

THÈSE

pour l'obtention du Grade de

DOCTEUR DE L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE
DE MECANIQUE ET D'AEROTECHNIQUE

(Diplôme National - Arrêté du 25 mai 2016)

Ecole Doctorale :
Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Energétique

Secteur de Recherche :
Energétique, Thermique, Combustion

Présentée par :

Xiaodong WANG

**Modélisation et simulation numérique de la
combustion en présence d'interactions
flammes/auto-inflammation**

Directeurs de thèse : **Vincent ROBIN** et **Arnaud MURA**

Soutenue le 9 Janvier 2020 devant la commission d'examen

- Jury -

M.	F.X. DEMOULIN	Professeur Université de Rouen, CORIA, Rouen	Rapporteur
M.	F. CONTINO	Professeur iMMC, UCLouvain, Belgique	Rapporteur
M.	F. HALTER	Professeur Université d'Orléans, ICARE, Orléans	Président
Mme.	P. DOMINGO	Directrice de Recherche CNRS, CORIA, Rouen	Membre du jury
M.	J. SOTTON	Professeur d'ENSMA, PPRIME, Poitiers	Membre du jury
M.	V. ROBIN	Maître de conférence Université de Poitiers, PPRIME	Membre du jury

Remerciements

Le travail effectué dans ce mémoire a été réalisé à l'institut PPRIME - ENSMA, dans le département Fluides, Thermique et Combustion. Cette thèse n'aurait pas pu se dérouler sans le soutien financier de la région Nouvelle-Aquitaine et de l'ENSMA.

Je tiens à remercier le directeur du PPRIME Yves Gervais de m'avoir accueilli au sein de ce laboratoire.

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à mes directeurs de thèse, Vincent Robin et Arnaud Mura pour leurs conseils, leur soutien, leur disponibilité, leur patience au long de ce travail. J'aimerais dire un grand merci à monsieur Zakaria Bouali pour l'intérêt et le soutien qu'il a porté à notre publication.

Je tiens à remercier monsieur François Xavier Demoulin et monsieur Francesco Contino d'être mes rapporteurs. Je remercie également madame Pascale Domingo, monsieur Fabien Halter, monsieur Julien Sotton de participer au jury.

Merci aussi à mes collègues de bureau : Anthony, Radouan, Aimad, Fabio, Kim, Song, Luis et Marcos pour la bonne ambiance durant ces quatre années, pour leur humour et leur amitié. Je tiens à remercier madame Cécile Losier et monsieur Hervé Doreau pour leur soutien informatique. Merci également à madame Jocelyne Bardeau, madame Marie Cannelle Eysseric, madame Audrey Veron, madame Celine Portron et monsieur Vincent Montassier pour m'avoir accueillie chaleureusement au sein du laboratoire et pour leur soutien pour tout ce qui est préparation de documents administratifs.

Pour terminer, j'adresse les remerciements les plus profonds à mes parents et mon mari qui m'ont supportée, encouragée et soutenue pendant ces quatre années.

Ce manuscrit est un cadeau pour ma merveilleuse fille Yilian.

Table des matières

Remerciements	iii
Table des matières	v
Nomenclature	ix
Table des figures	xvii
Liste des tableaux	xxvii
Introduction	1
I Introduction à la modélisation de la combustion turbulente	7
1 Aérothermochimie	9
1.1 Hypothèses fondamentales	9
1.2 Équations instantanées	9
1.3 Variables spécifiques à la combustion	12
1.4 Équations moyennes	15
1.4.1 Description statistique de la turbulence (RANS)	15
1.4.2 Description filtrée de la turbulence (LES)	18
1.4.3 Conclusions	20
2 Modélisation de la turbulence	21
2.1 Théories	21
2.2 Mélange scalaire	22

2.3	Modélisation RANS et LES	24
2.3.1	Modèle $k - \epsilon$	24
2.3.2	Modèles LES : méthode de Smagorinsky et WALE	26
2.3.3	Conclusions	27
3	Combustion et flammes	29
3.1	Flammes de prémélange	29
3.1.1	Cas laminaire	30
3.1.2	Cas de prémélange turbulent	32
3.2	Flammes non-prémélangées	35
3.2.1	L'approximation de Burke-Schumann	35
3.2.2	Cas laminaire	36
3.2.3	Cas turbulent	39
3.3	Réacteurs idéaux	40
3.3.1	Réacteur parfaitement agité fermé (batch reactor)	41
3.3.2	Réacteur ouvert (PSR et PFR)	44
3.3.3	Cas général	45
3.4	Les modèles existants	46
3.4.1	Principe des méthodes de tabulation	48
3.4.2	Modèles pour les flammes de prémélange	49
3.4.3	Modèles de combustion non-prémélangée	55
3.4.4	Modèles d'auto-inflammation	58
3.5	Conclusions	60

II Description des mécanismes physiques fondamentaux et leur modélisation en présence d'interactions flammes/auto-inflammation

61

4	Mélange non réactif d'espèces chimiques	63
4.1	Fraction de mélange	63
4.2	Variance de fraction de mélange	64
4.3	Données tabulées	65

4.3.1	État de gaz frais	66
4.3.2	État de gaz brûlés	67
4.4	Analyse préliminaire de la réponse du modèle de mélange	69
4.4.1	Description des montages expérimentaux	70
4.4.2	Description de la configuration de calcul	71
4.4.3	Résultats numériques	71
4.5	Conclusions	75
5	Propagation d'un front de flamme	77
5.1	Hypothèses principales	77
5.2	Modèle de flammelettes d'épaisseurs finies	79
5.3	Décomposition du taux de production chimique	82
5.4	Extension du modèle de propagation en présence d'auto-allumage	84
5.5	Conclusions	86
6	Auto-inflammation	89
6.1	Délais d'auto-allumage et terme source chimique	89
6.2	Temps de résidence et délai d'auto-allumage	90
6.3	Temps de résidence et terme source moyen	91
6.4	Temps de résidence normalisé	94
6.5	Tabulation des propriétés d'auto-allumage	96
6.6	Conclusions	98
7	Synthèse du modèle de combustion turbulente proposé	99
III	Validation et simulations numériques	103
8	Validation de l'équation pour le temps de résidence normalisé	105
8.1	Analogie temps de résidence/"level-set"	106
8.2	Application à la compression d'un mélange	109
8.3	Application à une couche de diffusion	111
8.4	Conclusions et perspectives	116

9	Application à une flamme de type JHC (RANS)	117
9.1	Présentation à la configuration étudiée	117
9.2	Comportement du modèle de propagation	118
9.3	Tabulation des propriétés d'auto-allumage	122
9.3.1	Création de la table réduite : auto-similarité	122
9.3.2	Création de la table complète : $\bar{\omega}_i(\tilde{\tau}^*, \tilde{\xi}, S_\xi)$	124
9.4	Comportement du modèle d'auto-inflammation	125
9.4.1	Utilisation de la table réduite	125
9.4.2	Utilisation de la table complète	129
9.5	Interaction des modèles de propagation et d'auto-inflammation	131
9.5.1	Utilisation de la table réduite pour l'auto-inflammation	131
9.5.2	Utilisation de la table complète pour l'auto-inflammation	138
9.6	Études de sensibilité	143
9.6.1	Nombre de Karlovitz (c_{min})	143
9.6.2	Nombre de Damköhler (Θ)	143
9.7	Résultats complémentaires	146
9.7.1	Résultats numériques pour la configuration de Cabra H_2/Air	146
9.7.2	Prise en compte des fluctuations du temps de résidence τ_r	153
9.8	Conclusions	154
10	Application à une chambre de combustion à volume constant (LES)	159
10.1	Description de la configuration CV2	160
10.2	Cas basse pression : propagation seul	164
10.3	Cas haute pression : auto-inflammation et propagation	166
10.4	Conclusions et perspectives	167
	Conclusions et Perspectives	173
	Bibliographie	177
	Annexe	195

Nomenclature

B, K	: coefficient pré-exponentiel
c	: taux d'avancement
c_{min}	: limite inférieure de la composition des flammelettes
c_m	: paramètre de modélisation
c_{max}	: limite supérieure de la composition des flammelettes
$c_{p,i}$: capacité calorifique massique de l'espèce i
C_{EBU}	: constante de modélisation
C_I	: constante de modélisation
$C_{\epsilon_1}, C_{\epsilon_1}, C_{\epsilon_1}$: constantes du modèle
C_ω	: constante de modélisation $C_\omega = 0,325$
C_μ	: constante de modélisation $C_\mu = 0,09$
C_ξ	: paramètre de modélisation
C_τ	: paramètre de modélisation
C_1^*	: constante de modélisation
d	: diamètre de buse d'injection
D	: diffusivité moléculaire des espèces chimiques
Da	: nombre de Damkhöler
e	: énergie totale
E_a	: énergie d'activation
F	: combustible
h	: enthalpie massique
H	: Hauteur de flamme
I_1, I_2, I_ω	: intégrale
IQ	: indice du maillage

J	: flux diffusif de masse
k	: énergie cinétique turbulente
Ka	: nombre de Karlovitz
l_x	: épaisseur de flammelettes
l_T	: échelle intégrale de turbulence
l_ξ	: échelle intégrale de la fraction de mélange
l_ϵ	: échelle de longueur
L_0	: longueur caractéristique de l'écoulement
Le	: nombre de Lewis
m	: masse du mélange
M	: masse molaire du mélange
M_i	: masse molaire des espèces i
O	: oxydant
p	: pression
P	: PDF au sens de Reynolds
q	: flux diffusif d'énergie
\dot{Q}	: terme source de chaleur aux effets extérieurs
$Q_{p,i}^0$: chaleur de formation de l'espèce i à la pression constante et à la température de référence T_0
\tilde{P}	: PDF au sens de Favre
r_{st}	: coefficient stœchiométrique massique
R	: constante des gaz parfait
R_c	: constante de modélisation
Re	: nombre de Reynolds
Re_T	: nombre de Reynolds turbulent $Re_T = k^{1/2}l_T/\nu$
s	: coefficient stœchiométrique massique
S_c	: ségrégation du scalaire c
S_F	: vitesse de propagation d'une flamme
S_I	: vitesse de propagation d'un front d'auto-allumage
S_Y	: ségrégation du scalaire Y
S_L	: vitesse de propagation d'une flamme prémélangée laminaire plane

t	: temps
t_{0D}	: temps dans un réacteur $0D$
t_{ad}	: temps adimensionné
t_{ind}	: temps d'induction
T	: température
T_i	: échelle du temps caractéristique du vieillissement des particules
T_0	: température dans les conditions standards ($T_0 = 298 K$)
u_k	: composantes de la vitesse
U_0	: vitesse caractéristique de l'écoulement
u_η	: vitesse caractéristique de l'échelle de Kolmogorov
V	: vitesse du courant injecté
V_ξ	: variance de la fraction de mélange
x, y, z, x_k	: coordonnées cartésiennes
Y	: fraction massique des espèces chimiques
Ze	: nombre de Zeldovitch
Z_F	: variable de Schvab-Zeldovitch

Lettres grecques

- α, β, γ : paramètres de forme de PDF
 α_0 : constante
 χ : taux d'étirement
 $\delta(x)$: distribution de Dirac ($\delta(x) = 1$ lorsque $x = 0$ sinon $\delta_x = 0$)
 δ_{ik} : symbole de Kronecker ($\delta_{ik} = 1$ lorsque $i = k$ sinon $\delta_{ik} = 0$)
 δ_L : épaisseur d'une flamme prémélangée laminaire plane non-étirée
 δ_R : épaisseur de la zone réactive dans la flamme prémélangée laminaire plane
 δ_T : épaisseur moyenne de la flamme turbulente
 Δ : taille caractéristique de la maille
 ϵ : taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente k
 ϵ_ξ : taux de dissipation des fluctuations de fraction de mélange ξ
 η : échelle de Kolmogorov
 λ : coefficient de conductivité thermique
 μ : coefficient de viscosité dynamique ($\mu = \rho\nu$)
 μ_t : coefficient de viscosité dynamique turbulent ($\mu_t = \bar{\rho}\nu_t$)
 ν : coefficient de viscosité cinématique turbulent
 ν_t : coefficient de viscosité cinématique
 ϕ : variable instantanée aléatoire
 ρ : masse volumique du mélange
 σ_k : constante de modélisation $\sigma_k = 1$
 σ_t : nombre de Schmidt turbulent ($\sigma_t = 0,7$)
 σ_ϵ : constante de modélisation $\sigma_\epsilon = 1,3$
 Σ_f : la densité de surface de flamme
 τ_c : échelle du temps chimique
 τ_i : délai d'auto-allumage
 τ_r : temps de résidence
 τ^* : temps de résidence normalisé $\tau^* = \tau_r/\tau_i$
 τ_{ik} : tenseur des contraintes visqueuses
 τ_T : temps caractéristique de l'échelle intégrale de la turbulence
 τ_Y : échelle intégrale du temps scalaire $\tau_Y = \widetilde{Y''^2}/\widetilde{\epsilon}_Y$

τ_ξ	: temps de mélange
θ	: quantité de temps de résidence ($d\theta = \tau_r dm$)
Θ	: paramètre de modélisation
ω	: taux de réaction chimique
ω_{ad}	: terme source chimique adimensionné
ω_p	: contribution de la propagation d'un front de flamme au taux de réaction chimique
ω_i	: contribution des processus d'auto-inflammation au taux de réaction chimique
ω_c	: taux de réaction chimique du taux d'avancement
Ω	: taux de réaction chimique massique
Ω_s	: terme source moyen par unité de surface
ξ	: fraction de mélange

Indices

- ad* : valeur adimensionnée
b : fait référence aux gaz brûlés
f : fait référence dans la flamme
F : fait référence au combustible
i : fait référence à l'auto-inflammation
max : valeur maximum
min : valeur minimum
O : fait référence à l'oxydant
p : fait référence à la propagation de flamme
u : fait référence aux gaz frais
L : fait référence à la flamme laminaire
MR : "Most Reactive"
P : fait référence au produit
st : conditions stœchiométriques
T : fait référence à une échelle intégrale de turbulence
 ϵ : fait référence à la dissipation

Exposants

- ' : fluctuations au sens de Reynolds
" : fluctuations au sens de Favre
a, b, c : constantes
D : la partie de déviation
fuel : courant de combustible
I : la partie isentropique
MIL : modèle de MIL
oxy : courant d'oxydant

Abréviations et acronymes

BML	: Bray Moss Libby (modèle)
CFD	: Computational Fluid Dynamics
CF	: Co-courant
CJ	: Jet Central
CMC	: Conditional Moment Closure (méthode)
CVC	: Combustion à Volume Constante
DDT	: Deflagration to Detonation Transition
DNS	: Direct Numerical Simulation
EBU	: Eddy Break Up (modèle)
FDS	: Densité de Surface (modèle)
FGM	: Flame-Generated Manifold (méthode)
FPI	: Flame Prolongation of ILDM (méthode)
GRI	: Gas Research Institute
IEM	: Integral Equation Model (modèle)
IPM	: Induction-Parameter-Model (modèle)
ILDM	: Intrinsic Low Dimensional Manifold (méthode)
JHC	: Jet-in-Hot-Coflow
LES	: Large Eddy Simulation
LMSE	: Linear Mean Square Estimation (modèle)
MIL	: Modèle Intermittent Lagrangien (modèle)
PDF	: Probability Density Function
RANS	: Reynolds-averaged Navier-Stokes
URANS	: Unsteady Reynolds-averaged Navier-Stokes
WT	: Soufflerie

Autres

- \dot{q} : débit de q
- \bar{q} : moyenne de Reynolds de la quantité q
- \tilde{q} : moyenne de Favre de la quantité q
- \hat{q} : quantité normalisée q
- $\|q\|$: norme du vecteur q

Table des figures

1.1	Schéma d'un échantillonnage temporel et PDF correspondante pour deux signaux différents.	16
2.1	Spectre de l'énergie des fluctuations de vitesse en cas de la turbulence homogène et isotrope.	23
3.1	Structure d'une flamme laminaire de prémélange.	31
3.2	Diagramme de classification des flammes turbulentes de prémélange (diagramme de Borghi).	34
3.3	Variation de la fraction massique du combustible Y_F (rouge pointillé), de l'oxydant Y_O (bleu pointillé), et de la température (noir continu) suivant l'approximation de Burke-Schumann.	36
3.4	Variation de la fraction massique du combustible Y_F (rouge), de l'oxydant Y_O (bleu), et de la température (noir) en considérant l'équilibre chimique.	37
3.5	Schéma d'une flamme de diffusion.	37
3.6	Schéma d'un contre-courant.	38
3.7	Variation de la fraction de mélange ξ (gauche) et de la température T (droite) résolue par <i>Cantera</i> pour un mélange de CH_4/O_2 , pour $\chi = 6,7$ et $L = 2cm$	39
3.8	Variation de la température T en fonction de la fraction de mélange ξ résolue par <i>Cantera</i> pour un mélange de CH_4/O_2 , pour $\chi = 6,7$ et $L = 2cm$	39
3.9	Exemple d'un profil τ_i en fonction de la température des gaz frais T_u pour un mélange de CH_4/Air stœchiométrique.	42

3.10	Exemple d'un profil τ_i en fonction de la température des gaz frais T_u pour un mélange de CH_4/Air stoechiométrique en échelle logarithmique.	42
3.11	Variation temporelle de la température d'un mélange stoechiométrique de CH_4/Air pour différentes valeurs de température des gaz frais T_u ($T_u = 1300K$, $T_u = 1200K$, $T_u = 1100K$	43
3.12	Schéma d'une évolution temporelle du taux d'avancement	43
3.13	Exemple d'un profil $1/\tau_i$ en fonction de la fraction de mélange ξ pour la configuration de Cabra CH_4/Air (sera présentée au chapitre 4).	44
3.14	Variation temporelle de la température d'une configuration de Cabra (CH_4/Air) pour différentes valeurs de fraction de mélange : $\xi = \xi_{MR}$ (gauche), $\xi = 0,05$ (milieu), $\xi = \xi_{st}$ (droite).	44
3.15	Schémas représentatifs des réacteurs PSR (gauche) et PFR (droite)	45
3.16	Schéma représentatif d'une PDF pour le modèle BML	50
3.17	Schéma représentatif d'une PDF pour le modèle BCL	52
3.18	Schéma représentatif des trajectoires des particules fluides dans l'espace des compositions. Droite IEM (bleue pointillée), droite d'équilibre (rouge pointillée), trajectoire MIL (noire continue).	56
3.19	Allures de la PDF β pour différentes valeurs des constantes m et n calculées à partir de $\tilde{\xi}$ et \tilde{V}_ξ	58
4.1	Exemple des profils de la température des gaz frais T_u en fonction de la fraction de mélange pour différentes valeurs de la ségrégation S ($S = 0$, $S = 0,1$, $S = 0,5$, $S = 0,9$) issus de la configuration de Dally [46].	67
4.2	Exemple des profils de la température des gaz brûlés T_b en fonction de la fraction de mélange pour différentes valeurs de la ségrégation S ($S = 0$, $S = 0,1$, $S = 0,5$, $S = 0,9$) issus de la configuration de Dally [46].	68
4.3	Flamme détachée stabilisée d'un brûleur de type JHC.	69
4.4	Schéma représentatif du domaine de calcul.	71

4.5	Gauche : profils de température axiale avec différentes valeurs de taux d'étirement χ en fonction de fraction de mélange normalisée $\hat{\xi}$ pour les conditions de Dally [46] (gauche) et de Cabra [30, 31] (droite). La fraction de mélange normalisée est définie comme : $\hat{\xi} = \xi^{\frac{\log 0.5}{\log \xi_{st}}}$, voir la référence [162].	72
4.6	Profils de température moyenne axiale issus des données expérimentales et des résultats numériques en fonction des coordonnées axiales (gauche) et de la fraction de mélange moyenne $\tilde{\xi}$ (droite) pour les configurations de Dally [46] (haut) et de Cabra [30, 31] (bas).	73
5.1	Variation spatiale et temporelle du taux d'avancement c avec ou sans l'utilisation de modèle.	78
5.2	Description des limites des flammelettes dans l'espace physique et l'espace des compositions [82]	81
5.3	Structure simplifiée d'une flamme turbulente prémélangée et la PDF $P(c)$ coresspondante.	81
6.1	Exemple de la variation temporelle de terme source pour la configuration de Cabra CH_4/Air où la fraction de mélange $\xi = \xi_{MR}$.	90
6.2	Trajectoires typiques observées dans un brûleur de type JHC (Jet-in-Hot-Coflow)	93
6.3	Délai d'auto-allumage τ_i (gauche) et son zoom (droite) en fonction de la fraction de mélange ξ .	95
6.4	Gauche : champ de temps de résidence normalisé moyen $\tilde{\tau}^*$ calculé par l'équation (6.6); Milieu : champ de temps de résidence normalisé moyen déduit de l'équation (6.4); Droite : champ de temps de résidence normalisé moyen issu de l'équation (6.4) avec une augmentation de $10d$ pour la longueur de chaque entrée (d est le diamètre du jet central).	97
7.1	Description globale du modèle. Haut : les processus physiques, les échelles du temps caractéristique et les variables associées. Milieu : les quantités tabulées et les paramètres déterminés notant en gras. Bas : les quatre équations de transport des scalaires aux lesquelles le modèle de combustion turbulente est basé.	101

