, 1988.
- [175] R. W. BILGER, S. H. STÄRNER et R. J. KEE : On reduced mechanisms for methane-air combustion in nonpremixed flames. *Combustion and Flame*, 80(2):135–149, 1990.
- [176] P. BOIVIN, C. JIMÉNEZ, A. L. SÁNCHEZ et F. A. WILLIAMS : An explicit reduced mechanism for H₂–air combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1):517–523, 2011.
- [177] P. BOIVIN, A. L. SÁNCHEZ et F. A. WILLIAMS : Four-step and three-step systematically reduced chemistry for wide-range H₂–air combustion problems. *Combustion and Flame*, 160(1):76–82, 2013.
- [178] P. BOIVIN, A. DAUPTAIN, C. JIMÉNEZ et B. CUENOT : Simulation of a supersonic hydrogen–air autoignition-stabilized flame using reduced chemistry. *Combustion and Flame*, 159(4):1779–1790, 2012.

- [179] P. BOIVIN, C. JIMÉNEZ, A. L. SÁNCHEZ et F. A. WILLIAMS : A four-step reduced mechanism for syngas combustion. *Combustion and Flame*, 158(6):1059–1063, 2011.
- [180] P. BOIVIN, A. L. SÁNCHEZ et F. A. WILLIAMS : Analytical prediction of syngas induction times. *Combustion and Flame*, 176:489–499, 2017.
- [181] J. W. DOLD : Premixed flames modelled with thermally sensitive intermediate branching kinetics. *Combustion Theory and Modelling*, 11(6):909–948, 2007.
- [182] L. VERVISCH, B. LABEGORRE et J. RÉVEILLON : Hydrogen-sulphur oxy-flame analysis and single-step flame tabulated chemistry. *Fuel*, 83(4-5):605–614, 2004.
- [183] E. FERNANDEZ-TARRAZO, A. L. SÁNCHEZ, A. LINAN et F. A. WILLIAMS : A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion. *Combustion and Flame*, 147(1-2):32–38, 2006.
- [184] J. REVEILLON : Direct numerical simulation of sprays: turbulent dispersion, evaporation and combustion. In *Multiphase reacting flows : modelling and simulation*, pages 229–269. Springer, 2007.
- [185] B. FRANZELLI, E. RIBER, M. SANJOSÉ et T. POINSOT : A two-step chemical scheme for kerosene–air premixed flames. *Combustion and Flame*, 157(7):1364–1373, 2010.
- [186] M. CAILLER, N. DARABIHA, D. VEYNANTE et B. FIORINA : Building-up virtual optimized mechanism for flame modeling. *Proceedings of the Combustion Institute*, 36(1):1251–1258, 2017.
- [187] P. A. LIBBY et K. N. C. BRAY : Countergradient diffusion in premixed turbulent flames. *AIAA journal*, 19(2):205–213, 1981.
- [188] K. N. C. BRAY, P. A. LIBBY, G. MASUYA et J. B. MOSS : Turbulence production in premixed turbulent flames. *Combustion Science and Technology*, 25:127–140, 1981.
- [189] V. ROBIN, A. MURA, M. CHAMPION et T. HASEGAWA : Modeling the effects of thermal expansion on scalar turbulent fluxes in turbulent premixed flames. *Combustion Science and Technology*, 182(4-6):449–464, 2010.
- [190] A. N. LIPATNIKOV et J. CHOMIAK : Effects of premixed flames on turbulence and turbulent scalar transport. *Progress in Energy and Combustion Science*, 36(1):1–102, 2010.
- [191] C. K. WESTBROOK et F. L. DRYER : Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combustion science and technology*, 27(1-2):31–43, 1981.
- [192] C. K. WESTBROOK et F. L. DRYER : Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 10(1):1–57, 1984.
- [193] G. JOULIN et P. VIDAL : An introduction to the instability of flames, shocks, and detonations. *Collection Alea Saclay Monographs And Texts In Statistical Physics*, 1(3):493–673, 1998.
- [194] M. MATALON : Intrinsic flame instabilities in premixed and nonpremixed combustion. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 39:163–191, 2007.
- [195] G. P. SMITH, D. M. GOLDEN, M. FRENKLACH, B. EITEENER, M. GOLDENBERG, C. T. BOWMAN, R. K. HANSON, W. C. GARDINER, V. V. LISSIAANSKI et Z. W. QIN : GRI-Mech 3.0, 2000.
- [196] S. JERZEMBECK, N. PETERS, P. PEPIOT-DESJARDINS et H. PITSCHE : Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline: Experimental and numerical investigation. *Combustion and Flame*, 156(2):292–301, 2009.
- [197] M. MEHL, W. J. PITZ, M. SJÖBERG et J. E. DEC : Detailed kinetic modeling of low-temperature heat release for PRF fuels in an HCCI engine. Rapport technique, SAE Technical Paper, 2009.
- [198] M. MEHL, W. J. PITZ, C. K. WESTBROOK et H. J. CURRAN : Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1):193–200, 2011.
- [199] E. MALLARD et H. LE CHATELIER : *Recherches expérimentales et théoriques sur la combustion des mélanges gazeux explosives*. H. Dunod et E. Pinat, 1883.
- [200] J. H. FERZIGER et T. ECHEKKI : A simplified reaction rate model and its application to the analysis of premixed flames. *Combustion science and technology*, 89(5-6):293–315, 1993.
- [201] J. JAROSINSKI : The thickness of laminar flames. *Combustion and Flame*, 56(3):337–342, 1984.
- [202] G. E. ANDREWS, D. BRADLEY et S. B. LWAKABAMBA : Turbulence and turbulent flame propagation—a critical appraisal. *Combustion and Flame*, 24:285–304, 1975.