8.1	Schéma représentatif d'un réacteur subissant une compression.	109
8.2	Exemple des évolutions de pression (gauche) et de température (droite) dans un réacteur subissant une compression. Profils rouges et verts sont respectivement obtenus avec ou sans considération des réactions chimiques.	110
8.3	Délai d'auto-allumage en fonction de la température maximale des gaz frais $\tau_i(T_u)$	110
8.4	Haut : Profil de température temporelle issue d'un calcul utilisant un schéma chimique détaillé. Bas : "Level-set" fonction H^* en fonction du temps.	112
8.5	Délai d'auto-allumage en fonction de fraction de mélange $\tau_i(\xi)$	112
8.6	Haut : profil temporel de température obtenu avec une loi d'Arrhénius, Bas : "Level-set" fonction H^* en fonction du temps. Lignes rouges : le cas où diffusion négligeable, lignes bleues : le cas où diffusion infiniment rapide, lignes noires : le cas où l'auto-inflammation s'apparaît pendant les processus de mélange.	113
8.7	Délai d'auto-allumage en fonction de fraction de mélange $\tau_i(\xi)$ en utilisant un schéma cinétique détaillé.	114
8.8	Haut : profil temporel de température obtenu avec un schéma cinétique détaillé, Bas : "Level-set" fonction H^* en fonction du temps. Lignes violettes : le cas où diffusion négligeable, lignes vertes : le cas où diffusion infiniment rapide, lignes d'autres couleurs : les cas où l'auto-inflammation apparaît pendant les processus de mélange.	115
9.1	Image expérimentale d'une flamme décollée pour le cas CH_4/Air [31].	117
9.2	Champs de la température moyenne pour la configuration de Cabra [30, 31] obtenus respectivement <u>sans</u> (gauche) et <u>avec</u> (milieu : $\Theta = 1$ et droite : $\Theta = 100$) la considération de l'équation de transport du taux d'avancement moyen.	119
9.3	Zoom de champs de la température moyenne obtenus respectivement <u>sans</u> (gauche) et <u>avec</u> (milieu : $\Theta = 1$ et droite : $\Theta = 100$) la considération de l'équation de transport du taux d'avancement moyen.	119

9.4	Champs du taux d'avancement moyen avec la considération de l'équation de transport du taux d'avancement moyen pour différentes valeurs de Θ (gauche : $\Theta = 1$ et droite : $\Theta = 100$).	120
9.5	Zoom de champs du taux d'avancement moyen avec la considération de l'équation de transport du taux d'avancement moyen pour différentes valeurs de Θ (gauche : $\Theta = 1$ et droite : $\Theta = 100$).	120
9.6	Profils axiaux des températures moyennes issues des données expérimentales et des résultats numériques calculés pour la configuration de Cabra.	121
9.7	Gauche : terme source adimensionnel de la contribution des processus d'auto-inflammation en fonction du temps adimensionnel issus des calculs des réacteurs homogènes en utilisant une loi d'Arrhénius globale et un schéma détaillé pour différentes valeurs de fraction de mélange ($\delta_{t,j}$ est l'échelle du temps caractéristique); Droite : profils du taux d'avancement issus des calculs des réacteurs homogènes en utilisant un schéma détaillé et du modèle présent avec l'utilisation d'une loi d'Arrhénius globale et $\bar{\omega}(c) = \bar{\omega}_i(\tilde{\tau}^*)$ issu des données tabulées.	124
9.8	Profil $1/\tau_i$ en fonction de la fraction de mélange ξ en utilisant la table réduite.	126
9.9	Champs de taux d'avancement moyen obtenus sans consideration de la propagation du front de flamme lorsque $t_{ad} \in [-20, 20]$ (gauche) et $t_{ad} \in [-100, 100]$ (droite).	126
9.10	Champs de temps de résidence normalisé moyen (gauche) et de taux d'avancement moyen (milieu) et de température moyenne (droite) obtenus sans consideration de la propagation du front de flamme en utilisant la table d'auto-similarité sans tenu en compte la variance de la fraction de mélange.	127
9.11	Champs de temps de résidence normalisé moyen (gauche) et de taux d'avancement moyen (milieu) et de température moyenne (droite) obtenus sans consideration de la propagation du front de flamme en utilisant la table d'auto-similarité avec la prise en compte de la variance de la fraction de mélange.	128
9.12	Champ de taux d'avancement temporel $\tilde{c}(\mathbf{x}, t)$ obtenu en demi domaine physique sans consideration de la propagation du front de flamme ($\bar{\omega}_p = 0$).	128

9.13	Profil $1/\tau_i$ (gauche) et son zoom (droite) en fonction de la fraction de mélange ξ en utilisant la table complète.	129
9.14	Gauche : champ de taux d'avancement temporel $\tilde{c}(\mathbf{x}, t)$ obtenu en demi domaine physique sans consideration de la propagation du front de flamme ($\bar{\omega}_p = 0$). Droite : champ du taux d'avancement moyen stationnaire résolu $\tilde{c}(\mathbf{x})$	130
9.15	Champs de temps de résidence normalisé moyen (gauche) et de taux d'avancement moyen (milieu) et de température moyenne (droite) obtenus sans consideration de la propagation du front de flamme en utilisant la table complète.	130
9.16	Gauche et Milieu : Champs de taux d'avancement moyen obtenus avec consideration de la propagation du front de flamme ($\Theta = 2$) lorsque $t_{ad} \in [-20, 20]$ (gauche) et $t_{ad} \in [-100, 100]$ (milieu). Droite : Champs de taux d'avancement moyen obtenus sans consideration de la propagation du front de flamme lorsque $t_{ad} \in [-100, 100]$	132
9.17	Cas $t_{ad} \in [-20, 20]$ et $\Theta = 2$. Gauche : champ du taux de réaction moyen $\bar{\omega}$. Milieu : champ de la contribution $\bar{\omega}_i$ au taux de réaction moyen. Droite : champ de la contribution $\bar{\omega}_p$ au taux de réaction moyen.	132
9.18	Cas $t_{ad} \in [-100, 100]$ et $\Theta = 2$. Gauche : champ du taux de réaction moyen $\bar{\omega}$. Milieu : champ de la contribution $\bar{\omega}_i$ au taux de réaction moyen. Droite : champ de la contribution $\bar{\omega}_p$ au taux de réaction moyen.	133
9.19	Champs de taux d'avancement moyen obtenus avec (gauche) ou sans (droite) consideration de la propagation du front de flamme ($\Theta = 2$).	134
9.20	Champ de taux d'avancement temporel $\tilde{c}(\mathbf{x}, t)$ obtenu en demi domaine physique avec consideration de la propagation du front de flamme ($\Theta = 1$).	134
9.21	Champ de taux d'avancement temporel $\tilde{c}(\mathbf{x}, t)$ obtenu en demi domaine physique avec consideration de la propagation du front de flamme ($\Theta = 100$).	135
9.22	Gauche : Champ de température moyenne obtenu sans consideration de la propagation du front de flamme. Milieu et Droite : Champs de température moyenne obtenus avec consideration de la propagation du front de flamme $\Theta = 1$ en initialisant avec des gaz frais (milieu) ou des gaz brûlés (droite).	135

9.23	Gauche : Champ de température moyenne obtenu sans consideration des processus d'auto-inflammation. Milieu et Droite : Champs de température moyenne obtenus avec consideration de la propagation du front de flamme $\Theta = 100$ en initialisant avec des gaz frais (milieu) et des gaz brûlés (droite).	136
9.24	Analyse de sensibilité de la hauteur de flamme adimensionnelle à la valeur du paramètre de modélisation Θ en considérant la propagation de flamme et les processus d'auto-inflammation en même temps.	136
9.25	Données expérimentales et profils axiaux de la température moyenne issus des calculs numériques pour différentes valeurs de Θ	137
9.26	Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne (gauche) et de la température moyenne (droite) obtenus à différentes distances axiales de la sortie du brûleur. Comparaison avec des données expérimentales [31] pour différentes valeurs du paramètre de modélisation Θ . La table issue par la méthode d'autosimilarité est utilisée.	139
9.27	Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne et de la température moyenne au tour de $x_1/d = 40$ ($\Theta = 1$). La table issue par la méthode d'autosimilarité est utilisée.	140
9.28	Champs de température moyenne obtenus avec consideration de la propagation du front de flamme et les processus d'auto-inflammation ($\Theta = 1$) en initialisant $\tilde{c} = 0$ (gauche) et $\tilde{c} = 1$ (droite).	140
9.29	Champs de température moyenne obtenus sans (gauche) ou avec (droite) consideration de la propagation du front de flamme ($\Theta = 100$).	141
9.30	Gauche : champ de taux d'avancement temporel $\tilde{c}(\mathbf{x}, t)$ obtenu en demi domaine physique avec consideration de la propagation du front de flamme et les processus d'auto-inflammation ($\Theta = 100$). Droite : champ du taux d'avancement moyen stationnaire résolu $\tilde{c}(\mathbf{x})$	141
9.31	Gauche : champ du taux de réaction moyen $\bar{\omega}$. Milieu : champ de la contribution $\bar{\omega}_i$ au taux de réaction moyen. Droite : champ de la contribution $\bar{\omega}_p$ au taux de réaction moyen.	142

9.32	Données expérimentales et profils axiaux de la température moyenne issus des calculs numériques en considérant la propagation et l'auto-inflammation en même temps ($\Theta = 1$) et pour différentes valeurs de Ka	144
9.33	Données expérimentales et profils axiaux de la température moyenne issus des calculs numériques en considérant la propagation et l'auto-inflammation en même temps ($Ka = 0, 2$) et pour différentes valeurs de Θ	144
9.34	Gauche : analyse de sensibilité de la hauteur de flamme adimensionnelle à la valeur du paramètre de modélisation Θ en considérant la propagation de flamme et les processus d'auto-inflammation en même temps. Droite : Champ du taux d'avancement moyen stationnaire obtenu en considérant la propagation de flamme et les processus d'auto-inflammation en même temps ($\Theta = 1$).	145
9.35	Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne (gauche) et de la température moyenne (droite) obtenus à différentes distances axiales de la sortie du brûleur. Comparaison avec des données expérimentales [31] pour différentes valeurs du paramètre de modélisation Θ	147
9.36	Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne et de la température moyenne au tour de $x_1/d = 40$ ($\Theta = 1$).	148
9.37	Profils radiaux de la température moyenne en fonction de la fraction de mélange moyenne obtenus à différentes distances axiales de la sortie du brûleur pour différentes valeurs du paramètre de modélisation Θ . En bas en droite : résultats obtenus pour $\Theta = 1$ au tour de $x_1/d = 40$	149
9.38	Haut : Comparaison entre les profils axiaux de la température moyenne avec des données expérimentales pour différentes valeurs de Ka ($\Theta = 1$). Bas : Comparaison entre les profils axiaux de la température moyenne avec des données expérimentales pour différentes valeurs de Θ ($Ka = 0, 2$).	150
9.39	Haut : Analyses de sensibilité de la hauteur de flamme adimensionnelle à la valeur du paramètre de modélisation Ka (Gauche : $\Theta = 1$, Droite : $\Theta = 1, 5$). Bas : Analyses de sensibilité de la hauteur de flamme adimensionnelle à la valeur du paramètre de modélisation Θ (Gauche : $Ka = 0, 03$, Droite : $Ka = 0, 2$).	151

9.40	Gauche : le champ du taux d'avancement moyen pour H_2/Air lorsque $Ka = 0,03$ et $\Theta = 1,5$. Droite : le champ de la température moyenne pour H_2/Air lorsque $Ka = 0,03$ et $\Theta = 1,5$	152
9.41	Données expérimentales et profils axiaux de la température moyenne issus des calculs numériques pour différentes valeurs de C_τ ($\Theta = 0,3$).	153
9.42	Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne (gauche) et de la température moyenne (droite) obtenus à différentes distances axiales de la sortie du brûleur. Comparaison avec des données expérimentales [31] pour différentes valeurs du paramètre de modélisation C_τ ($\Theta = 0,3$).	155
9.43	Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne et de la température moyenne au tour de $x_1/d = 40$ ($\Theta = 0,3$ et $C_\tau = 0,7$).	156
9.44	Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne et de la température moyenne au tour de $x_1/d = 50$ ($\Theta = 0,3$ et $C_\tau = 0,7$).	156
10.1	Schéma représentatif de CV2 [113, 116]	161
10.2	Gauche : configuration numérique simplifiée, Droite : un maillage utilisé.	162
10.3	Signal de pression temporel mesuré [113].	162
10.4	Comparaison de signal de pression temporel issu des simulations numériques avec celui mesuré expérimentalement pour les quatre premiers cycles [113].	163
10.5	Signal de pression temporel pendant la phase d'admission [114].	164
10.6	Champs de la vitesse obtenus des mesures par PIV (haut) et issus des simulations numériques (bas) pendant la phase d'admission.	165
10.7	Champs de la température issue des simulations numériques (haut) et observés expérimentalement (bas) à mêmes instants.	166
10.8	Champs de la température à différents instants dans la chambre.	168
10.9	Champs du temps de résidence normalisé à différents instants dans la chambre.	169
10.10	Champs de la température et du temps de résidence normalisé à 14 ms (haut) et $18,5\text{ ms}$ (bas) dans la chambre.	170

10.11 Différents types de cycle de la chambre CVC avec auto-inflammation prise par chemiluminescence haute fréquence. De haut à bas : auto-inflammation tardive, auto-inflammation prématurée, auto-inflammation durant la phase d'injection et champ de température par simulation. 171

Liste des tableaux

2.1	Constantes du modèle $k - \epsilon$ standard	25
4.1	Conditions expérimentales du cas HM9% de Dally et al. [46], CJ, CF et WT représente respectivement le jet central, le co-courant et la soufflerie, d les diamètres correspondants.	70
4.2	Conditions expérimentales de Cabra et al. [31], CJ et CF représente respectivement le jet central et le co-courant, d les diamètres correspondants.	70
9.1	Conditions expérimentales de Cabra et al. [31] en négligeant le méthane dans le coflow, CJ et CF représente respectivement le jet central et le co-courant, d les diamètres correspondants.	125
9.2	Conditions expérimentales de flamme de Cabra H_2/Air [30], CJ et CF représente respectivement le jet central et le co-courant, d les diamètres correspondants.	148

Introduction

La consommation d'énergie mondiale ne cesse de croître, ayant doublé en 40 ans, principalement portée par la croissance de la demande asiatique (Chine : 20,5%, Inde : 6,1% en 2017) et des grands pays (États-Unis : 15,6%, Russie : 5% en 2017). La consommation par habitant et par an en 2017 pour se nourrir, se chauffer, se déplacer ou encore se divertir est répartie de manière très inégale suivant les pays : 6,61 *tep* (tonnes d'équivalence pétrole) aux États-Unis, 3,68 *tep* en France, 2,21 *tep* en Chine. Malgré le développement des ressources renouvelables et l'épuisement des ressources fossiles disponibles (charbons, gaz et pétrole), 81,8% de la conversion des énergies primaires dans le monde est encore réalisée par la combustion de ces ressources fossiles (Rapport de 2017 de l'Agence Internationale pour l'Énergie).

D'un point de vue environnemental, les gaz brûlés, issus d'une combustion des hydrocarbures dans l'air, sont constitués de nombreux polluants dont certains participent à l'effet de serre (dioxyde de carbone CO_2 , méthane CH_4 , etc.) et d'autres sont dangereux pour la santé humaine, par exemple le monoxyde de carbone CO , les oxydes d'azote NO et NO_2 , le dioxyde de soufre SO_2 , etc.. Les émissions de gaz à effet de serre de l'Union Européenne sont imputables pour environ 80% à la production et à la consommation d'énergie. Au niveau mondial, les émissions de CO_2 dues à l'énergie en 2017 sont estimées par l'AIE (Agence Internationale pour l'Énergie) à 32840 *Mt*, en progression de 112% depuis 1973, dont 44,2% produits par le charbon, 34,6% par le pétrole et 20,5% par le gaz naturel. En 2017, la consommation par secteur était : industrie 29%, transports 29%, résidentiel 21%, tertiaire 8%, agriculture et pêche 2%, usages non énergétiques (chimie, etc.) 9%. La diminution des émissions de CO_2 ne peut se faire que par la diminution de la consommation globale. En revanche, pour les autres polluants, il faut agir directement sur la chambre de combustion afin de diminuer à la fois les oxydes d'azote NO_x et le

monoxyde de carbone CO et les imbrulés produits. L'objectif est d'obtenir un mélange de combustible et d'oxydant le plus homogène possible afin d'avoir une combustion plus efficace. Néanmoins, pour des raisons de sécurité, il est rarement possible de mélanger le combustible et l'air avant l'entrée dans la chambre de combustion. Les injecteurs dans les nouveaux concepts énergétiques doivent donc permettre de mélanger le plus rapidement possible les espèces chimiques avant la zone de flamme. Pour pouvoir améliorer et contrôler ces processus de combustion, il faut d'abord comprendre les mécanismes physiques élémentaires conduisant au mélange puis à la réaction des ces espèces chimiques. Dans ce cadre, les études académiques de la combustion non-prémélangée comme celle présentée dans cette thèse sont donc essentielles.

Malgré le développement des techniques de diagnostic depuis de nombreuses années pour analyser les mécanismes physiques impliqués dans les écoulements turbulents réactifs, leur utilisation ne permet toujours pas de satisfaire complètement les besoins des chercheurs pour comprendre les différents mécanismes et leurs interactions jusqu'aux plus petites échelles de l'écoulement. Dans le cas des écoulements réactifs, l'application de ces techniques de diagnostic peut être très difficile voire impossible lorsque l'environnement est agressif ou lorsque la géométrie étudiée est trop complexe. Dans ce contexte, les techniques de simulations numériques (CFD : Computational Fluid Dynamics) peuvent apparaître comme des outils complémentaires aux expériences pour approfondir les analyses physiques. Toutefois, ces outils numériques présentes aussi des difficultés liées à la large plage d'échelles caractéristiques des mécanismes physiques rencontrés dans ces écoulements turbulents réactifs. Ainsi, malgré l'augmentation de la puissance de calculateurs actuels, les maillages utilisés ne permettent toujours pas de tenir compte de toutes ces échelles et des approches statistiques, c'est-à-dire RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes), ou filtrées, c'est-à-dire, LES (Large Eddy Simulation) sont encore nécessaires. Ces approches nécessitent d'introduire des stratégies de modélisation pour tenir compte des mécanismes non-résolus, comme par exemple la partie du transport convectif aux petites échelles qui avec la diffusion moléculaire assure le mélange intime entre les espèces chimiques, ou encore le dégagement de chaleur qui est associé aux réactions chimiques qui produisent ou détruisent les molécules. De plus, les interactions de ces mécanismes élémentaires dont le comportement est très non-linéaire conduisent à des phénomènes très

spécifiques comme la propagation de front ou l'auto-inflammation en volume.

L'objectif à moyen terme des recherches en modélisation des écoulements turbulents réactifs présenté dans cette thèse est de combiner les simulations numériques avec les données expérimentales issues des techniques de diagnostic pour approfondir les analyses physiques. Si les résultats de simulations numériques sont validés par les données expérimentales disponibles, les résultats numériques peuvent être alors extrapolés dans des zones où les mesures obtenues par visualisations ne sont pas faisables ou peuvent fournir des informations complémentaires pour les quantités difficiles à mesurer. Dans ce cadre, l'utilisation d'outils numériques efficaces, c'est-à-dire permettant de retrouver les comportements les plus importants de l'écoulement mais avec un coût de calcul raisonnable, est un avantage qui permettrait de : (i) de compléter les quantités mesurées expérimentalement, (ii) d'effectuer des études paramétriques détaillées sur une plage plus étendue de valeur des paramètres, (iii) de faciliter le développement des modèles, (iv) de réaliser des simulations numériques de configurations de taille industrielle. Malgré le développement rapide de la LES [111], son coût de calcul est encore un frein à son utilisation pour des configurations pratiques. Ainsi, les approches de type RANS ou URANS sont parfois plus efficaces pendant les phases de développement des modèles. Ces simulations numériques plus rapides peuvent aussi être très utiles pendant les phases de conception des dispositifs expérimentaux pour choisir les conditions opératoires et les positions des capteurs, ou pour décider des quantités à analyser.

L'objectif à court terme des recherches présentées dans cette thèse est de développer une procédure de simulation numérique d'un écoulement turbulent réactif permettant de traiter séparément les mécanismes physiques (mélange, propagation de flamme et auto-inflammation) pour étudier leurs interactions. La configuration considérée pour étudier ces mécanismes est la combustion d'un jet de combustible dans un courant d'air à haute température (JHC : Jet-in-Hot-Coflow). Ces conditions sont représentatives de celles rencontrées dans différentes applications industrielles : brûleurs, fours industriels, moteurs, etc.. Les modèles de combustion développés dans cette thèse sont appliqués à la simulation numérique de deux brûleurs académiques de type JHC : ceux étudiés par Dally et ses collaborateurs [46] et par Cabra et ses collaborateurs [30, 31]. Ces dispositifs expérimentaux permettent d'étudier la stabilisation des flammes décollées des lèvres du brûleur (lifted

flame) lorsque les vitesses des jets sont suffisamment rapides. Les flammes sont stabilisées par propagation des fronts dans le prémélange partiel généré dans la couche de mélange et par l'augmentation de température induite par le co-courant d'air vicié. Ce mécanisme est souvent utilisé dans les installations industrielles pour limiter les gradients de température et la production de polluants NO_x [189]. L'auto-inflammation dans la couche de mélange est aussi possible lorsque la valeur de la température du co-courant d'air vicié est suffisamment élevée [106, 108]. L'intérêt de ces configurations académiques est d'étudier la compétition entre le mélange, la propagation du front de flamme et l'auto-inflammation. L'interaction de ces trois mécanismes apparaît aussi dans d'autres applications comme les moteurs à allumage commandé lorsqu'ils sont sujets au phénomène de cliquetis. L'auto-inflammation est alors un phénomène indésirable. Les interactions de ces mécanismes sont aussi à l'origine de certaines transitions du régime des déflagrations au régime des détonations. De manière générale, ces mécanismes d'auto-inflammation deviennent important dans la plupart des écoulements compressibles et réactifs.

Les mécanismes décrits ci-dessus ne nécessitent pas de modélisation particulière dès lors que toutes les échelles caractéristiques de l'écoulement sont résolues par les simulations numériques (DNS : Direct Numerical Simulation). Dans ce cas, l'utilisation d'une représentation détaillée des processus moléculaires, c'est-à-dire la diffusion dans un mélange multi-espèces associée à un schéma réactionnel permet de tenir compte de tous ces phénomènes physiques. Au contraire, dans le cas d'approches statistiques (RANS) ou filtrées (LES), les lois d'Arrhénius qui sont fortement non-linéaires conduisent à des échelles caractéristiques de longueurs et de temps trop petites pour être utilisées dans ces simulations. Les lois introduites pour traiter séparément les trois mécanismes physiques mentionnés ci-dessus nécessitent l'introduction de trois variables respectivement dédiées à la description de chacun d'entre eux : (i) une fraction de mélange $\xi(\mathbf{x}, t)$ ou un traceur du courant de combustible pour décrire le mélange non-réactif des espèces chimiques, (ii) le taux d'avancement des réactions chimiques $c(\mathbf{x}, t)$ pour décrire le mécanisme de propagation de flamme, (iii) un temps de résidence normalisé $\tau^*(\mathbf{x}, t)$ pour décrire le processus d'auto-inflammation.

Le temps de résidence est une quantité très utilisée dans le domaine des réacteurs chimiques et dont l'application à des écoulements réactifs complexes est relativement récente, voir Ghirelli et Leckner [65] pour une formulation détaillée des équations. Ce concept a

déjà été utilisé en combustion [69, 55, 120] mais présente des difficultés particulières par exemple pour traiter les conditions aux limites ou pour relier cette quantité au degré d'avancement des réactions chimiques.

Ce manuscrit de thèse est décomposé en trois parties et dix chapitres suivants :

- Les trois premiers chapitres sont consacrés à l'introduction des bases théoriques pour la description des mécanismes physiques fondamentaux (différents types de combustion et flammes) et leur modélisation (RANS et LES). La formulation des équations de transport des quantités moyennes (ou filtrées) pour ces variables importantes : fraction de mélange, taux d'avancement et temps de résidence, est présentée.
 - Les trois chapitres suivants présentent les modèles dédiés aux différents mécanismes physiques. Le quatrième chapitre présente le modèle de mélange non-réactif des espèces chimiques. L'analyse de la réponse du modèle est faite pour deux brûleurs de type JHC. Dans le cinquième chapitre, une procédure de décomposition est appliquée au taux de réaction chimique pour dissocier les processus d'auto-inflammation et de propagation de flamme. Le sixième chapitre introduit le modèle d'auto-inflammation basé sur le temps de résidence normalisé τ^* . Une synthèse du modèle de combustion turbulente proposé est présentée au chapitre 7.
 - Dans le huitième chapitre, l'équation pour le temps de résidence normalisé est validée par des calculs simples de réacteurs homogènes (0D) et de couche de diffusion (1D). Cette équation est également dérivée d'une équation "level-set" par analogie avec l'équation G.
 - Le modèle développé est appliqué à la simulation numérique (RANS) d'une flamme de type JHC au chapitre 9. Les résultats de ce chapitre ont conduit à la publication [183].
 - Enfin, le dernier chapitre présente les résultats numériques préliminaires d'une simulation de type LES, réalisées par N.K.Q. Kha (Post-doctorant), d'une chambre de combustion à volume constant (banc d'essai CV2 du laboratoire Pprime [115, 83]). L'objectif de travail est de démontrer la faisabilité d'utilisation du modèle pour compléter des résultats expérimentaux.
-

Première partie

Introduction à la modélisation de la combustion turbulente

Chapitre 1

Aérothermochimie

1.1 Hypothèses fondamentales

Ce travail est effectué dans le cadre général de la mécanique des milieux continus. Les mécanismes physiques qui ont lieu aux échelles moléculaires sont donc modélisés : la contrainte de cisaillement est celle d'un fluide newtonien, la diffusion moléculaire suit la loi de Fick, et les réactions chimiques sont représentées par des lois d'Arrhénius. De plus, nous considérons dans ce travail que le nombre de Mach est faible, que les effets Soret (effet de gradient de température), Dufour (effet de diffusion dans les milieux multi-espèces) et la baro-diffusion (effet de gradient de pression) sont négligeables, ainsi que le rayonnement thermique et les forces de volume.

1.2 Équations instantanées

Les équations instantanées, c'est-à-dire sans filtrage ni moyenne, les plus usuelles (dont les équations de Navier-Stokes) seront présentées dans ce paragraphe, voir les références [15, 177, 185, 89].

Équation de continuité

L'équation de continuité (conservation de la masse totale) s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k) = 0 \quad (1.1)$$

où u_k sont les trois composantes cartésiennes du champ de vitesse ($k = 1, 2, 3$) et ρ est la masse volumique du mélange.

Conservation des espèces

Le bilan de l'espèce j intervenant dans la réaction chimique s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_j) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k Y_j) = -\frac{\partial J_j^k}{\partial x_k} + \omega_j \quad (1.2)$$

où J_j^k représente le flux diffusif de masse de l'espèce j dans la direction k , Y_j et $\omega_j = \rho \Omega_j$ sont respectivement la fraction massique et le taux de réaction chimique de l'espèce j . Les flux diffusifs peuvent être modélisés avec la loi de Fick : $J_j^k = -\rho D_j \frac{\partial Y_j}{\partial x_k}$ où D_j est le coefficient de diffusion de l'espèce j . Nous pouvons alors simplifier le bilan de l'espèce j comme :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_j) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k Y_j) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_j \frac{\partial Y_j}{\partial x_k} \right) + \omega_j \quad (1.3)$$

Équation de bilan de la quantité de mouvement

Le bilan de la quantité de mouvement dans la direction i s'exprime par :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k u_i) = \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k} - \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (1.4)$$

avec τ_{ik} le tenseur des contraintes visqueuses :

$$\tau_{ik} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \delta_{ik} \quad (1.5)$$

où u_k sont les trois composantes cartésiennes du champ de vitesse ($k = 1, 2, 3$), δ_{ik} est le symbole de Kronecker ($\delta_{ik} = 1$ lorsque $i = k$ sinon $\delta_{ik} = 0$), μ est le coefficient de viscosité dynamique ($\mu = \rho \nu$) et p est la pression.

Équation de bilan de l'énergie

Le bilan de l'énergie totale e s'exprime :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k e) = -\frac{\partial q_k}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\tau_{jk} u_j) - \frac{\partial}{\partial x_k} (u_k p) + \dot{Q} \quad (1.6)$$

où q_k est le flux diffusif d'énergie dans la direction k et \dot{Q} est le terme source de chaleur du aux effets extérieurs (étincelles, laser, etc.). En négligeant l'échange de chaleur extérieure

\dot{Q} et en utilisant la relation entre l'énergie totale et l'enthalpie spécifique : $h = e + \frac{p}{\rho}$, la conservation de l'énergie conduit à l'équation pour l'enthalpie spécifique du mélange h :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k h) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum_i \rho D_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial p}{\partial t} + u_k \frac{\partial p}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \quad (1.7)$$

où λ représente la conductivité thermique du gaz, h_i est l'enthalpie spécifique de l'espèce i .

Hypothèse des gaz parfaits

Les gaz utilisés dans nos études sont considérés comme des gaz parfaits, la loi d'état s'exprime alors par :

$$p = \rho \frac{R}{M} T \quad (1.8)$$

avec $R = 8,314 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$ la constante des gaz parfaits et M la masse molaire du mélange qui est calculée par :

$$\frac{m}{M} = \sum_i \frac{m_i}{M_i} \quad (1.9)$$

où m et la masse du mélange, m_i et M_i sont respectivement la masse et la masse molaire de l'espèce i . Ce qui nous donne :

$$\frac{1}{M} = \sum_i \frac{Y_i}{M_i} \quad (1.10)$$

avec Y_i la fraction massique de l'espèce i .

Pour un gaz parfait, l'enthalpie spécifique du mélange s'exprime en fonction de celles des différentes espèces :

$$h = \sum_i h_i(T) Y_i \quad \text{avec} \quad h_i(T) = \int_{T_0}^T c_{p,i} dT + Q_{p,i}^0 \quad (1.11)$$

où $c_{p,i}$ est la capacité calorifique massique de l'espèce i à pression constante et $Q_{p,i}^0$ représente la chaleur de formation de l'espèce i à la pression constante et à la température de référence T_0 . L'enthalpie spécifique s'écrit alors :

$$h = \int_{T_0}^T \sum_i c_{p,i} Y_i dT + \sum_i Q_{p,i}^0 Y_i \quad (1.12)$$

1.3 Variables spécifiques à la combustion

Les trois variables spécifiques à la combustion utilisées dans ce manuscrit sont le taux d'avancement c , la fraction de mélange ξ et le temps de résidence τ_r dont les équations de transport sont présentées dans ce paragraphe.

Équation de transport de la fraction de mélange

Un cas simplifié est utilisé ici afin de présenter le concept de fraction de mélange. La fraction de mélange est un scalaire non réactif qui peut être défini de plusieurs façons dont l'objectif est de décrire le mélange entre deux courants. Dans le cas de la combustion, les deux courants sont le combustible et l'oxydant apparaissant dans l'équation d'une réaction chimique globale irréversible :



avec r_{st} le coefficient stœchimétrique massique de cette réaction qui permet de relier les taux de consommations du combustible (F) et de l'oxydant (O). Un scalaire non réactif : la variable de Schvab-Zeldovitch Z_F peut donc être définie de la manière suivante :

$$Z_F = Y_F - \frac{1}{r_{st}}Y_O \quad (1.14)$$

où Y_F et Y_O sont respectivement la fraction massique du combustible et de l'oxydant. En normalisant ce scalaire passif pour qu'il soit nul dans le courant d'oxydant et égale à l'unité dans le courant de combustible, on obtient une définition classique de la fraction de mélange ξ :

$$\xi = \frac{Z_F - Z_F^{oxy}}{Z_F^{fuel} - Z_F^{oxy}} \quad (1.15)$$

Les exposants *oxy* et *fuel* définissent respectivement le courant d'oxydant et de combustible¹. Une autre définition plus générale basée sur les courants d'entrée d'une installation sera présentée dans le chapitre 4.

1. Remarques : la distinction entre "O" et "oxydant" et entre "F" et "fuel" vient du fait que les courants qui se mélangent ne contiennent pas nécessairement que de l'oxydant ou que du fuel, mais sont des mélanges dont l'un contient d'avantage de fuel que l'autre.

En considérant l'approximation de Schvab-Zeldovitch [14] et les nombres de Lewis égaux à l'unité pour toutes les espèces :

$$Le_j = \frac{\lambda_j}{\rho c_{p,j} D_j} = 1 \quad \forall j \quad (1.16)$$

L'équation pour l'enthalpie spécifique (1.7) peut être simplifiée de la manière suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k h) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x_k} \right) \quad (1.17)$$

Cette équation est similaire à celle d'une espèce non réactive ($\omega_j = 0$ et $D_j = D$).

Dans un système adiabatique et imperméable aux espèces, la fraction de mélange peut être définie à partir de la fraction massique d'une espèce non réactive Y ou de l'enthalpie spécifique h :

$$\xi = \frac{Y - Y_O}{Y_F - Y_O} = \frac{h - h_O}{h_F - h_O} \quad (1.18)$$

où l'indice F est associé au courant issu de l'entrée de combustible (Fuel) ($\xi = 1$) et l'indice O est associé au courant issu de l'entrée d'oxydante ($\xi = 0$). D'après cette définition la fraction de mélange est alors un scalaire non réactif. En considérant que les nombres de Lewis sont unitaires pour toutes les espèces, l'équation de transport de la fraction de mélange ξ est la même que celle de l'enthalpie spécifique (1.17) et s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \xi) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k \xi) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \right) \quad (1.19)$$

Équation de transport du taux d'avancement

Les équations du bilan des espèces (1.3) et de la température (4.9) sont équivalentes lorsque les nombres de Lewis sont unitaires pour toutes les espèces. Dans ce cas, nous pouvons définir un scalaire réactif normalisé : le taux d'avancement, notée c , qui permet de décrire l'état du mélange telle que $c = 0$ dans des gaz frais et $c = 1$ dans des gaz brûlés. Cette variable peut être définie à partir de la température :

$$c = \frac{T - T_u}{T_b - T_u} \quad (1.20)$$

ou du volume spécifique du mélange :

$$c = \frac{\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_u}}{\frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u}} \quad (1.21)$$

ou d'une combinaison d'espèces chimiques. Les indices u et b représentent respectivement des gaz frais et des gaz brûlés. La définition retenue dépend des objectifs de l'étude : suivre les espèces minoritaires et les polluants ou représenter correctement l'expansion [61, 62, 63]. Dans ce manuscrit, celle basée sur le volume spécifique (1.21) est considérée [162]. L'écriture d'une équation de transport pour une variable normalisée n'est pas si simple dès lors que le dénominateur n'est pas une constante mais une fonction d'autres variables. Dans ce cas, des termes supplémentaires apparaissent dont des corrélations croisées entre l'avancement et les autres variables [25]. Pour des raisons de simplicité, ces termes supplémentaires sont négligés ici de sorte que l'équation pour l'avancement s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k c) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x_k} \right) + \omega_c \quad (1.22)$$

où ω_c est le taux de réaction chimique du taux d'avancement. En considérant une réaction chimique globale, ce taux de réaction chimique peut être décrit par une loi d'Arrhénius.

Équation de transport du temps de résidence

Le temps de résidence est une variable introduite pour décrire le temps passé par une particule fluide dans un système (ce concept est très utilisé en génie chimique pour l'étude des réacteurs [27, 69, 104]). Elle est dans ce cas initialisée à nulle à l'entrée du système. Cette variable sera utilisée ici pour la modélisation des processus d'auto-inflammation. Son intérêt, sa définition exacte et ses applications seront détaillées au chapitre 6.

L'équation pour le temps de résidence τ_r dans le cas général contient un terme source représentant l'évolution du temps, voir la référence [65] :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tau_r) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k \tau_r) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial \tau_r}{\partial x_k} \right) + \rho \quad (1.23)$$

Pour bien comprendre le sens physique de ce terme source, il suffit de se placer dans un cas très simplifié : $0D$ et $\rho = cte$ de telle sorte que l'équation (1.23) devient :

$$\frac{d\tau_r}{dt} = 1 \quad (1.24)$$

Dans ce cas très simple, le temps de résidence suivra parfaitement l'évolution du temps dans le réacteur. L'équation plus générale (1.23) tient compte des variations de masse volumique, de la convection, mais aussi de la diffusion moléculaire. Ce dernier terme est

présent (démonstré dans [65]) dès lors que le temps de résidence caractérise une particule fluide soumise à la diffusion moléculaire.

1.4 Équations moyennes

La Simulation Numérique Directe (DNS) caractérise les simulations numériques où les équations de Navier-Stokes sont résolues sans utilisation de modèle de turbulence. Toutes les échelles spatiales et temporelles de la turbulence dans le domaine de calcul (échelles de Kolmogorov, échelles intermédiaires et échelles intégrales) doivent donc être résolues. Cela implique forcément un maillage suffisamment fin pour que les petites structures turbulentes soient résolues et un domaine suffisamment large pour inclure les plus gros tourbillons. En 3D, le coût en temps de calcul de cette méthode est donc très important. Les résultats de DNS permettent d'obtenir des informations avec une haute précision qui sont difficiles ou impossibles à obtenir dans les expériences. Ces données permettent ensuite de mieux comprendre les phénomènes physiques ayant lieu aux plus petites échelles. La DNS est donc souvent utilisée pour des recherches fondamentales sur la turbulence et permet aussi la validation des modèles physiques utilisés ensuite pour la simulation d'applications pratiques.

1.4.1 Description statistique de la turbulence (RANS)

Dans les applications industrielles la plupart des écoulements rencontrés sont turbulents. Les variables usuelles permettant de décrire les caractéristiques de ces écoulements présentent de telles fluctuations qu'elles peuvent être considérées comme des variables aléatoires de l'espace et du temps où seules les quantités moyennes sont reproductibles. La turbulence est alors étudiée de manière statistique. L'évolution temporelle typique de deux mesures sont présentées sur la figure 1.1.

La variable instantanée aléatoire ϕ se décompose en deux parties : une partie moyenne $\bar{\phi}$ et une partie fluctuante ϕ' . La décomposition de Reynolds s'exprime alors :

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (1.25)$$

Cette moyenne $\bar{\phi}$ est une moyenne statistique qui peut être assimilée à une moyenne

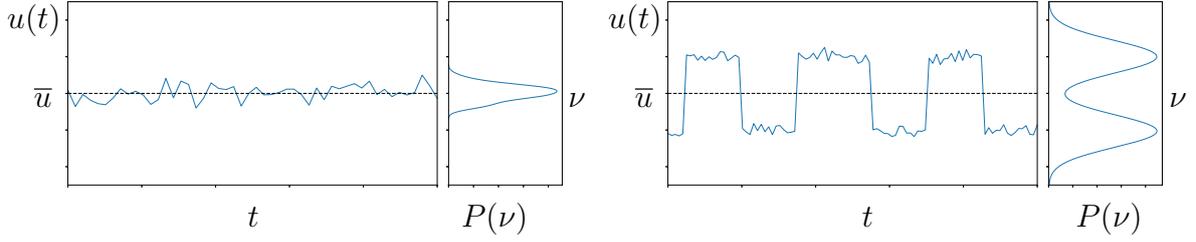


FIGURE 1.1 – Schéma d'un échantillonnage temporel et PDF correspondante pour deux signaux différents.

temporelle (si l'écoulement est statistiquement stationnaire) ou spatiale (si l'écoulement est statistiquement homogène dans une direction). Par définition, la moyenne de Reynolds des fluctuations est nulle : $\overline{\phi'} = 0$. L'utilisation des moyennes de Reynolds lorsque la masse volumique est variable conduit à des équations moyennes complexes et très différentes de celles des écoulements à masse volumique constante (des termes croisés apparaissent). Pour faciliter l'écriture des équations un autre opérateur de moyenne, appelé la moyenne de Favre [58], a été introduit. C'est une moyenne pondérée par la masse volumique :

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \quad (1.26)$$

La valeur instantanée peut être décomposée en une valeur moyenne au sens de Favre, notée $\tilde{\phi}$, la fluctuation correspondante, notée ϕ'' :

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

Par définition, la moyenne de Favre des fluctuations est nulle : $\tilde{\phi}'' = 0$. En revanche, la moyenne de Reynolds d'une fluctuation au sens de Favre n'est pas nulle : $\overline{\phi''} \neq 0$. Les moyennes de Favre et de Reynolds sont strictement équivalentes seulement lorsque la masse volumique du fluide est constante.

Cette approche statistique nécessite d'introduire aussi des fonctions densité de probabilité (PDF) pour décrire précisément la distribution des valeurs des variables. En utilisant des distributions connues simples, la forme peut être obtenue à partir de la connaissance de la moyenne et la variance des variables considérées, voir figure 1.1 pour la PDF $P(\nu)$.

Les équations bilans introduites précédemment ((1.3), (1.4), (1.6), (1.19), (1.22) et (1.23)) peuvent s'écrire de la manière suivante en utilisant les moyennes de Favre :

Équation de continuité

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k) = 0 \quad (1.28)$$

Équation de conservation des espèces moyenne

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_j) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{Y}_j) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D_j \frac{\partial Y_j}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' Y_j''} \right) + \bar{\omega}_j \quad (1.29)$$

Équation de bilan de la quantité de mouvement moyenne

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{u}_i}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\tau}_{ik} - \overline{\rho u_k'' u_i''}) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (1.30)$$

Équation de bilan de l'énergie moyenne

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{e}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{e}) = -\frac{\partial \bar{q}_k}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\tau_{jk} u_j} - \overline{\rho u_k'' e''}) - \frac{\partial}{\partial x_k} (\tilde{u}_k \bar{p}) \quad (1.31)$$

Équation de transport de la fraction de mélange moyenne

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\xi}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{\xi}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' \xi''} \right) \quad (1.32)$$

Équation de transport du taux d'avancement moyenne

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{c}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial c}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' c''} \right) + \bar{\omega}_c \quad (1.33)$$

Équation de transport du temps de résidence moyenne

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\tau}_r) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{\tau}_r) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tau_r}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' \tau_r''} \right) + \bar{p} \quad (1.34)$$

Comparé aux équations instantanées, les équations moyennes, excepté l'équation de continuité, font toutes apparaître des termes supplémentaires. Ces nouveaux termes représentent le transport convectif des variables par les fluctuations de vitesse de l'écoulement : ce sont les co-variances vitesse/variable. Ils sont appelés les flux turbulents, et nécessitent des modèles de fermeture :

- $\overline{\rho u_k'' Y_j''}$ est le flux turbulent de la fraction massique de l'espèce j .
- $\overline{\rho u_k'' u_i''}$ est le flux turbulent de la quantité de mouvement plus courant appelé tenseur des contraintes de Reynolds R_{ki} .
- $\overline{\rho u_k'' e''}$ est le flux turbulent de l'énergie.
- $\overline{\rho u_k'' \xi''}$ est le flux turbulent de la fraction de mélange.
- $\overline{\rho u_k'' c''}$ est le flux turbulent du taux d'avancement.
- $\overline{\rho u_k'' \tau_r''}$ est le flux turbulent du temps de résidence.