- [203] J. ABRAHAM, F. A. WILLIAMS et F. V. BRACCO : Discussion of turbulent flame structure in premixed charges. 1985 SAE Congress, Paper No. 850345. Rapport technique, Princeton Univ., NJ (USA). Dept. of Mechanical and Aerospace Engineering, 1985.
- [204] J. F. DRISCOLL : Turbulent premixed combustion: Flamelet structure and its effect on turbulent burning velocities. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34(1):91–134, 2008.
- [205] A. G. GAYDON et H. G. WOLFARD : *Flames, their structure, radiation, and temperature*. Halsted Press, 1979.
- [206] R. J. BLINT : The relationship of the laminar flame width to flame speed. *Combustion Science and Technology*, 49(1-2):79–92, 1986.
- [207] J. O. HIRSCHFELDER, C. F. CURTISS et R. B. BIRD : *Molecular Theory of Gases and Liquids*, volume 1. Structure of matter series. Wiley, 1954.
- [208] T. P. COFFEE et J. M. HEIMERL : Transport algorithms for premixed, laminar steady-state flames. *Combustion and Flame*, 43:273–289, 1981.
- [209] J. M. HEIMERL et T. P. COFFEE : Transport algorithms for methane flames. *Combustion science and technology*, 34(1-6):31–43, 1983.
- [210] J. NOCEDAL et S. J. WRIGHT : *Sequential quadratic programming*. Springer, 2006.
- [211] A. LIÑAN : The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies. *Acta Astronautica*, 1(7-8):1007–1039, 1974.
- [212] J. NATARAJAN, T. LIEUWEN et J. SEITZMAN : Laminar flame speeds of H₂/CO mixtures: effect of CO₂ dilution, preheat temperature, and pressure. *Combustion and flame*, 151(1-2):104–119, 2007.
- [213] L. BOYER : Laser tomographic method for flame front movement studies. *Combustion and Flame*, 39(3):321–323, 1980.
- [214] K.N.C BRAY : Turbulent flows with premixed reactants. In *Turbulent reacting flows*, pages 115–183. Springer, 1980.
- [215] R. S. CANT et E. MASTORAKOS : *An introduction to turbulent reacting flows*. Imperial College Press, 2008.
- [216] A. N. LIPATNIKOV : Conditionally averaged balance equations for modeling premixed turbulent combustion in flamelet regime. *Combustion and Flame*, 152(4):529–547, 2008.
- [217] V. A. SABELNIKOV et A. N. LIPATNIKOV : Transition from pulled to pushed premixed turbulent flames due to countergradient transport. *Combustion Theory and Modelling*, 17(6):1154–1175, 2013.
- [218] K. Q. N. KHA, V. ROBIN, A. MURA et M. CHAMPION : Implications of laminar flame finite thickness on the structure of turbulent premixed flames. *Journal of Fluid Mechanics*, 787:116–147, 2016.
- [219] A. ER-RAIY, Z. BOUALI et A. MURA : Effects of composition fluctuations on the structure and development of laminar and turbulent flame kernels. In *26th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS)*, 2017.
- [220] S. ZHAO, A. ER-RAIY, Z. BOUALI et A. MURA : Dynamics and kinematics of the reactive scalar gradient in weakly turbulent premixed flames. *Combustion and Flame*, 198:436 – 454, 2018. ISSN 0010-2180.
- [221] L. Y. M. GICQUEL, N. GOURDAIN, J-F. BOUSSUGE, H. DENIAU, G. STAFFELBACH, P. WOLF et T. POINSOT : High performance parallel computing of flows in complex geometries. *Comptes Rendus Mecanique*, 339(2-3):104–124, 2011.
- [222] C. BURSTEDDE, L. C WILCOX et O. GHATTAS : p4est: Scalable algorithms for parallel adaptive mesh refinement on forests of octrees. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 33(3):1103–1133, 2011.
- [223] F. DRUI, A. FIKL, P. KESTENER, S. KOKH, A. LARAT, V. LE CHENADEC et M. MASSOT : Experimenting with the p4est library for AMR simulations of two-phase flows. *ESAIM : Proceedings and Surveys*, 53:232–247, 2016.