Afin de proposer des modèles pour ces termes et pour estimer la forme des PDF des variables, les équations de transport des variances sont souvent nécessaires :

Équation de transport de la variance de la fraction de mélange ($\widetilde{\xi''^2}$) moyenne

$$\frac{\partial \overline{\rho \widetilde{\xi''^2}}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \widetilde{u}_k \widetilde{\xi''^2}}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi''^2}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' \xi''^2} \right) - 2 \overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} - 2 \overline{\rho u_k'' \xi''} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k} \quad (1.35)$$

Équation de transport de la variance du taux d'avancement ($\widetilde{c''^2}$) moyenne

$$\frac{\partial \overline{\rho \widetilde{c''^2}}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \widetilde{u}_k \widetilde{c''^2}}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\underbrace{\overline{\rho D \frac{\partial c''^2}{\partial x_k}}}_{(1)} - \underbrace{\overline{\rho u_k'' c''^2}}_{(2)} \right) - 2 \underbrace{\overline{\rho D \frac{\partial c''}{\partial x_k} \frac{\partial c''}{\partial x_k}}}_{(3)} - 2 \underbrace{\overline{\rho u_k'' c''}}_{(4)} \frac{\partial \widetilde{c}}{\partial x_k} + 2 \underbrace{\overline{c'' \omega_c}}_{(5)} \quad (1.36)$$

Ces équations font aussi apparaître des termes supplémentaires : le temps de transport turbulent de la variance $\overline{\rho u_k'' \xi''^2}$, le terme de production par les gradients moyens (terme (4) de l'équation (1.36)), le terme de dissipation des fluctuations (terme (3)) et le terme source chimique (terme (5)). Les modèles de fermeture correspondants seront présentés dans le chapitre suivant.

1.4.2 Description filtrée de la turbulence (LES)

La LES est une approche qui peut-être présentée comme un compromis entre RANS et DNS. Le temps de calcul est donc raisonnable par rapport à la DNS et contrairement au RANS les grosses structures sont directement calculées. Seules les petites structures nécessitent des modèles. Les équations de Navier-Stokes doivent donc être filtrées spatialement pour ne pas tenir compte de toutes les échelles de la turbulence. Plus de détails peuvent être trouvés dans les références [154, 143, 144, 166, 52, 53]. L'opération

mathématique est une convolution entre un filtre et une variable. Dans ce cas là, la variable filtrée est donc une moyenne sur un volume donné. La grandeur filtrée dans l'espace physique suit le formalisme suivant :

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}) = \int \phi(\mathbf{x}')F(\mathbf{x} - \mathbf{x}')d\mathbf{x}' \quad (1.37)$$

où F est le filtre LES (filtre boîte ou filtre gaussien connus dans l'espace physique). Le filtrage au sens de Favre pondéré par la masse volumique peut aussi être étendu en LES :

$$\bar{\rho}\tilde{\phi}(\mathbf{x}) = \int \rho\phi(\mathbf{x}')F(\mathbf{x} - \mathbf{x}')d\mathbf{x}' \quad (1.38)$$

Les fluctuations autour de la grandeur filtrée au sens de Reynolds et de la grandeur filtrée au sens de Favre sont respectivement notées ϕ' et ϕ'' .

Les équations filtrées correspondant à une approche LES sont quasiment identiques à celles utilisées en RANS. En appliquant ce "filtre de Favre", les équations filtrées peuvent s'écrire de la manière suivante :

Équation de continuité

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho}\tilde{u}_k) = 0 \quad (1.39)$$

Équation de conservation des espèces filtrées

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\tilde{Y}_j) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho}\tilde{u}_k\tilde{Y}_j) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\overline{\rho D_j \frac{\partial Y_j}{\partial x_k}} - \bar{\rho} (\widetilde{u_k Y_j} - \tilde{u}_k \tilde{Y}_j) \right] + \bar{\omega}_j \quad (1.40)$$

Équation de bilan de la quantité de mouvement filtrée

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_k\tilde{u}_i}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} [\bar{\tau}_{ik} - \bar{\rho} (\widetilde{u_k u_i} - \tilde{u}_k \tilde{u}_i)] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (1.41)$$

Équation de bilan de l'énergie filtrée

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\tilde{e}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho}\tilde{u}_k\tilde{e}) = -\frac{\partial \bar{q}_k}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} [\bar{\tau}_{jk}u_j - \bar{\rho} (\widetilde{u_k e} - \tilde{u}_k \tilde{e})] - \frac{\partial}{\partial x_k} (\tilde{u}_k \bar{p}) \quad (1.42)$$

Les quantités inconnues sont les termes de transport convectif non-résolus des variables lesquels ont besoin des modèles de fermeture :

- $\bar{\rho} \left(\widetilde{u_k Y_j} - \widetilde{u_k} \widetilde{Y_j} \right)$ représente le transport convectif non-résolu de la fraction massique de l'espèce j .
- $\bar{\rho} \left(\widetilde{u_k u_i} - \widetilde{u_k} \widetilde{u_i} \right)$ représente le transport convectif non-résolu de la quantité de mouvement qui sont désignées par le tenseur des contraintes de Reynolds R_{ki} .
- $\bar{\rho} \left(\widetilde{u_k e} - \widetilde{u_k} \widetilde{e} \right)$ représente le transport convectif non-résolu de l'énergie.

1.4.3 Conclusions

Dans ce travail :

- J'utiliserai le concept de fraction de mélange bien qu'il présente des limitations pour les écoulements multi-espèces et en particulier lorsque l'hydrogène est utilisé ($Le \neq 1$). L'utilisation d'une fraction de mélange à l'avantage d'être simple et de faciliter le développement des modèles.
 - J'utiliserai aussi une variable d'avancement pour les mêmes raisons de simplicité bien qu'il présente des limitations lorsque des schémas cinétiques détaillés sont nécessaires. Toutefois, l'utilisation de données tabulées permettra d'éviter l'hypothèse de réaction globale très limitante pour décrire précisément les mécanismes chimiques.
 - J'utiliserai principalement une approche RANS bien que des calculs directs (1D) soient aussi utilisés pour valider les modèles et des calculs préliminaires en LES soient finalement présentés.
-

Chapitre 2

Modélisation de la turbulence

2.1 Théories

La turbulence est un phénomène apparaissant dans la plupart des écoulements pratiques, par exemple l'écoulement de gaz dans les chambres de combustion ou dans des fours industriels. La turbulence est générée dès que le nombre de Reynolds : $Re = \frac{U_0 L_0}{\nu}$ (ν est la viscosité cinématique du fluide, U_0 et L_0 sont respectivement la vitesse et la longueur caractéristique de l'écoulement) dépasse une certaine limite critique. Ce nombre, qui compare les effets d'inertie aux effets visqueux, doit donc être assez grand pour que l'instabilité à l'origine de la turbulence se déclenche. L'augmentation de la vitesse dans un canal peut conduire à un accroissement du gradient de vitesse dû à la présence de la paroi et générer de la turbulence. Des obstacles peuvent aussi générer de la turbulence.

La turbulence est généralement représentée par des structures tourbillonnaires de différentes tailles. Les plus gros tourbillons sont liés à la dimension de la configuration et les plus petits tourbillons sont dissipés par les forces visqueuses. Les bornes du spectre des échelles de longueur sont définies par la configuration d'un côté et par la viscosité du fluide de l'autre.

Kolmogorov a développé une théorie pour la turbulence homogène et isotrope en 1941 [87] : les processus de transfert d'énergie entre les plus gros et les plus petits tourbillons devrait être invariants quelle que soit la valeur de l'intensité de la turbulence. Les gros tourbillons associés à la géométrie vont transmettre leur énergie aux plus petits tourbillons. Plus les tourbillons sont petits, plus la dissipation d'énergie cinétique en cha-

leur par les forces visqueuses est facilitée. Trois gammes d'échelles de longueur sont alors définies (voir la figure 2.1) :

- Les grandes échelles (échelles intégrales) dont les propriétés sont spécifiques à la géométrie d'écoulement. Ces échelles correspondent à la production d'énergie. L'échelle de longueur des gros tourbillons, notée l_T , peut être retrouvée par la relation suivante :

$$l_T \propto \frac{k^{3/2}}{\epsilon} \quad (2.1)$$

avec k l'énergie cinétique turbulente et ϵ son taux de dissipation. Le temps caractéristique des grandes échelles, noté τ_T , peut être calculé par :

$$\tau_T = \frac{k}{\epsilon} \quad (2.2)$$

- Les échelles intermédiaires (zone inertielle) dont les propriétés sont indépendantes de la géométrie. À ces échelles, l'énergie est seulement transférée des gros tourbillons vers les petits.
- Les plus petites échelles (échelle de Kolmogorov) où la dissipation d'énergie par frottement visqueux a lieu. L'échelle de longueur des petits tourbillons, notée η , peut être définie comme :

$$\eta = \alpha_0 l_T Re_T^{-3/4} \quad (2.3)$$

avec α_0 est une constante et Re_T le nombre de Reynolds de la turbulence déterminé par :

$$Re_T = \frac{k^{1/2} l_T}{\nu} \quad (2.4)$$

Dans un écoulement turbulent, toutes les grandeurs caractéristiques, par exemple la densité et la température des fluides fluctuent continuellement et aléatoirement en fonction du temps et de l'espace. L'écoulement moyen est alors caractérisé par l'évaluation de grandeurs statistiques moyennes reproductibles (valeur moyenne, écart type, PDF, etc.).

2.2 Mélange scalaire

Pour un champ scalaire, par exemple la fraction de mélange, l'échelle intégrale de la fraction de mélange, notée l_ξ , représente l'échelle à laquelle les fluctuations scalaires sont

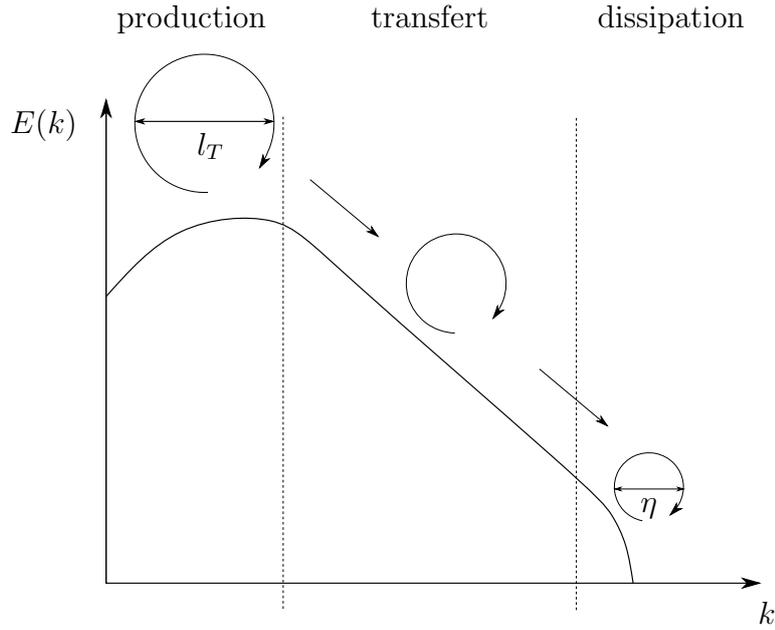


FIGURE 2.1 – Spectre de l'énergie des fluctuations de vitesse en cas de la turbulence homogène et isotrope.

produites. L'équation de transport de la fraction de mélange présentée précédemment (1.19) est un exemple d'équation pour un scalaire non réactif. Un terme source (ou puits) représente les effets de la chimie si le scalaire est réactif. Le temps de mélange, noté τ_ξ , représentant le temps caractéristique nécessaire pour que les espèces se mélangent sous l'effet de la turbulence est souvent évalué par :

$$\tau_\xi = C_\xi \tau_T \quad (2.5)$$

avec τ_T le temps caractéristique de l'échelle intégrale de la turbulence et C_ξ un paramètre de modélisation. En faisant l'hypothèse d'équilibre entre le terme de production dû à la turbulence et le terme de dissipation, le modèle de relaxation linéaire apparaît pour les termes de dissipation scalaire présents dans les équations (1.35) et (1.36) [125, 123] :

$$\overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} = \frac{\overline{\rho \xi''^2}}{\tau_\xi} \quad (2.6)$$

et

$$\overline{\rho D \frac{\partial c''}{\partial x_k} \frac{\partial c''}{\partial x_k}} = \frac{\overline{\rho c''^2}}{\tau_\xi} \quad (2.7)$$

2.3 Modélisation RANS et LES

Afin de pouvoir résoudre les équations moyennes, il faut proposer des modèles exprimant les flux turbulents $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ (tenseurs de Reynolds R_{ij}), $\overline{\rho u_i'' Y_j''}$ (flux turbulents scalaires) en RANS ou les flux non-résolus (voir chapitre 1.4.2) en LES. Le problème spécifique du terme source chimique moyen $\bar{\omega}$ sera présenté dans la partie suivante. Seuls les modèles les plus courants sont présentés ici.

Par analogie avec la diffusion moléculaire, Boussinesq introduit le concept de viscosité turbulente où la viscosité dynamique turbulente est $\mu_t = \bar{\rho} \nu_t$, et ν_t est la viscosité cinématique turbulente [20]. En considérant l'hypothèse de Boussinesq, différents modèles de plus en plus détaillés (et complexes) ont été proposés :

- Modèle à zéro équation : modèle algébrique proposé par Prandtl [146] (modèle de la longueur de mélange)
- Modèle à une équation : modèle de Prandtl-Kolmogorov
- Modèle à deux équations : $k - \epsilon$ qui sera détaillé au paragraphe suivant

Dans ce travail, seul le modèle $k - \epsilon$, le plus répandu, sera présenté.

2.3.1 Modèle $k - \epsilon$

Ce modèle nécessite la résolution d'une équation supplémentaire de l'énergie cinétique turbulente k :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{k}}{\partial x_k} = D_k + P_k + I_k - \bar{\rho} \tilde{\epsilon} \quad (2.8)$$

avec D_k , P_k , $\bar{\rho} \tilde{\epsilon}$ et I_k représentent respectivement le terme de diffusion, le terme de production, le terme de dissipation et l'interaction de la fluctuation de vitesse et du gradient de pression à les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} D_k &= -\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho u_k'' u_i'' u_i''} - \overline{u_i'' \tau_{ki}} - \overline{u_i'' \tau_{ki}} \right) \\ P_k &= -\overline{\rho u_k'' u_i''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \\ \bar{\rho} \tilde{\epsilon} &= \overline{\tau_{ki} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} \\ I_k &= -\overline{u_i''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Le terme de diffusion D_k peut être modélisé par une loi gradient :

$$D_k = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_k} \right) \quad (2.10)$$

où σ_k est une constante du modèle qui égale à l'unité.

Le terme de production P_k qui représente le transfert de l'énergie cinétique moyenne à l'énergie cinétique de turbulence est fermé en considérant l'hypothèse de Boussinesq.

Le terme d'interaction de la fluctuation de vitesse et du gradient de pression I_k peut être modélisé de la manière suivante :

$$I_k = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (2.11)$$

avec σ_t une constante du modèle. Ce terme est nul lorsque la masse volumique est constante.

Comme l'échelle de longueur η n'est pas connue a priori et comme sa détermination empirique est difficile, une équation de transport pour le taux de dissipation ϵ est utilisée dans ce modèle. Cette équation, proposée par Launder et Spalding [91] est obtenue par analogie avec l'équation pour k :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\epsilon}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{\epsilon}}{\partial x_k} = D_\epsilon + \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} [C_{\epsilon 1} P_k - C_{\epsilon 2} \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + C_{\epsilon 3} I_k] \quad (2.12)$$

avec $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$, $C_{\epsilon 3}$ les constantes du modèle et le terme de diffusion D_ϵ déterminé par :

$$D_\epsilon = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial x_k} \right) \quad (2.13)$$

La viscosité turbulente, notée μ_t peut être déterminée par :

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (2.14)$$

où C_μ est une constante déterminée empiriquement. Les constantes du modèle $k - \epsilon$ standard sont récapitulées dans la table 2.1

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

TABLE 2.1 – Constantes du modèle $k - \epsilon$ standard

Il existe aussi des modèles analogues : $k - \omega$, RNG (Re-Normalized Group) $k - \epsilon$, etc. permettant de traiter des cas particuliers comme les jets ronds. Le modèle $k - \epsilon$ est limité au cas où la turbulence est quasiment isotropique. De plus, l'hypothèse de Boussinesq (la loi gradient pour les flux turbulents) n'est plus valable lorsque la masse volumique varie. Dans ce cas, les effets de l'expansion conduisent à une inversion du sens des flux turbulents. Ce terme devient anti-diffusif, on parle aussi de diffusion à contre-gradient. Des modèles algébriques mais aussi des modèles du second ordre qui consistent à résoudre des équations de transport pour les tensions de Reynolds R_{ij} et les flux turbulents [79, 74, 92, 175, 176, 51, 151, 152, 153] ont aussi été proposés. Néanmoins, pour des raisons de simplicité, ces effets sont négligés dans ce travail.

2.3.2 Modèles LES : méthode de Smagorinsky et WALE

Le modèle le plus couramment utilisé en LES est le modèle de Smagorinsky (standard ou dynamique) [164] basé sur l'hypothèse de Boussinesq. Le tenseur de Reynolds peut être découpé en deux parties :

$$R_{ij} = R_{ij}^D + R_{ij}^I \quad (2.15)$$

où R_{ij}^D et R_{ij}^I représentent respectivement la partie de déviation et la partie isotropique. Ces deux parties s'expriment comme :

$$\begin{aligned} R_{ij}^D &= R_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} R_{kk} \\ R_{ij}^I &= \frac{\delta_{ij}}{3} R_{kk} \end{aligned} \quad (2.16)$$

La viscosité turbulente (au sens du RANS) est en LES appelée la viscosité de sous-maille ν_t . Elle est introduite pour relier la partie de déviation R_{ij}^D au tenseur de déformations de la manière suivante :

$$R_{ij}^D = -2\bar{\rho}\nu_t \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \tilde{S}_{kk} \right) \quad (2.17)$$

avec la viscosité modélisée par une constante de modélisation C_s de la façon suivante : $\nu_t = (C_s \Delta)^2 \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}$. La trace du tenseur de Reynolds R_{kk} peut être modélisée par l'expression de Yoshizawa [188] :

$$R_{kk} = 4C_I \bar{\rho} \Delta^2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij} \quad (2.18)$$

avec C_I une constante du modèle.

Le modèle de Smagorinsky standard n'est valable que dans la zone loin de la paroi puisqu'il est très dissipatif [159]. Le modèle de Smagorinsky dynamique proposé par Germano et al. [64] pour des écoulements incompressibles et par Moin et al. [119] pour les écoulements compressibles sert alors à généraliser le modèle pour qu'il soit utilisable dans des écoulements avec des parois.

Un autre modèle courant pour les simulations LES est le modèle de WALE (Wall-Adapting Local Eddy-Viscosity) introduit par Nicoud et Ducros [129]. La viscosité turbulente de sous-maille peut être déterminée par :

$$\mu_t = \bar{\rho} \Delta^2 \frac{(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{\frac{3}{2}}}{(\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{\frac{5}{2}} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{\frac{5}{4}}} \quad (2.19)$$

avec

$$\begin{aligned} \Delta &= C_w V^{\frac{1}{3}} \\ S_{ij}^d &= \frac{1}{2} (\bar{g}_{ij}^2 + \bar{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \bar{g}_{kk}^2 \\ \bar{g}_{ij} &= \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \\ \bar{g}_{ij}^2 &= \bar{g}_{ik} \bar{g}_{kj} \end{aligned} \quad (2.20)$$

Le tenseur de déformation \bar{S}_{ij} est défini par :

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.21)$$

avec la constante du modèle $C_w = 0,325$.

Ce modèle est adapté aux problèmes de la turbulence en paroi.

2.3.3 Conclusions

Mon travail de thèse m'a conduit à utiliser principalement une approche RANS avec le modèle $k - \epsilon$ et des lois gradients pour des raisons de simplicité bien que des modèles mieux adaptés aux écoulements étudiés mais aussi plus complexes auraient pu être utilisés. Les modèles de combustion développés sont donc présentés dans ce cadre. Enfin, j'ai participé à l'implantation du modèle dans un code LES associé au modèle WALE pour son application à un dispositif du laboratoire.

Chapitre 3

Combustion et flammes

La combustion est une réaction exothermique d'oxydoréduction. Pour avoir une réaction de combustion il faut d'abord que le combustible et l'oxydant soient en contact pendant un temps suffisamment long et que l'énergie d'activation nécessaire soit apportée. Une flamme correspond à une zone définie spatialement où les variations de concentration d'espèces et de température sont dues aux réactions chimiques. Il est usuel de définir deux types de flamme différents selon la manière d'introduire des réactifs dans la configuration : les flammes de prémélange lorsque le combustible et l'oxydant sont parfaitement mélangés avant la combustion et les flammes non-prémélangées (ou flammes de diffusion) lorsque le combustible et l'oxydant sont injectés séparément. Dans cette section, nous présenterons séparément ces deux types de flammes dans un écoulement laminaire ou turbulent, puis nous présenterons les processus d'auto-inflammation qui décrivent l'évolution temporelle introduite par les réactions chimiques.

3.1 Flammes de prémélange

Une flamme de prémélange s'observe lorsque l'inflammation des gaz se déroule dans un milieu où le combustible et l'oxydant sont déjà mélangés. L'écoulement peut être laminaire ou turbulent.

3.1.1 Cas laminaire

Dans le cas de la flamme de prémélange, le combustible est toujours parfaitement mélangé au comburant avant l'inflammation et la température des gaz frais est suffisamment faible pour que le mélange ne puissent pas réagir spontanément. Les réactions chimiques débiteront que si la température est suffisamment élevée. Après les premiers instants d'inflammation obtenus par exemple par une étincelle, un front de flamme séparant les gaz frais et les gaz brûlés se propage sous l'effet de la diffusion moléculaire et diffusion de la chaleur (conduction thermique). La vitesse de propagation, notée S_L est la vitesse à laquelle la flamme laminaire se déplace. Elle peut varier de 0,1 m/s à 1 m/s pour les combustibles usuels sous les conditions normales de température et de pression. Ce mode de propagation de combustion est le régime des déflagrations. Il y a un équilibre entre la production de chaleur due aux réactions chimiques et la diffusion dans la zone de réaction et un équilibre diffusion/convection dans la zone de préchauffage, voir figure 3.1. Cet échauffement par diffusion se fait sur une épaisseur δ_L . La propagation de la flamme est le résultat d'une interaction de deux phénomènes : (1) les gaz brûlés chauffent les gaz frais par conduction thermique, (2) les gaz frais ainsi chauffés réagissent à leur tour et dégagent la chaleur qui permet de chauffer les gaz frais plus en aval. Pour décrire la structure de la flamme, considérons l'exemple où les réactifs sont placés initialement dans un tube puis allumés à une extrémité. Dans le cas idéal, un front de flamme plan et perpendiculaire à l'axe du tube se propage à une vitesse constante après une phase d'accélération. Les profils de température et de concentration des réactifs sont donnés sur la figure 3.1.

La concentration de réactifs diminue car les gaz brûlés diffusent vers les réactifs. La température augmente par diffusion de la chaleur issue des gaz brûlés. En première approximation lorsque l'énergie d'activation est importante, c'est-à-dire le nombre de Zeldovich est grande ($Ze = ((T_b - T_u)/T_b) * (E_a/(RT_b))$), alors l'épaisseur de diffusion correspond à l'épaisseur totale de la flamme (notée δ_L) car les réactions chimiques se produisent dans une zone dont l'épaisseur (notée δ_R) est très fine devant celle de la flamme. Cette zone de réaction est située du côté des gaz brûlés, là où la température est élevée. En considérant une réaction globale, voir Eq. (1.13), le taux de disparition du combustible

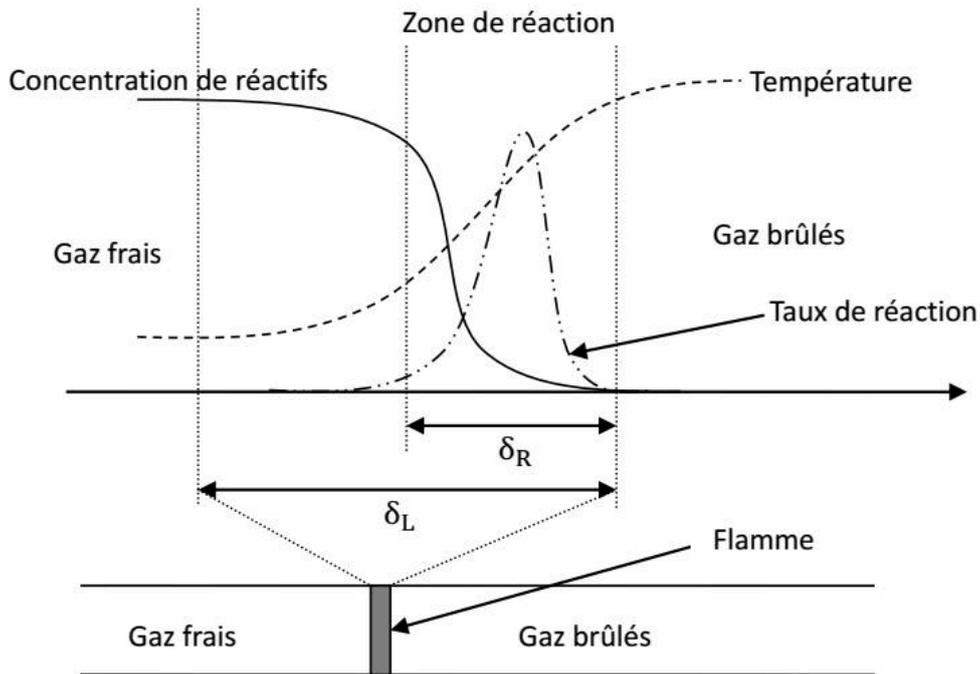


FIGURE 3.1 – Structure d'une flamme laminaire de prémélange.

est exprimé par la loi d'Arrhénius [15] :

$$\Omega_Y = Y_F^a Y_O^b B T^c \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.1)$$

où Y est la fraction massique d'une espèce, les indices F et O sont respectivement le combustible (Fuel) et l'oxydant, R est la constante des gaz parfaits, E_a est l'énergie d'activation et B est le facteur pré-exponentiel, a , b et c sont des constantes. Lorsque E_a est grand, Ω_Y est négligeable partout sauf dans la zone où la température est élevée et où il reste à la fois du combustible et de l'oxydant. Le rapport entre les épaisseurs δ_L et δ_R est relié à l'énergie d'activation.

La flamme engendre aussi un mouvement des gaz brûlés par rapport à elle-même. Celui-ci est la conséquence du dégagement de chaleur. En effet, lorsque le nombre de Mach est faible, la pression peut être considérée comme thermodynamiquement constante. Le bilan de masse, s'écrit alors :

$$\rho_u S_L = \rho_b u_b \quad (3.2)$$

où ρ_u et ρ_b sont respectivement la masse volumique des gaz frais et des gaz brûlés, S_L est la vitesse de propagation de la flamme (la vitesse des gaz frais par rapport à la flamme)

et u_b est la vitesse des gaz brûlés par rapport à la flamme. Cette conservation de masse conduit à une accélération des gaz brûlés par rapport aux gaz frais.

Si le processus est adiabatique et que la température et les espèces diffusent de la même manière, alors, une seule variable permet de caractériser la flamme : une variable d'avancement de la réaction notée c . Cette variable est nulle dans les gaz frais et vaut l'unité dans les gaz brûlés. Son évolution est assimilable à l'évolution de la température comme à celle de la fraction massique des gaz brûlés.

Cette représentation des flammes laminaires de prémélange est évidemment très simplifiée, en particulier, l'utilisation d'une loi d'Arrhénius pour une réaction globale (3.1) n'est possible que dans des cas très spécifiques.

En réalité, l'ordre de la réaction n'est pas unique. L'ensemble des réactions ne peut pas se ramener à une étape, mais se décrit par un enchaînement d'étapes élémentaires. L'équation stœchiométrique de la transformation chimique ne représente que le passage de l'état initial à l'état final. La description détaillée des étapes chimiques élémentaires constitue le schéma réactionnel et permet de représenter très précisément la cinétique de la transformation chimique. Les mécanismes réactionnels utilisés dans ce travail sont le schéma GRI30 développé initialement pour le méthane [165], celui de Conaire pour l'hydrogène [133]. Toutefois, de nombreux autres schémas existent pour décrire les réactions chimiques dans des conditions particulières (hautes pressions, auto-inflammation) ou pour décrire la combustion de combustible plus lourd (hexane, octane, etc.), ou pour limiter le nombre d'espèces utilisées (schéma réduit).

Dans ce manuscrit, ces schémas sont utilisés pour calculer précisément les propriétés et la structure d'une flamme laminaire de prémélange monodimensionnelle et les propriétés d'auto-inflammation.

3.1.2 Cas de prémélange turbulent

Les premiers travaux décrivant la structure d'une flamme de prémélange turbulente ont été réalisés par Damköhler en 1940. La structure interne de la flamme turbulente est vue comme une flamme laminaire, d'épaisseur très fine mais continuellement plissée par la turbulence [47]. Différents nombres caractéristiques peuvent être définis pour établir une classification des régimes de flammes. Les deux nombres caractéristiques sans dimensions

les plus utilisés sont les nombres de Damköhler D_a et de Karlovitz K_a définis par :

$$D_a = \frac{\tau_T}{\tau_c} = \frac{l_T S_L}{\delta_L u'} \quad (3.3)$$

$$K_a = \frac{\tau_c}{\tau_\eta} = \frac{\delta_L u_\eta}{\eta S_L} \quad (3.4)$$

où δ_L et S_L sont l'épaisseur de la flamme et la vitesse du front de la flamme laminaire, τ_T , l_T et u' sont respectivement le temps, l'échelle intégrale et la vitesse caractéristiques des plus grosses structures turbulentes (l'échelle intégrale), τ_η , η et u_η sont respectivement le temps, la longueur et la vitesse caractéristiques des plus petites structures (l'échelle de Kolmogorov, tourbillons dissipatifs). Les temps caractéristiques chimique τ_c et de la turbulence τ_T correspondant aux plus grands tourbillons et τ_η correspondant aux plus petits tourbillons sont respectivement calculés par : $\tau_c = \delta_L/S_L$, $\tau_T = l_T/u'$ et $\tau_\eta = \eta/u_\eta$. Ces propriétés caractéristiques de la turbulence peuvent être reliées à l'énergie cinétique turbulente k , la dissipation ϵ et la viscosité cinématique de l'écoulement ν de la façon suivante :

$$u' = \sqrt{k} \quad l_T = \frac{u'^3}{\epsilon} \quad u_\eta = \frac{\nu}{\eta} = (\nu\epsilon)^{1/4} \quad \eta = \frac{u_\eta^3}{\epsilon} = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4} \quad (3.5)$$

Nous pouvons déduire de ces relations le nombre de Reynolds turbulent Re_T :

$$Re_T = \frac{l_T u'}{\nu} = Da^2 Ka^2 \quad (3.6)$$

Selon la classification de Barrère [3] et Borghi [11], les trois types de flammes turbulentes de prémélange sont distingués suivant les valeur de D_a et K_a , avec u'/S_L en ordonnée et l_T/δ_L en abscisse : (1) les « flammes plissées », (2) les « flammes épaissies » et (3) les « flammes plissées-épaissies », voir la figure 3.2.

(1) Les « flammes plissées »

Dans le cas de chimie rapide ($D_a > 1$), une flamme turbulente plissée est consituée d'une ou plusieurs « flammelettes » (structures de flammes laminares) qui sont plissées par la turbulence. Pour ce type de flamme les plus petites échelles caractéristiques des tourbillons η (l'échelle de Kolmogorov) sont plus grandes que l'épaisseur de la flamme δ_L : $\eta > \delta_L$. Ainsi, les tourbillons ne peuvent pas pénétrer dans la structure interne de la flamme laminaire. Ce régime de flammelettes est divisé en deux sous régimes selon l'intensité de la turbulence. Lorsque l'échelle des fluctuations de vitesse u' est relativement faible

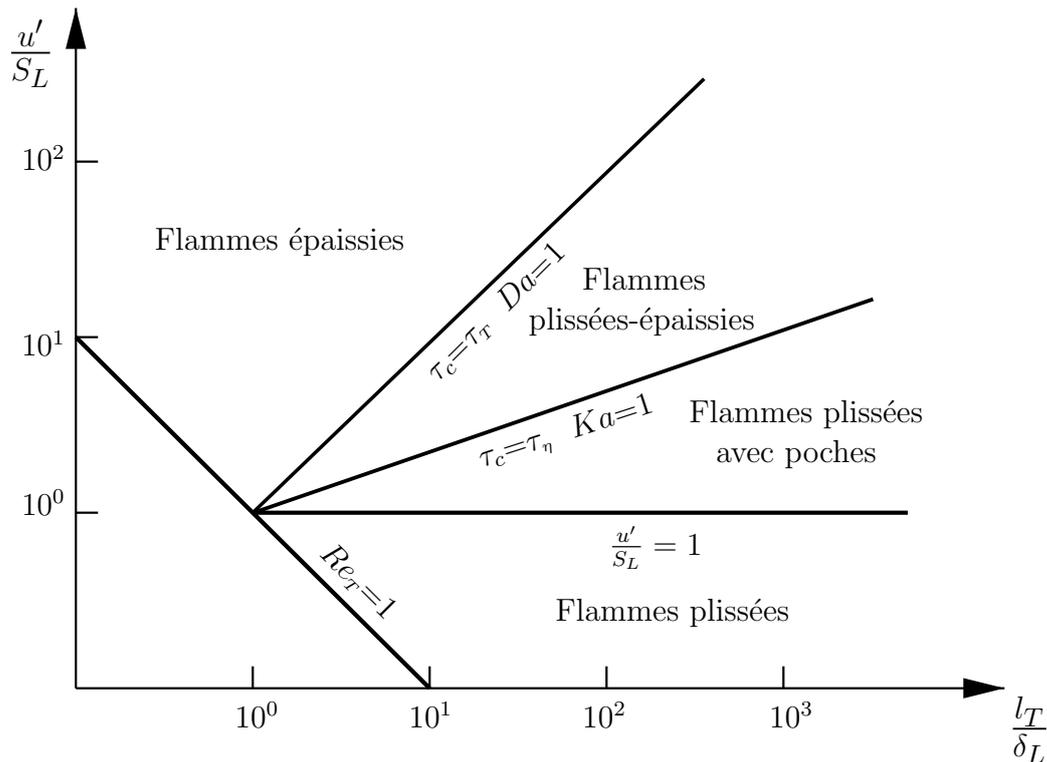


FIGURE 3.2 – Diagramme de classification des flammes turbulentes de prémélange (diagramme de Borghi).

par rapport à la vitesse de propagation de la flamme ($u' < S_L$) les tourbillons les plus gros ne peuvent que plisser le front de la flamme sans affecter la structure interne de la flamme. C'est le régime des flammelettes plissées sans poches. En revanche, lorsque la turbulence est plus intense ($u' > S_L$), les tourbillons les plus gros peuvent engendrer un plissement du front de flamme tel que les interactions entre deux fronts de flammes adjacents (« dos à dos ») sont possibles. Ainsi, des poches de gaz frais et de gaz brûlés séparées par des interfaces de réaction peuvent être observées. C'est le régime des flammelettes plissées avec poches.

En pratique, une flamme de type plissée peut être observée comme une longue flammelette d'épaisseur quasiment constante δ_L , plissée et courbée dans une zone ayant une largeur caractéristique, notée δ_T , qui peut être considérée comme l'épaisseur moyenne de la flamme turbulente (le "flame brush" en anglais).

(2) Les « flammes plissées-épaissies »

Lorsque l'échelle de Kolmogorov η diminue et devient plus petite que l'épaisseur de

la flamme δ_L ($\eta < \delta_L$), les plus petits tourbillons peuvent pénétrer dans la structure de flammelette. Ceci provoque alors un épaississement du front de flamme par la diffusion turbulente engendrée à l'intérieur de la flamme. La zone de préchauffage est donc affectée mais la zone de réaction reste mince devant ces tourbillons et est toujours plissée par la turbulence. C'est le régime de flammes plissées-épaissies.

(3) Les « flammes épaissies »

Quand la chimie n'est plus rapide ($D_a < 1$), les échelles de turbulence peuvent pénétrer dans les flammes laminaires et modifier leurs structures. Ainsi, les interactions entre les flammelettes ont lieu à toutes les échelles, même aux plus grandes (l'échelle intégrale l_T) et les flammes ne sont plus plissées mais épaissies.

3.2 Flammes non-prémélangées

3.2.1 L'approximation de Burke-Schumann

L'approximation de Burke-Schumann [28] représente la limite asymptotique pour les flammes non-prémélangées lorsque le nombre de Damköhler D_a est infiniment grand. Lorsque le temps caractéristique de la réaction chimique est très petit devant le temps caractéristique de l'écoulement, l'oxydant et le combustible ne peuvent pas coexister, ils réagissent instantanément. Les réactions se produisent alors à l'interface séparant le combustible et l'oxydant. Un exemple de la structure de flamme de diffusion obtenue avec l'approximation de Burke-Schumann pour le cas d'une réaction globale (équation (1.13)) est présenté sur la figure 3.3. Pour être plus réaliste, il est possible de prendre en compte toutes les espèces chimiques issues d'un mécanisme réactionnel détaillé. On considérera alors que les réactions chimiques permettant d'atteindre l'équilibre chimique infiniment rapidement, voir figure 3.4. Lorsque toutes ces réactions chimiques sont considérées infiniment rapides devant la diffusion, alors, nous retrouverons la même structure de flamme que celle présentée sur la figure 3.3 mais où l'équilibre chimique est atteint, voir figure 3.4. En utilisant cette approximation, Burke-Schumann montre que la fraction de mélange ξ permet de caractériser l'état thermodynamique du mélange. Cette variable est nulle dans l'oxydant pur et égale à l'unité dans le combustible pur. La flamme se trouve alors sur l'iso-

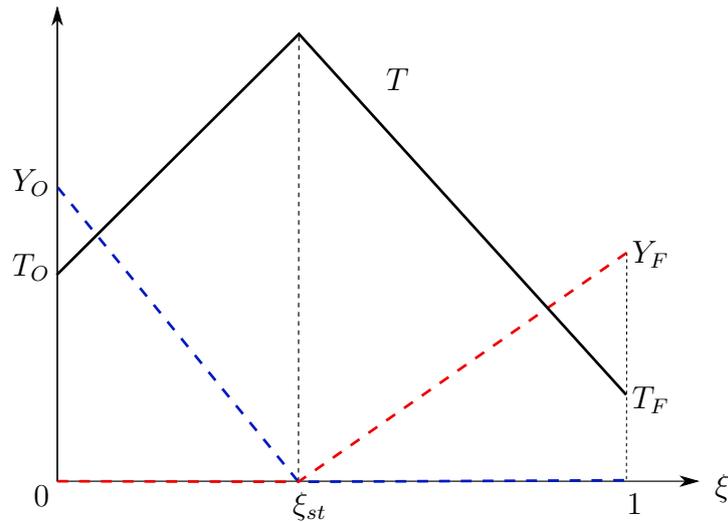


FIGURE 3.3 – Variation de la fraction massique du combustible Y_F (rouge pointillé), de l'oxydant Y_O (bleu pointillé), et de la température (noir continu) suivant l'approximation de Burke-Schumann.

surface $\xi = \xi_{st}$ (réaction globale) ou dans une zone autour de ξ_{st} (équilibre chimique), où ξ_{st} est la valeur de la fraction de mélange correspondant à un mélange stœchiométrique [78]. Les profils de température du mélange et de fraction massique d'oxydant et de combustible correspondant à cette description d'une flamme de diffusion sont présentés sur les figures 3.3 et 3.4. Dans le cas idéal (réaction globale), où les espèces et la température diffusent de la même manière ces profils sont des droites. La température du mélange atteint son maximum à $\xi = \xi_{st}$ qui correspond à la température maximale des produits de combustion d'un mélange stœchiométrique. La fraction massique de combustible est maximale dans le combustible pur et nulle à $\xi = \xi_{st}$. Le combustible diffuse jusqu'à $\xi = \xi_{st}$ où il est totalement consommé par les réactions chimiques. L'évolution de l'oxydant est similaire, mais du côté pauvre de la flamme. Dans le cas plus général où l'équilibre chimique est atteint, voir figure 3.4, la zone de réaction est localisée là où la courbure de la fonction $Y(\xi)$ ($\frac{d^2Y}{d\xi^2}$) est non nulle [15].

3.2.2 Cas laminaire

Regardons maintenant le cas où les réactions ne sont plus infiniment rapides. Comme le combustible et l'oxydant sont séparés avant l'inflammation pour que les réactions soient possibles les réactifs doivent d'abord diffuser l'un vers l'autre [8]. La zone de réaction

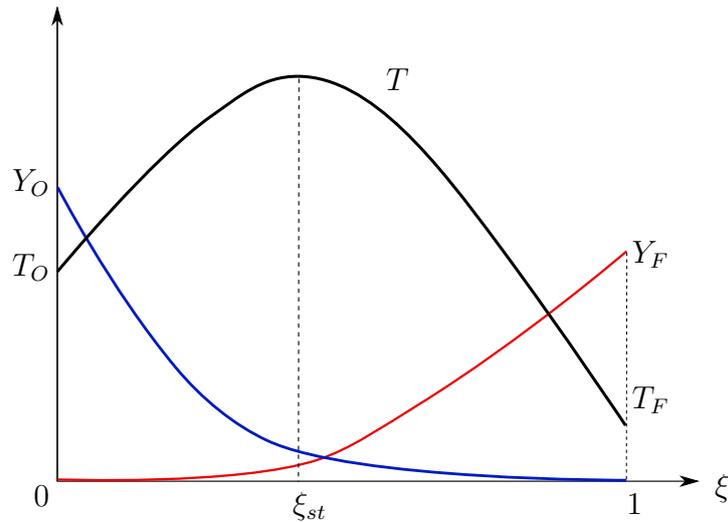


FIGURE 3.4 – Variation de la fraction massique du combustible Y_F (rouge), de l'oxydant Y_O (bleu), et de la température (noir) en considérant l'équilibre chimique.

s'établie donc là où les réactifs se rencontrent. Mais la chaleur dégagée et les espèces chimiques diffusent en même temps que les espèces réagissent, voir figure 3.5.