RÉSUMÉ

La propagation de flammes turbulentes dans des milieux réactifs inhomogènes concerne un grand nombre d'applications pratiques, y compris celles qui reposent sur des cycles de combustion à volume constant. Les hétérogénéités de composition (richesse, température, dilution par des gaz brûlés, etc.) sont issues de plusieurs facteurs distincts tels que la dispersion du spray de gouttelettes de combustible et son évaporation, la topologie de l'écoulement ainsi que la présence éventuelle de gaz brûlés résiduels issus du cycle précédent. La structure des flammes partiellement prémélangées qui en résultent est significativement plus complexe que celles des flammes plus classiques de diffusion ou de prémélange. L'objectif de ce travail de thèse est donc de contribuer à l'amélioration de leur connaissance, en s'appuyant sur la génération et l'analyse de base de données de simulations numériques directes ou DNS (*Direct Numerical Simulation*). Celles-ci sont conduites avec le code de calcul *Asphodele* qui est basé sur l'approximation de faible nombre de Mach. Le combustible de référence retenu est l'iso-octane. La base de données est structurée suivant cinq paramètres qui permettent de caractériser l'écoulement turbulent ainsi que l'hétérogénéité de composition du milieu réactif. Dans un premier temps, des configurations bidimensionnelles ont été considérées en raison du coût élevé induit par la description détaillée de la cinétique chimique. L'étude de ces différents cas de calcul a permis de mettre en lumière plusieurs mécanismes fondamentaux de propagation dans les milieux hétérogènes en composition. Une réduction significative des coûts de calcul a pu ensuite être obtenue grâce au développement d'un modèle chimique simplifié optimisé. Son utilisation a permis d'étendre les analyses à des cas tridimensionnels et de conforter ainsi certaines des conclusions obtenues préalablement.

Mots clés : Combustion/ Flamme/ Turbulence/ Gaz de combustion, Mach, Nombre de/ Cinétique chimique/ Simulation par ordinateur/ Optimisation mathématique/ Inflammabilité/ Hétérogénéités de composition/ Milieux stratifiés/ Turbulence homogène isotrope/ Combustion à volume constant/ Combustion partiellement prémélangée/ Chimie détaillée/ Chimie globale

ABSTRACT

The propagation of turbulent flames in non-homogeneous reactive mixtures of reactants concerns a large number of practical applications, including those based on constant volume combustion cycles. The composition heterogeneities (equivalence ratio, temperature, dilution by burnt gases, etc.) result from several distinct factors such as the dispersion of the spray of fuel droplets and its evaporation, the flowfield topology as well as the possible presence of residual burnt gases issued from the previous cycle. The resulting partially premixed flames structure is significantly more complex than the one of more conventional diffusion or premixed flames. The aim of this thesis work is therefore to contribute to the improvement of their understanding, by proceeding to the generation and analysis of a new set of direct numerical simulations (DNS) databases. The present computations are performed with the low-Mach number DNS solver *Asphodele*. The database is structured according to five parameters that characterize the turbulent flow as well as the composition heterogeneity of the reactive mixture. First, because of the high numerical costs induced by the detailed description of chemical kinetics, two-dimensional configurations were considered. The study of these various simulations highlights several fundamental mechanisms of flame propagation in heterogeneous mixtures. Then, a significant computational cost saving has been achieved through the development of an optimized simplified chemistry model. The use of the latter allowed to overcome the major bottleneck of high CPU costs related to chemical kinetics description and thus to extend the analysis to three-dimensional configurations. Some of the conclusions obtained previously were reinforced.

Keywords : Combustion/ Flame/ Turbulence/ Combustion gases/ Mach number/ Chemical kinetics/ Computer simulation/ Mathematical optimization/ Flammability/ Composition heterogeneities / Stratified mixtures/ Homogeneous isotropic turbulence/ Constant volume combustion/ Partially premixed combustion/ Detailed chemistry/ Global chemistry