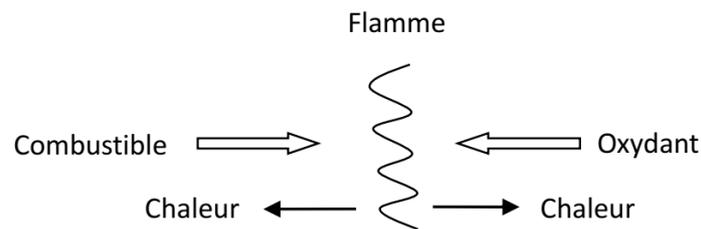


FIGURE 3.5 – Schéma d'une flamme de diffusion.

Pour prendre en compte les effets de cinétique chimique, c'est-à-dire, tenir compte à la fois du temps des réactions chimiques et du temps de diffusion des espèces, il est nécessaire de calculer l'écoulement associé à la flamme de diffusion. Le cas présenté sur la figure 3.5 est appelé flamme étirée. C'est une flamme plane laminaire dans un écoulement à contre-courant présentant un point d'arrêt. On considère ici une configuration d'écoulement laminaire, voir figure 3.6. Deux buses, l'une pour le combustible et l'autre pour l'oxydant sont placées face à face à une distance L . U et V sont les valeurs de la vitesse du combustible et de l'oxydant respectivement au niveau des injections. Une flamme de diffusion plane étirée par l'écoulement se positionne entre les deux courants. On a donc la relation suivante déduit de la conservation de la masse (la masse volumique du fluide ρ reste à

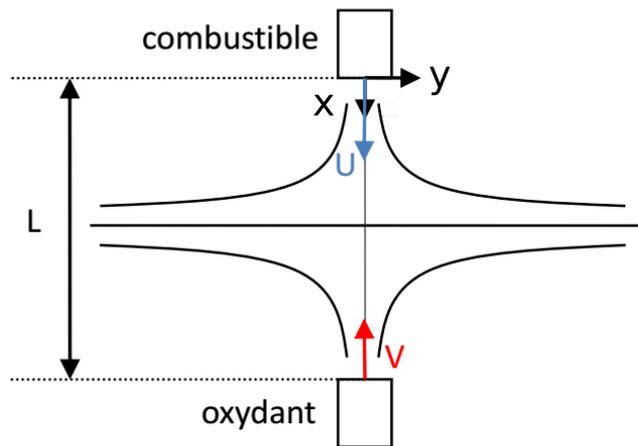


FIGURE 3.6 – Schéma d'un contre-courant.

constante dans l'équation présentée ci-dessous pour des raisons de simplicité) :

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3.7)$$

où (u, v) est le champ de vitesse dans le plan (x, y) . Le taux d'étirement χ qui a la dimension de l'inverse d'un temps est donc défini par :

$$\chi = \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial v}{\partial y} \quad (3.8)$$

En réduisant cette configuration à une étude unidimensionnelle au voisinage de l'axe de symétrie (l'axe x), le taux d'étirement est défini par :

$$\chi = \frac{U + V}{L} \quad (3.9)$$

Cette flamme peut être résolue analytiquement en utilisant l'équation de transport de la fraction de mélange ξ et des coordonnées de similarité, voir les références [48, 137, 139]. Elle peut aussi être résolue de manière numérique (*Cantera* [70]). La figure 3.7 présente les profils de fraction de mélange ξ et de température T calculés par *Cantera* pour un écoulement à contre-courant de CH_4/O_2 ($\chi = 6,7$ et $L = 2cm$).

En traçant le profil de température en fonction de la fraction de mélange, on obtient un profil très différent de celui de Burke-Schumann (présenté sur la figure 3.4), voir figure 3.8, mais présentant les mêmes caractéristiques globales.

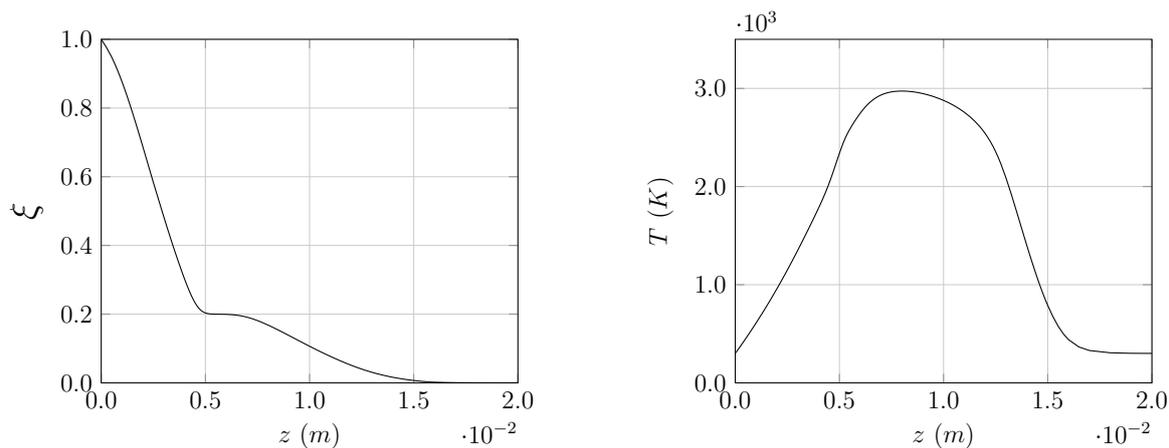


FIGURE 3.7 – Variation de la fraction de mélange ξ (gauche) et de la température T (droite) résolue par *Cantera* pour un mélange de CH_4/O_2 , pour $\chi = 6, 7$ et $L = 2cm$.

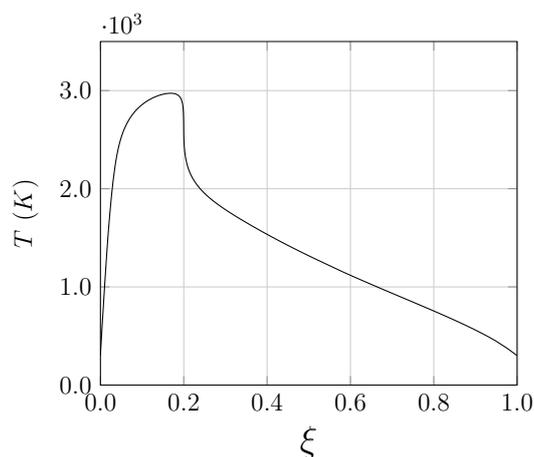


FIGURE 3.8 – Variation de la température T en fonction de la fraction de mélange ξ résolue par *Cantera* pour un mélange de CH_4/O_2 , pour $\chi = 6, 7$ et $L = 2cm$.

3.2.3 Cas turbulent

La configuration courante la plus représentative des flammes turbulentes non-prémélangées est le brûleur à gaz. Les travaux de Hottel et Hawthorne en 1949 [76] ont montré que la turbulence permet de renforcer les processus de combustion dans une flamme non-prémélangée. La longueur de flamme augmente quasi linéairement avec la vitesse d'injection du gaz pour une flamme de diffusion laminaire mais est quasiment constante pour une flamme de diffusion turbulente si la vitesse d'injection du gaz est suffisamment élevée,

la flamme est alors décrochée de la lèvre du brûleur (lifted-flame). Dans ce cas, les zones de recirculations contribuent à stabiliser la flamme. Lorsque ces zones de recirculation ne sont plus parfaitement accrochées à la lèvre du brûleur, un prémélange partiel de combustible et d'oxydant se produit devant la flamme. Il peut alors y avoir des flammes triples [49, 84, 50, 122, 85, 68], c'est-à-dire, à la fois des flammes de type prémélangé et non-prémélangé. Ainsi, dans les configurations non-prémélangées, plusieurs types de flammes peuvent être présentes. Les flammes "prémélangées" et "non-prémélangées" (ou de diffusion) ne sont finalement que des cas très particuliers qu'on ne rencontre que rarement en pratique. De nombreuses études cherchent à identifier d'un point de vue local, le type de flamme rencontrée (prémélangé ou non-prémélangé), voir par exemple l'index de flamme de Takeno [187, 118]. Un index permettant de distinguer la propagation de flamme de l'auto-inflammation a aussi été proposé récemment dans les travaux de Schulz et al. [160]. Nous préférons dans ce travail (chapitres 5 et 6) parler de configuration prémélangée ou non-prémélangée et chercher à identifier localement le type de mécanismes physiques le plus important : mélange, propagation, auto-inflammation.

Dans le cas d'une flamme turbulente partiellement prémélangée, la turbulence renforce le mélange à grande échelle des gaz injectés et la diffusion moléculaire sert à mélanger aux petites échelles. Le mélange entre les gaz frais et les gaz brûlés et aussi celui entre le combustible et l'oxydant doivent être considérés en même temps. Ainsi, une PDF jointe de deux variables : la fraction de mélange et l'avancement $P(c, \xi)$ est au minimum nécessaire pour décrire l'état du mélange dans ces cas partiellement prémélangés.

3.3 Réacteurs idéaux

La structure spatiale des flammes décrites dans les chapitres précédents est une conséquence du mécanisme de mélange turbulent ou de diffusion moléculaire entre les gaz frais et les gaz brûlés (prémélange) ou entre le combustible et l'oxydant (non-prémélangé). Nous présentons maintenant les réacteurs idéaux où le mécanisme de mélange est tel qu'aucune structure réactive définie spatialement est identifiée et les mécanismes de diffusion négligeables. Dans ce cas, il s'agit d'étudier l'auto-inflammation du mélange. Deux types de réacteurs idéaux peuvent être utilisés pour étudier ce mécanisme : les réacteurs

parfaitement agités fermés (batch reactor) ou les réacteurs ouverts [94].

3.3.1 Réacteur parfaitement agité fermé (batch reactor)

L'auto-inflammation est une combustion spontanée qui se déclenche lorsque les niveaux de pression et de température du mélange sont suffisamment élevés, voir la description détaillée du phénomène introduite par Mastorakos [108]. Ce mécanisme est une conséquence directe des lois d'Arrhénius qui décrivent les interactions permanentes qu'il existe entre les molécules. Ce phénomène est donc directement relié à la cinétique chimique et à l'état (composition et température) du mélange. Le réacteur parfaitement agité fermé et à pression constante permet de simplifier les équations pour obtenir un problème qui ne dépend que du temps. Un mélange initial dans un état (Y_j, T, p) donné où Y_j est la fraction massique de l'espèce j , T est la température du mélange, et p est la pression. Les équations de conservation des espèces $j : Y_j$ et d'énergie : $E = \int_{T_0}^T c_p dT - \frac{p}{\rho}$ avec c_p la capacité thermique isobare, ρ la masse volumique du mélange et p la pression du mélange s'écrivent alors :

$$\frac{\partial \rho Y_j}{\partial t} = \omega_j \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = - \sum_{j=1}^N \Delta h_{f,j}^\circ \omega_j + Q \quad (3.11)$$

où ω_j est le taux de production (ou la consommation) de l'espèce j , $\Delta h_{f,j}^\circ$ est l'enthalpie standard de formation de l'espèce j et Q représente l'échange de chaleur avec l'extérieur. Comme les taux de production chimique sont des lois d'Arrhénius [185], il faut atteindre des températures suffisamment élevées pour que le mélange s'auto-allume rapidement. On cherche donc dans ces réacteurs à caractériser le mélange initial par le temps nécessaire pour qu'il s'auto-allume : c'est le délai d'auto-allumage. Un exemple de profil du délai d'auto-allumage en fonction de la température des gaz frais (T_u) pour un mélange CH_4/Air stœchiométrique est présenté sur les figures 3.9 et 3.10.

La variation temporelle de la température pour différentes valeurs de la température des gaz frais est présentée sur la figure 3.11. On constate qu'une légère augmentation de température initiale peut diminuer fortement le temps nécessaire pour brûler le mélange.

Différentes définitions du délai d'auto-allumage noté τ_i peuvent être utilisées, comme le

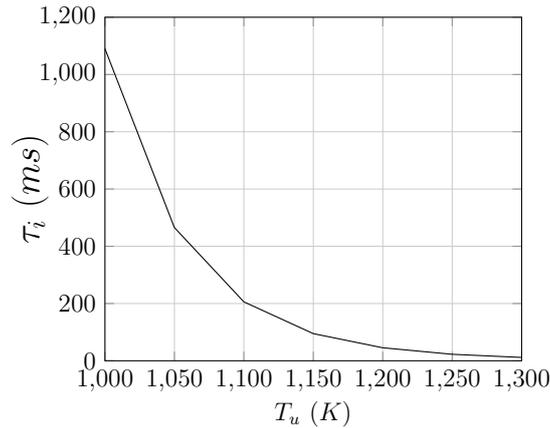


FIGURE 3.9 – Exemple d'un profil τ_i en fonction de la température des gaz frais T_u pour un mélange de CH_4/Air stœchiométrique.

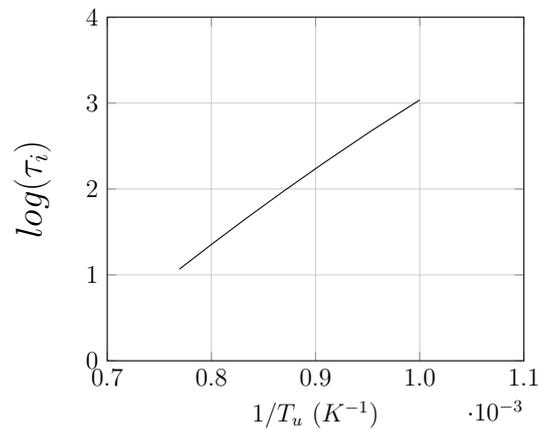


FIGURE 3.10 – Exemple d'un profil τ_i en fonction de la température des gaz frais T_u pour un mélange de CH_4/Air stœchiométrique en échelle logarithmique.

temps correspondant à la dérivée temporelle maximale d'une espèce ou de la température. On peut aussi utiliser le temps correspondant à une valeur particulière : 95% de valeur maximale de température, etc.. La définition choisie dans ce manuscrit est présentée sur la figure 3.12. Ce délai d'auto-allumage est défini comme le moment correspondant à la dérivée temporelle maximale du taux d'avancement c . C'est ce comportement très non-linéaire qu'il est difficile de prendre en compte dans un cas turbulent et qui va faire l'objet des développements les plus importants de ce travail.

De la même manière une variation de composition modifie le délai d'auto-allumage et,

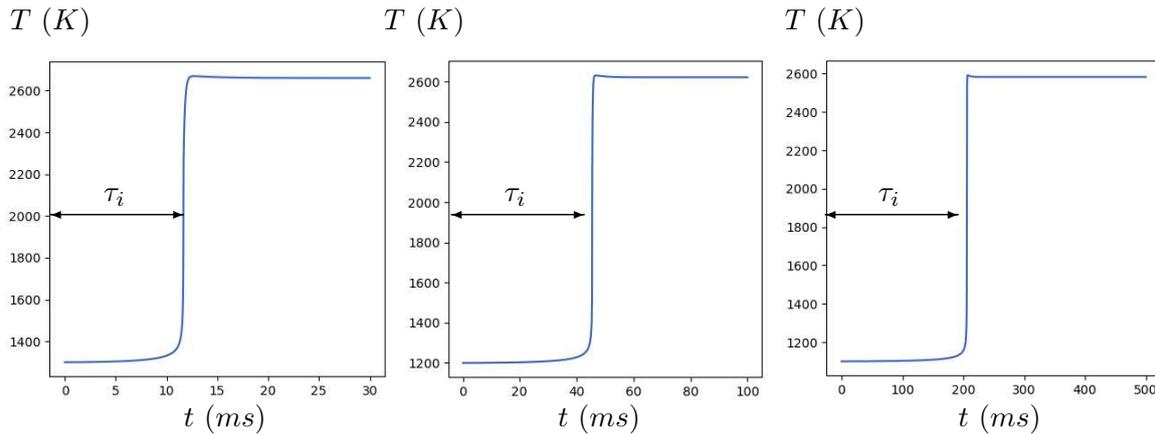


FIGURE 3.11 – Variation temporelle de la température d’un mélange stœchiométrique de CH_4/Air pour différentes valeurs de température des gaz frais T_u ($T_u = 1300K$, $T_u = 1200K$, $T_u = 1100K$).

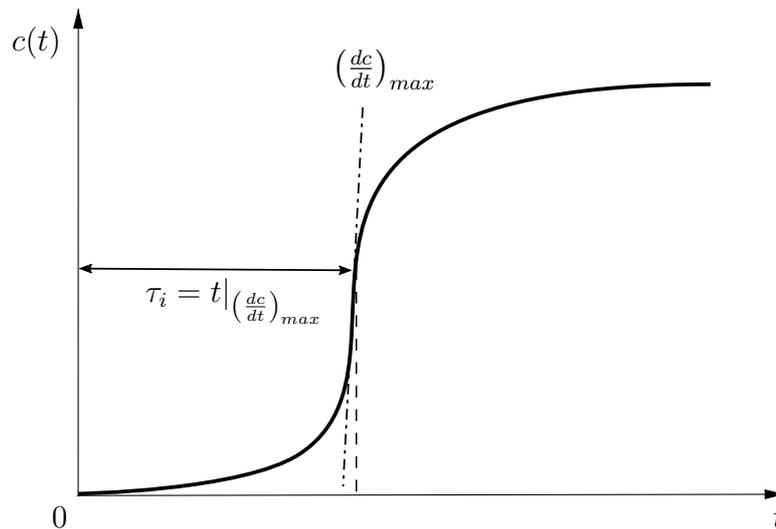


FIGURE 3.12 – Schéma d’une évolution temporelle du taux d’avancement

à température initiale identique, le minimum de délai est obtenu dans les zones où la turbulence a permis d’obtenir un mélange suffisamment homogène, zones de faible dissipation scalaire, mais pas forcément à la stœchiométrie [107]. Dans un cas plus complexe, comme par exemple celui qui sera étudié au chapitre 9 où le mélange entre un combustible et un oxydant chaud conduit à la fois à des variations de température et de composition, alors le délai d’auto-allumage le plus court n’est pas nécessairement obtenu à la stœchiométrie mais pour une valeur de la fraction de mélange notée ξ_{MR} (“Most Reactive Mixture”). La figure 3.13 montre l’inverse du délai d’auto-allumage en fonction de la fraction de mélange pour les gaz utilisés dans la configuration de Cabra. On constate que ξ_{MR} est très inférieur

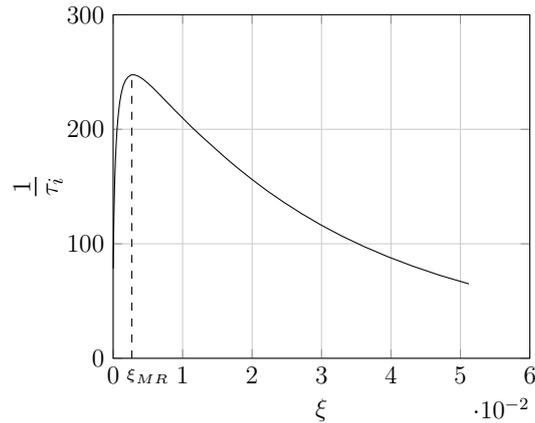


FIGURE 3.13 – Exemple d'un profil $1/\tau_i$ en fonction de la fraction de mélange ξ pour la configuration de Cabra CH_4/Air (sera présentée au chapitre 4).

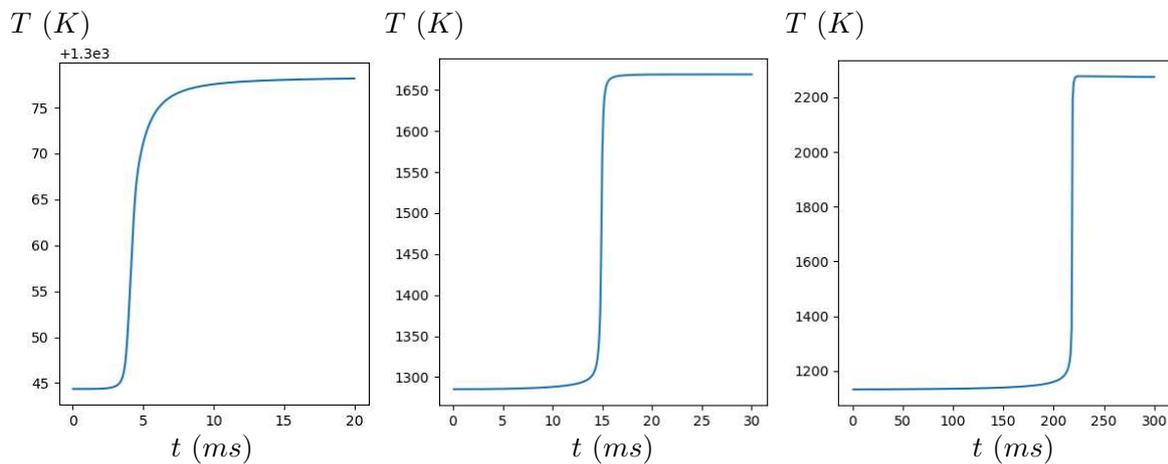


FIGURE 3.14 – Variation temporelle de la température d'une configuration de Cabra (CH_4/Air) pour différentes valeurs de fraction de mélange : $\xi = \xi_{MR}$ (gauche), $\xi = 0,05$ (milieu), $\xi = \xi_{st}$ (droite).

à ξ_{st} : $\xi_{MR} = 0,00425$, $\xi_{st} = 0,177$.

3.3.2 Réacteur ouvert (PSR et PFR)

Les réacteurs ouverts comme le PSR (Perfectly Stirred Reactor) ou le PFR (Plug Flow Reactor) permettent également d'étudier l'auto-inflammation d'un mélange. Ces réacteurs qui fonctionnent en continu peuvent être schématiquement représentés par un volume dans lequel un flux constant prémélangé de combustible/oxydant est injecté et un flux constant de produits partiellement brûlés sort, voir figure 3.15. En condition idéale, le

réacteur PSR est homogène et stationnaire et le PFR est homogène dans deux directions et stationnaire. Les mécanismes de diffusion d'espèces et de chaleur sont négligés. Ce type de réacteur permet d'étudier la compétition entre la cinétique chimique et la convection (entrée/sortie). L'écoulement au sein de la chambre est fortement turbulent pour atteindre l'homogénéité de composition et de température à l'intérieur du réacteur. Ces réacteurs peuvent donc aussi être utilisés pour déterminer les délais d'auto-allumage.

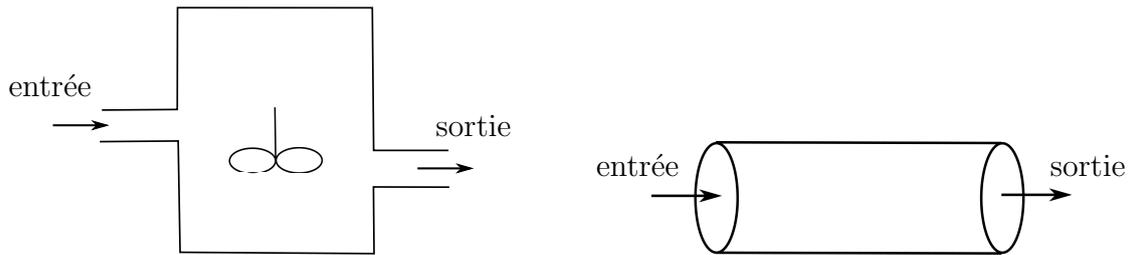


FIGURE 3.15 – Schémas représentatifs des réacteurs PSR (gauche) et PFR (droite)

Dans ces réacteurs ouverts, le temps caractéristique introduit est le temps de résidence τ_r , appelé aussi le temps de séjour. C'est le temps moyen nécessaire à une particule fluide pour traverser le réacteur. Il faut donc que ce temps de résidence soit suffisamment long pour que les gaz aient le temps de brûler. Si le délai d'auto-allumage est connu, alors une comparaison directe entre le temps résidence et délai d'auto-allumage est suffisant pour savoir si les gaz sont frais ou brûlés en sortie de réacteur.

3.3.3 Cas général

Dans un réacteur réel, l'homogénéité parfaite est impossible à réaliser. Il y aura donc à l'intérieur du réacteur, une distribution de température, de composition mais aussi de temps de résidence. Différentes approches sont envisageables pour appliquer ce concept aux écoulements turbulents réactifs, par exemple le modèle PaSR "Partially Stirred Reactor" [42, 43, 35] ou les réseaux de réacteurs [59, 60]. Dans ce cas, les processus de diffusion moléculaire ne peuvent plus être négligés mais ne sont pas suffisamment importants pour pouvoir décrire une structure spatiale comme celle des "flames". Le concept de temps de résidence a également été étendu aux écoulements quelconques en introduisant une équation de transport de la quantité de temps de résidence, voir Ghirelli et Leckner [65] dont l'étude est basée sur les travaux de Sandberg [157, 158] appliqués à un écoulement

complexe laminaire ou turbulent. Cette quantité de temps de résidence est définie comme le produit du temps de résidence d'une particule infinitésimale et de sa masse dm :

$$d\theta = \tau_r dm \quad (3.12)$$

D'un point de vue lagrangien, ce temps de résidence est considéré comme l'âge de la particule fluide. Dans le cadre de ce travail, cette équation est utilisée pour prévoir le moment et l'endroit où l'auto-allumage se produit. Toutefois, la comparaison directe entre le délai d'auto-allumage τ_i calculé par un réacteur (batch ou PSR) et le temps de résidence d'une particule τ_r est valable seulement si l'écoulement est identique ou au moins similaire à celui du réacteur considéré pour calculer τ_i . Ce qui est impossible à obtenir pour un écoulement quelconque. Ainsi, le résultat de cette comparaison dépend fortement des conditions initiales et limites utilisées pour le temps de résidence. Le modèle présenté au chapitre 6 permettra d'éviter cette difficulté.

En pratique, dans les écoulements turbulents, les conditions locales de pression, température et composition qui conduisent à l'auto-inflammation varient dans l'espace et le temps sous l'effet du mélange turbulent et de la diffusion des espèces ou des conditions limites (pertes thermiques, compression, etc.). Il est donc nécessaire de tenir compte de l'histoire de la particule fluide (au sens de la composition et de la température) pour pouvoir comparer son temps de résidence au délai d'auto-allumage. Une nouvelle variable sera introduite au sixième chapitre pour tenir compte de ces variations d'état du mélange.

3.4 Les modèles existants

Rappelons que la difficulté principale pour simuler numériquement un écoulement réactif turbulent est de proposer un modèle pour le terme source chimique moyen (équation (1.33)). En effet, pour pouvoir utiliser des lois d'Arrhénius, il faut soit que le nombre de Damköhler soit très inférieur à l'unité (régime des flammes épaissies) par exemple dans des écoulements réactifs supersoniques, soit que le maillage soit compatible avec ces lois (DNS). Il existe tout de même un modèle qui permet de continuer à utiliser des lois d'Arrhénius dans des régimes de combustion différents [40]. Ce modèle consiste à épaissir artificiellement les structures de flammes en augmentant les coefficients de

diffusion moléculaire de façon à ce que ces structures soient compatibles avec le maillage. L'avantage de ce modèle est de pouvoir utiliser des descriptions détaillées ou réduite de la cinétique chimique. En revanche, la cinétique doit aussi être adaptée pour respecter certaines caractéristiques essentielles des flammes, comme leur vitesse de propagation, mais leur structure interne est donc complètement modifiée.

Bien que la modélisation des flux turbulents est également cruciale dans les écoulements à masse volumique variable [10, 8, 15], le concept de diffusion turbulente associé à un modèle $k - \epsilon$ sera considéré dans ce travail. Les modèles décrits ci-dessous correspondent à des cas où le nombre de Damköhler est grand et pour une approche de type RANS. Toutefois, le modèle pour le terme source chimique moyen pour être utilisable en pratique doit être capable de tenir compte des différents régimes de combustion et des différents types de flammes : prémélange ou diffusion, épaissies ou flammelettes, auto-inflammation présentes au sein d'un même écoulement. Pourtant, la plupart des modèles existants ont été développés pour être adaptés à un type de flamme et un régime de combustion spécifique. Les modèles peuvent être classés selon quatre approches différentes (certains en utilisant plusieurs), voir la référence [177] :

- Les modèles basés sur le mélange : le taux de réaction chimique est proportionnel au taux de dissipation de la variance d'une variable réactive, par exemple EBU, BML, EDC, MIL, etc..
- Les modèles basés sur la topologie : le front de flamme est plissé par la turbulence, ce qui augmente ensuite la surface de la flamme et élargit les zones de réactions. Le taux de réaction est alors proportionnel à la surface de la flamme, par exemple le modèle de G-équation et le modèle de la densité de surface (FSD).
- Les méthodes basées sur les PDF : la moyenne du taux de réaction chimique est calculé par une approche statistique
- Les approches CMC (Conditional Moment Closure) : le taux de réaction est une fonction de la température moyenne et des fractions massiques moyennes conditionnées par une variable. Cette variable est le taux d'avancement c dans les flammes de prémélange, ou la fraction de mélange ξ pour les flammes non-prémélangées.

De plus, la plupart de ces modèles utilise des bases de données qui contiennent les pro-

propriétés chimiques des mélanges et des structures considérées. Ces tables nécessitent d'être construites par des calculs préliminaires spécifiques à chaque écoulement étudié.

3.4.1 Principe des méthodes de tabulation

Pour construire les tables de propriétés chimiques, différentes méthodes existent. Les méthodes ILDM (Intrinsic Low Dimensional Manifold) [99, 100, 66] qui consistent à analyser les structures caractéristiques des Jacobiennes des termes sources chimiques locaux pour identifier les processus chimiques lents. Ainsi, les trajectoires 1D dans l'espace des compositions obtenues permettent de choisir les variables qui vont permettre de décrire l'évolution de toutes les autres. Les méthodes FPI (Flame Prolongation of ILDM) [67, 61, 148, 178, 117] et FGM (Flame-Generated Manifold) [172, 29] consistent quant à elles à supposer l'existence de structures de flammes aux petites échelles de l'écoulement. Ces méthodes ont l'avantage d'être plus simples et cohérentes avec les descriptions physiques qui ont conduit aux régimes des flammelettes. Ainsi, les solutions obtenues dans des configurations très simplifiées comme par exemple des flammes laminaires planes stationnaires, sont stockées dans des tables pour être ensuite utilisées dans des simulations d'écoulements plus complexes. Ces calculs peuvent utiliser des schémas cinétiques détaillés et des propriétés de transport complexe ($Le \neq 1$). Les variables utilisées pour réaliser la correspondance entre les solutions tabulées et les solutions locales de l'écoulement complexe considéré sont les variables spécifiques de la combustion comme par exemple la fraction de mélange et le taux d'avancement. Ces tables peuvent aussi contenir des quantités intégrées et les variables utilisées pour réaliser la correspondance sont alors des quantités moyennes et des variances (quantités filtrées en LES). Dans ce cas, les méthodes sont associées à des PDF dont la forme est présumée. Lorsque des solutions détaillées des flammes laminaires de prémélange monodimensionnelles sont utilisées pour construire la table, alors les méthodes FPI et FGM sont identiques. La différence entre ces deux méthodes est la façon de créer la table. Les données tabulées sont basées sur la fraction de mélange et le taux d'avancement pour la méthode FPI et sur l'enthalpie et le taux d'avancement pour la méthode FGM.

3.4.2 Modèles pour les flammes de prémélange

(1) Modèle EBU (Eddy Break-Up)

Ce modèle a été développé pour les écoulements turbulents ($Re \gg 1$) de prémélange où les réactions chimiques sont infiniment rapides par rapport aux phénomènes turbulents ($Da = \tau_T/\tau_c \gg 1$ et $K_a = \tau_c/\tau_\eta < 1$). Dans ce cas, la turbulence est suffisamment intense pour enrouler le front de flamme créant aussi des poches de gaz frais et de gaz brûlés ($u' > S_L$). La zone de réaction moyenne est alors considérée comme une collection de poches de gaz frais et de gaz brûlés séparées par des interfaces minces où les réactions chimiques se produisent. C'est le régime des flammelettes plissées avec des poches. Ainsi, le taux de réaction chimique moyen est principalement contrôlé par le temps caractéristique de la turbulence τ_T . Ce temps caractéristique de la turbulence est estimé à partir de l'énergie cinétique turbulente k et du taux de dissipation ϵ comme : $\tau_T = k/\epsilon$.

Supposons maintenant que : (i) l'écoulement est à faible nombre de Mach ($Ma \ll 1$), (ii) la combustion est adiabatique, (iii) la combustion est à pression constante et (iv) la valeur du c_p (capacité calorifique à pression constante) est supposée constante et le nombre de Lewis égale à l'unité pour toutes les espèces. Dans ces conditions une seule variable, le taux d'avancement c , permet de décrire l'état thermochimique local. La variable d'avancement est donc nulle dans les gaz frais et égale à l'unité dans les gaz brûlés. Les équations bilans du taux d'avancement et de la température sont donc similaires.

Les travaux de Spalding [167] et Lockwood [97], ont permis d'exprimer le taux de réaction chimique moyen de Favre de la façon suivante :

$$\bar{\omega}_c = C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \quad (3.13)$$

où C_{EBU} est une constante du modèle. Cette expression a été démontrée théoriquement par Bray et Moss [23] en 1977. Une interprétation physique de la constante de modélisation C_{EBU} est ainsi donnée. Ce modèle EBU est très utilisé dans les codes de calculs puisqu'il ne nécessite pas d'équation de transport supplémentaire et ne dépend pas des caractéristiques chimiques de l'écoulement.

(2) Modèle BML (Bray-Moss-Libby)

Le modèle de BML a été construit initialement sur la base des travaux de Bray et

Moss qui ont permis en 1977 [23] de démontrer le sens physique de combustion EBU. Ce modèle a ensuite été développé par Bray, Moss et Libby, puis par Bray, Champion et Libby, voir [24] pour plus de détails.

Ce modèle est basé sur l'hypothèse des flammes minces (bimodalité de la PDF), il s'applique donc dans le domaine des grands nombres de Reynolds et de Damköhler, ce qui correspond au régime des « flammes plissées ». L'idée est de présumer la forme de la PDF du taux d'avancement c au point et au temps donnée (x, t) comme une somme des contributions de gaz frais, de gaz brûlés et de gaz en train de brûler :

$$\tilde{P}(c; x, t) = \underbrace{\alpha(x, t)\delta(c)}_{\text{gaz frais}} + \underbrace{\beta(x, t)\delta(1-c)}_{\text{gaz brûlés}} + \underbrace{\gamma(x, t)\tilde{f}(c; x, t)}_{\text{gaz en cours de réaction}} \quad (3.14)$$

Pour des raisons de simplicité, une PDF de Favre est utilisée, voir figure 3.16. α , β et γ sont respectivement les probabilités de trouver des gaz frais, des gaz brûlés et des gaz en train de brûler. $\delta(c)$ et $\delta(1-c)$ sont respectivement les distributions de Dirac correspondant aux gaz frais ($c = 0$) et aux gaz brûlés ($c = 1$). La normalisation de la PDF nous fournit :

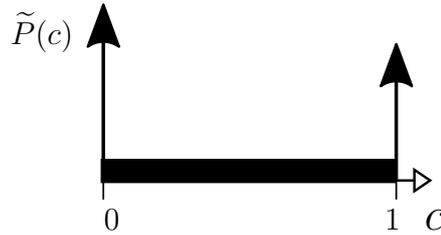


FIGURE 3.16 – Schéma représentatif d'une PDF pour le modèle BML

$$\alpha + \beta + \gamma = 1 \quad (3.15)$$

Le taux de réaction chimique au point x et au temps t s'écrit alors :

$$\bar{\omega}_c(x, t) = \bar{\rho} \gamma(x, t) \int_0^1 \frac{\omega(c)}{\rho} \tilde{f}(c; x, t) dc \quad (3.16)$$

L'objectif maintenant est de calculer les paramètres inconnus de la PDF : α , β , γ et la fonction f .

Dans l'hypothèse des grands nombres de Damköhler, la flammelette est très mince et la probabilité de trouver un point dans ces flammelettes est très faible ($\gamma \sim \mathcal{O}(1/Da)$). La PDF du taux d'avancement est alors quasi bimodale ($\gamma \ll \alpha$ et $\gamma \ll \beta$). Dans ce cas, la PDF au point x et au temps t s'écrit :

$$\tilde{P}(c; x, t) = \alpha(x, t)\delta(c) + \beta(x, t)\delta(1-c) + \mathcal{O}(1/Da) \quad (3.17)$$

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

$$\tilde{c} = \int_0^1 c \tilde{P}(c; x, t) dc = \beta \quad \text{et} \quad \alpha = 1 - \beta = 1 - \tilde{c} \quad (3.18)$$

La forme de PDF est donc définie par la valeur de \tilde{c} . La densité moyenne est donc calculée :

$$\left(\frac{1}{\rho}\right) = \int_0^1 \frac{1}{\rho} \tilde{P}(c) dc = \alpha \frac{1}{\rho_u} + \beta \frac{1}{\rho_b} = (1 - \tilde{c}) \frac{1}{\rho_u} + \tilde{c} \frac{1}{\rho_b} \quad (3.19)$$

avec ρ_u et ρ_b la densité des gaz frais et des gaz brûlés respectivement. De la même manière, la variance du taux d'avancement s'écrit :

$$\tilde{c}''^2 = \alpha \tilde{c}^2 + \beta (1 - \tilde{c})^2 = \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \quad (3.20)$$

Elle correspond bien à sa valeur maximale possible : la PDF est bimodale. Le modèle BML utilise une PDF présumée (voir l'équation (3.14)), mais on constate que le taux de réaction chimique moyen Eq. (3.16) ne peut pas être calculé puisque $\gamma \rightarrow 0$. Cependant, on peut démontrer que dans ce cas limite, le terme source moyen est proportionnel au taux de dissipation scalaire. En écrivant une équation de transport pour la variance maximale $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ et en utilisant la propriété de bimodalité qui conduit à $c(1 - c) = 0$, nous obtenons :

$$-2\rho D \frac{\partial c''}{\partial x_k} \frac{\partial c''}{\partial x_k} = \bar{\omega}_c - 2\bar{c}\bar{\omega}_c \quad (3.21)$$

En posant $\bar{\rho}\epsilon_c = 2\rho D(\partial c''/\partial x_k)^2$ et $c_m = \bar{c}\bar{\omega}_c/\bar{\omega}_c$, le terme source moyen s'exprime alors de la façon suivante :

$$\bar{\omega}_c = \frac{\bar{\rho}\epsilon_c}{(2c_m - 1)} \quad (3.22)$$

où le paramètre c_m est défini par la structure locale de la flamme. La dissipation peut être résolue par un modèle algébrique de relaxation linéaire : $\bar{\rho}\epsilon_c = \overline{\rho c''^2}/(R_c\tau_T)$ avec R_c une constante. Nous en déduisons alors :

$$\bar{\omega}_c = \frac{1}{(2c_m - 1)} \frac{\overline{\rho c''^2}}{R_c\tau_T} = \frac{1}{(2c_m - 1)} \bar{\rho} \frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}{R_c\tau_T} \quad (3.23)$$

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

$$C_{EBU} = \frac{1}{R_c(2c_m - 1)} \quad (3.24)$$

(3) Modèle BCL (Bray-Champion-Libby)

La PDF du taux d'avancement c ou de la température T n'est plus quasi bimodale quand les réactions chimiques ne sont plus infiniment rapides par rapport aux phénomènes turbulents, voir la figure 3.17. La variance du taux d'avancement, notée $\widetilde{c''^2}$ est inférieure

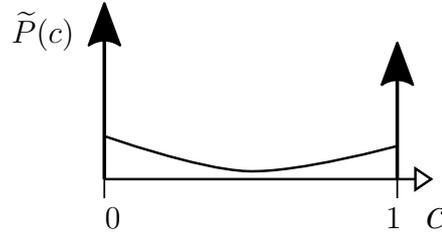


FIGURE 3.17 – Schéma représentatif d'une PDF pour le modèle BCL

à sa valeur maximale $\widetilde{c}(1 - \widetilde{c})$. Des PDF dont la forme est présumée peuvent alors être utilisées [9, 13, 22]. Si cette forme ne dépend que de trois paramètres, les moments (premier et deuxième ordre) du taux d'avancement c : \widetilde{c} et $\widetilde{c''^2}$ et la condition de normalisation de la PDF permettent de la déterminer [9, 21]. La PDF présumée la plus utilisée est la distribution β pour le taux d'avancement c .

Le modèle BCL est une généralisation de la forme de la PDF introduite dans les travaux de Bray et al. [26]. La PDF est alors constituée de deux distributions de Dirac $\delta(c)$ et $\delta(1 - c)$ respectivement pour des gaz frais, des gaz brûlés et aussi une fonction continue entre ces deux états limites. Dans ce cas, la forme de la PDF dépend aussi de trois paramètres α , β et γ . En conservant la même notation que dans le paragraphe précédent, la fonction $\widetilde{f}(c)$ représentant la probabilité des états internes de la flamme est définie de la manière suivante [177] :

$$\widetilde{f}(c) = \frac{1}{\delta_L} \left(\frac{dc}{dx} \right)_f^{-1} \quad (3.25)$$

où δ_L est l'épaisseur de la flamme et $(dc/dx)_f$ décrit la structure interne de la flamme laminaire. Le taux d'avancement moyen \widetilde{c} et sa variance $\widetilde{c''^2}$ sont calculés de la façon suivante :

$$\widetilde{c} = \beta + \gamma I_1 \quad (3.26)$$

$$\widetilde{c''^2} = \beta + \gamma I_2 - \widetilde{c}^2 \quad (3.27)$$

où I_1 et I_2 sont définis comme :

$$I_1 = \int_{0^+}^{1^-} c \tilde{f}(c) dc \quad (3.28)$$

$$I_2 = \int_{0^+}^{1^-} c^2 \tilde{f}(c) dc \quad (3.29)$$

avec 0^+ et 1^- les limites d'intégration tendant respectivement vers 0 et 1.

Le taux de ségrégation S est défini comme :

$$S = \frac{\tilde{c}^{\prime 2}}{\tilde{c}(1 - \tilde{c})} \quad (3.30)$$

En combinant l'équation (3.26), (3.27) et (3.30), nous pouvons alors en déduire l'expression de γ comme :

$$\gamma = (1 - S) \frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}{I_1 - I_2} \quad (3.31)$$

Ainsi, le taux de réaction chimique moyen présenté par l'équation (3.16) se ré-écrit :

$$\bar{\omega}_c = \bar{\rho}(1 - S) \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \frac{I_\omega}{I_1 - I_2} \quad (3.32)$$

avec $I_\omega = \int_{0^+}^{1^-} \frac{\omega(c)}{\rho} \tilde{f}(c) dc$ le taux de réaction chimique moyen interne de la flammelette obtenu par des calculs préliminaires de flamme laminaire. Cette expression est très proche des modèles EBU et BML puisqu'elle est proportionnelle au terme $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ mais fait intervenir les propriétés des structures de flammelettes via les termes I_ω , I_1 , I_2 et l'écart à la variance maximale $(1 - S)$ qui est soit un paramètre de modélisation soit obtenu en utilisant une équation supplémentaire pour la variance du scalaire.

(4) Modèle à une équation de transport

L'expression du taux de réaction chimique moyen peut être écrit de la façon à faire apparaître la dissipation scalaire, la densité de surface de flamme ou la variance du scalaire. Puis des équations de transport supplémentaires peuvent être résolues pour ces quantités.

L'équation de transport pour le taux de dissipation d'un scalaire a été proposée par Mantel et Borghi [105] puis modifiée par Mura et Borghi [123] dans le cas où les réactions chimiques sont très rapides et la masse volumique constante. Une équation de transport qui permet de tenir compte des effets de variation de la masse volumique a ensuite été proposée dans les travaux de Mura et al. [127].

Le modèle à une équation de transport qui est probablement le plus utilisé est le modèle basé sur la densité de surface de flamme (FDS) : la flamme turbulente est considérée comme une surface dont la structure est celle d'une flamme laminaire plissée et étirée. Le taux d'avancement moyen s'écrit de la façon suivante :

$$\bar{\omega} = \Omega_s \Sigma_f \quad (3.33)$$

avec Σ_f la densité de surface de flamme et Ω_s le terme source moyen par unité de surface. Dans une combustion prémélangée, cette densité de surface de flamme d'une iso-surface c^* est estimée par le gradient conditionnel du taux d'avancement [145] :

$$\Sigma_f(c^*) = \overline{|\nabla c| \delta(c - c^*)} \quad (3.34)$$

La densité de la surface de flamme peut être déterminée soit par des relations algébriques [73] soit par une équation de transport [174]. Il existe une grande diversité de fermetures pour les termes sources et de destruction liés aux effets d'étirement et de courbure [33, 32, 110, 36, 37].

(5) Modèle de G-équation

Les flammes de prémélange turbulentes ont aussi été décrites par une approche de courbes de niveaux (level-set) introduite initialement par Williams [185]. Ce travail a conduit à l'équation G, où $G(\mathbf{x}, t)$ est une fonction "level-set". G est donc un champ scalaire. Les iso-valeurs G_0 correspondent à la surface de flamme qui sépare les gaz frais et les gaz brûlés. Ce champ scalaire est souvent défini comme la distance au front de flamme. En considérant $G_0 = 0$ nous avons $G < 0$ dans les gaz frais et $G > 0$ dans les gaz brûlés, et le front de la flamme est défini par : $G(\mathbf{x}, t) = 0$. Ainsi, l'équation de transport de G s'écrit :

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla G = S_F \|\nabla G\| \quad (3.35)$$

où S_F est la vitesse de propagation de la flamme et u est la vitesse des gaz. Cette G-équation a été améliorée pour tenir compte de la courbure de la flamme [142] ou des effets de prémélange partiel [185] et a aussi été utilisée dans des simulations de type RANS [138] et LES [141]. L'avantage principal de cette méthode est de découpler les effets de l'écoulement des effets des réactions chimiques sur l'interface. Ainsi, les lois

d'Arrhénius des réactions chimiques sont calculées préliminairement pour déterminer la vitesse de propagation de la flamme laminaire S_L qui est un des paramètres impliqués dans S_F .

3.4.3 Modèles de combustion non-prémélangée

(1) Modèle EDC (Eddy Dissipation Concept)

Le modèle EDC est une extension directe du modèle EBU pour une flamme non-prémélangée [180, 101, 102, 56, 103]. Ce modèle est basé sur le temps caractéristique de la dissipation des tourbillons $\tau_T = \frac{k}{\epsilon}$. Le taux de réaction du combustible est limité par les fractions massiques moyennes du combustible \tilde{Y}_F , de l'oxydant \tilde{Y}_O et des produits \tilde{Y}_P :

$$\bar{\omega}_F = \bar{\rho} \frac{\alpha}{\tau_T} \min \left(\tilde{Y}_F, \frac{\tilde{Y}_O}{s}, \beta \frac{\tilde{Y}_P}{1+s} \right) \quad (3.36)$$

où s est le coefficient stœchiométrique massique, α et β sont des constantes ajustables. En considérant l'apport de l'énergie des gaz brûlés aux gaz frais pour allumer, la fraction massique des produits \tilde{Y}_P peut être la grandeur limitante.

(2) Modèles basés sur l'évolution dans l'espace des compositions

Des modèles plus élaborés que le modèle EDC faisant également intervenir le temps caractéristique de mélange ont également été proposés. En particulier les modèles basés des réacteurs partiellement mélangés (PaSR) comme par exemple les modèles PaSR et U-PaSR (Unsteady PaSR) [121] s'appuient sur des réacteurs parfaitement mélangés appliqués à une proportion réduite du volume qui est définie à partir de l'évolution de la fraction volumique des zones dissipatives où les transformations chimiques ont lieu. Des modèles de réacteurs partiellement mélangés sont aussi utilisables dans le cadre des PDF transportés [147, 124] où la distribution de fraction de mélange est déterminée de manière précise dans tout l'écoulement. Des modèles moins coûteux en temps de calcul s'appuient sur des formes présumées de PDF qui sont basés sur une représentation Lagrangienne de l'évolution des particules dans l'espace des compositions. Par exemple le modèle MIL (Modèle Intermittent Lagrangien) [12, 13, 126] utilise deux variables : la fraction de mélange ξ et la fraction massique d'une espèce réactive Y . Dans le cas où la chimie est infiniment rapide [131], les particules fluides ont besoin d'un temps fini pour se mélanger

puis l'état d'équilibre chimique est atteint instantanément. Une relation entre ces deux variables Y et ξ doit donc être proposée : $Y = Y^{MIL}(\xi)$. Un schéma représentatif de la trajectoire des particules fluides dans l'espace des compositions est présenté sur la figure 3.18. En utilisant le modèle IEM (Interaction by Exchange with the Mean) qui représente la relaxation vers l'état moyen, voir les travaux de Villermaux et Devillon [179] et de Dopazo et O'Brien [54], l'évolution de la composition d'une particule fluide s'écrit à partir des équations suivantes :

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{\tilde{\xi} - \xi}{\tau_\xi} \quad (3.37)$$

$$\frac{dY}{dt} = \frac{\tilde{Y} - Y}{\tau_Y} + \omega_Y \quad (3.38)$$

où ω_Y est le taux de réaction chimique de cette espèce, τ_ξ et τ_Y sont respectivement les temps caractéristiques du mélange de la fraction de mélange et de la fraction massique de cet espèce.

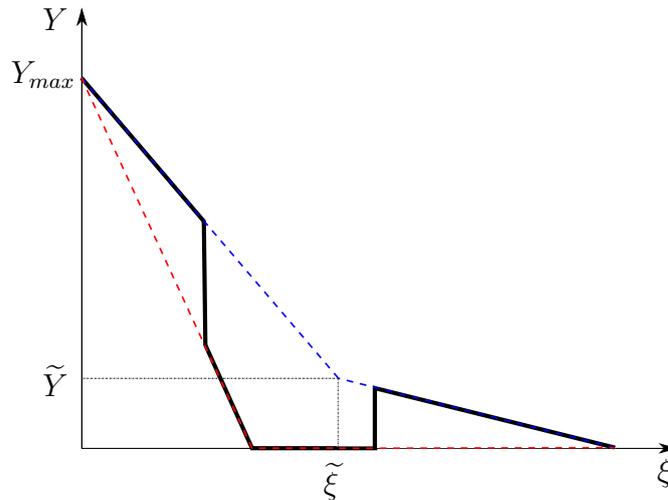


FIGURE 3.18 – Schéma représentatif des trajectoires des particules fluides dans l'espace des compositions. Droite IEM (bleue pointillée), droite d'équilibre (rouge pointillée), trajectoire MIL (noire continue).

Le taux de réaction chimique local s'écrit alors :

$$\omega_Y(\xi, Y) = \frac{dY}{d\xi} \frac{\tilde{\xi} - \xi}{\tau_\xi} - \frac{\tilde{Y} - Y}{\tau_Y} \quad (3.39)$$

En supposant l'égalité des temps caractéristiques de ces deux variables ($\tau_Y = \tau_\xi$), nous

pouvons simplifier l'équation (3.39) de la manière suivante grâce à la relation $Y^{MIL}(\xi)$:

$$\omega_Y^{MIL}(\xi) = \frac{1}{\tau_\xi} \left[\frac{dY^{MIL}(\xi)}{d\xi} (\tilde{\xi} - \xi) - (\tilde{Y} - Y^{MIL}(\xi)) \right] \quad (3.40)$$

Finalement, une fois la trajectoire lagrangienne ($Y^{MIL}(\xi)$) connue, le taux de réaction chimique peut être déterminé.

(3) Méthode des « flammelettes » de diffusion

Cette méthode est issue d'une analogie avec les modèles de flammelettes de prémélange (flammes plissées avec des poches). Des structures de « flammelettes » de diffusion sont calculées préliminairement dans une configuration simple d'écoulement à contre courant (combustible et oxydant) : flamme laminaire plane stationnaire étirée pour différentes valeurs de taux d'étirement. Il est donc possible de tenir compte d'une cinétique chimique détaillée. Le taux de réactions chimique moyen, la température moyenne et les fractions massiques moyennes des espèces chimiques peuvent être déterminées si une forme de PDF est présumée : par exemple en considérant la distribution β , voir figure 3.19 :

$$\tilde{P}(\xi) = C\xi^m (1 - \xi)^n \quad (3.41)$$

avec C, m, n trois constantes à déterminer. La constante C est déterminée par la condition de normalisation de la PDF. Les constantes m et n sont calculées en fonction de la fraction de mélange moyenne $\tilde{\xi}$ et sa variance et \tilde{V}_ξ . Nous pouvons alors en déduire ces trois constantes :

$$C = \frac{\Gamma(m+n)}{\Gamma(m)\Gamma(n)} \quad (3.42)$$

$$m = \tilde{\xi} \left[\frac{\tilde{\xi}(1-\tilde{\xi})}{\tilde{V}_\xi} - 1 \right] \quad (3.43)$$

$$n = (1-\tilde{\xi}) \left[\frac{\tilde{\xi}(1-\tilde{\xi})}{\tilde{V}_\xi} - 1 \right] \quad (3.44)$$

avec Γ la fonction *Gamma* comme :

$$\Gamma(m) = \int_0^\infty z^{m-1} e^{-z} dz \quad (3.45)$$

Ainsi, une librairie de flammelettes de diffusion laminaires est créée [95, 96, 135, 136]. La flamme turbulente non-prémélangée est donc considérée comme un ensemble de flammelettes de diffusion fines dont l'étirement peut varier mais dont la structure interne est

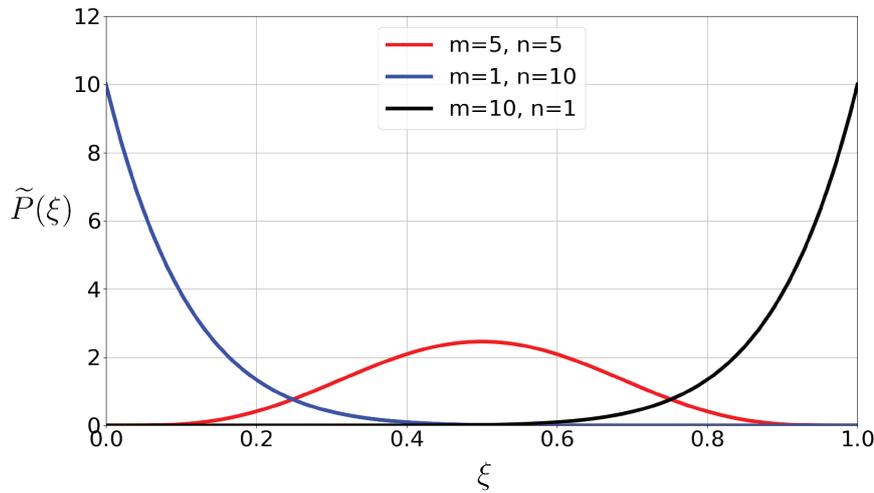


FIGURE 3.19 – Allures de la PDF β pour différentes valeurs des constantes m et n calculées à partir de $\tilde{\xi}$ et \tilde{V}_{ξ}

laminaire [34, 184, 8, 90]. L'étirement local peut être relié au taux de dissipation scalaire conditionné à la surface stœchiométrique. Ainsi, le problème de modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée est divisée en deux sous problèmes : (1) la modélisation du mélange turbulent, (2) la relation entre la structure laminaire de la flammelette et le taux de dissipation scalaire. Une PDF jointe entre la fraction de mélange et le taux de dissipation scalaire stœchiométrique est alors nécessaire pour déterminer les valeurs moyennes caractéristiques de l'état du mélange.

3.4.4 Modèles d'auto-inflammation

La forme de la loi d'Arrhénius permet, à elle seule, de prendre en compte le mécanisme d'auto-inflammation. Une équation unique pour décrire la réaction globale associée à cette loi est donc suffisante pour obtenir ce mécanisme. Toutefois, pour prévoir de manière suffisamment précise le délai d'auto-inflammation, un mécanisme détaillé décrivant l'évolution des radicaux est nécessaire. Parmi les modèles décrits précédemment, le modèle de flamme épaissies [40] permet donc de prendre en compte ce mécanisme. En revanche, cette précision va être dépendante de la manière dont le schéma cinétique est réduit. Les modèles basés sur des tabulations du terme source chimique [67, 61, 148, 178, 117], quelle que soit la structure considérée, permettent aussi de prendre en compte ce mécanisme si la forme de

la PDF présumée le permet. La précision de la méthode est alors dépendante de la manière dont la table de données est créée : quelle structure de flamme ? quel schéma cinétique ? Les paramètres de forme de la PDF ont aussi une importance capitale pour prendre en compte de manière précise ce type de mécanisme. Les modèles qui ne peuvent absolument pas dégénérer vers une forme de type Arrhénius comme EBU, BML, BCL, Σ , G, ne peuvent pas prendre en compte directement l'auto-inflammation. Seul le mécanisme de propagation est pris en compte dans ces modèles. Les modèles de flammes non-prémélangées qui font intervenir un temps de mélange (EDC, MIL) ne peuvent pas non plus prendre en compte directement l'auto-inflammation. Toutefois, Le modèle MIL a été étendu pour prendre en compte ce mécanisme dans des cas supersoniques [69]. Une équation pour le temps de résidence est utilisé dans ce cas. Les modèles basés sur des réacteurs chimiques partiellement mélangés PaSR (Partially Stirred Reactor) ont également été utilisés dans les configurations d'écoulements supersoniques [121, 5], et prennent naturellement en compte le mécanisme d'autoinflammation.

Le mécanisme d'auto-inflammation a aussi été très étudié dans la communauté de la détonique car c'est le temps caractéristique essentiel (appelé temps d'induction) définissant la structure d'une détonation. En particulier, le modèle IPM (Induction-Parameter-Model) est introduit en 1980 par Oran et al. [134] puis repris par Clifford et al. [71, 72]. Ce modèle est encore utilisé aujourd'hui, par exemple dans le travail de Schwer et al. [161]. L'idée de base de ce modèle est d'introduire une variable qui intègre le délai d'auto-allumage via l'utilisation de l'équation suivante :

$$\frac{\partial(\rho\tau)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\tau\mathbf{u}) = \frac{\rho}{t_{ind}} \quad (3.46)$$

avec t_{ind} le temps d'induction qui dépend de la température, la composition et la pression locale et qui est obtenu par des corrélations empiriques. Cette équation a aussi été utilisée pour modéliser l'auto-allumage dans le contexte HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) [140, 41]. Dans ce cas c'est une variable de progrès pour l'auto-inflammation qui est introduite. Enfin, plus récemment, les études sur la transition déflagration/détonation (DDT) [57, 75, 186, 80] utilisent le même concept qu'ils associent à un modèle de propagation de flamme. C'est une fonction de Heaviside qui permet de séparer les deux mécanismes.

3.5 Conclusions

J'ai présenté dans ce chapitre les phénomènes physiques et les outils existants qui vont permettre de proposer un nouveaux modèle de combustion en présence d'interactions propagation de flamme/auto-inflammation. Malgré le développement de diverses approches pour représenter ces phénomènes de combustion en écoulement turbulent depuis plusieurs décennies, les modèles nécessitent encore des améliorations car aucun d'entre eux ne peut être considéré prédictif, en particulier en présence d'auto-inflammation. L'étude proposée dans cette thèse n'a pas pour objectif de fournir un modèle prédictif mais plutôt d'introduire une stratégie de décomposition des mécanismes de propagation et d'auto-inflammation sur la base d'une PDF présumée permettant cette séparation. Des bases de données des propriétés chimiques adaptées à chaque mécanismes seront créées. Une variable similaire à celle introduite dans l'équation 3.46 sera utilisée et démontrée à partir de l'équation pour le temps de résidence.

Deuxième partie

Description des mécanismes
physiques fondamentaux et leur
modélisation en présence
d'interactions
flammes/auto-inflammation

Chapitre 4

Mélange non réactif d'espèces chimiques

L'objectif de ce travail est de traiter séparément les mécanismes physiques : mélange, propagation de flamme et auto-inflammation dans un modèle unique et cohérent. Ce chapitre présente le modèle utilisé pour représenter le mécanisme de mélange non réactif d'espèces chimiques. Il s'agit donc du cas où les réactions sont considérées suffisamment rapides pour que le mélange d'espèces chimiques (entre l'air et le combustible par exemple) ait lieu dans les gaz frais ou dans les gaz brûlés mais pas entre gaz frais et gaz brûlés. La composition et la température possible du gaz dans l'état frais et dans l'état brûlés sont obtenues par des calculs préliminaires de : (1) mélange pur de deux courants (pour décrire les gaz frais), (2) équilibre chimique ou (3) flammes de diffusion étirées laminaires (pour décrire les gaz brûlés). Les résultats basés sur l'utilisation de schémas cinétiques détaillés sont stockés dans des tables où les entrées sont une fraction de mélange moyenne et sa variance. Une PDF de type β est utilisée. L'analyse préliminaire de la réponse du modèle de mélange est faite sur deux brûleurs de type JHC (Jet-in-Hot-Coflow) : la configuration de Dally [46] et celle de Cabra [30, 31].

4.1 Fraction de mélange

Dans un système composé de deux entrées de composition différente, la fraction de mélange est la proportion de la masse totale qui est issue du courant combustible. Sa

définition est donc la suivante :

$$\xi = \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_F + \dot{m}_O} \quad (4.1)$$

où \dot{m} est le débit massique et l'indice F est associé au courant issu de l'entrée de combustible (Fuel) et l'indice O est associé au courant issu de l'entrée d'oxydant. Ainsi, $\xi = 1$ dans le courant combustible pur et $\xi = 0$ dans le courant oxydant pur.

En moyennant l'équation (1.19), l'équation de transport pour la fraction de mélange moyenne $\tilde{\xi} = (\overline{\rho\xi}/\bar{\rho})$ s'écrit :

$$\mathcal{L}_F(\bar{\rho}\tilde{\xi}) = 0 \quad (4.2)$$

où l'opérateur conservatif \mathcal{L}_F est introduit pour simplifier les notations¹. Le terme représentant le transport convectif non-résolu dans l'équation (4.2) : $T_{\xi,k} = \overline{\rho u_k \xi} - \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{\xi}$ est modélisé par une "loi gradient" :

$$T_{\xi,k} = \bar{\rho} D_T \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k}, \quad (4.3)$$

avec D_T le coefficient de diffusion turbulente.

Bien que l'utilisation de ce modèle soit discutable dans le cas d'écoulement à masse volumique variable [162], il est utilisé ici pour des raisons de simplicité. Aucun terme source n'apparaît dans l'équation (4.2) : la fraction de mélange $\tilde{\xi}$ est un scalaire non réactif.

4.2 Variance de fraction de mélange

La variance de fraction de mélange est notée sous la forme : $\tilde{V}_\xi = (\overline{\rho\xi^2}/\bar{\rho}) - \tilde{\xi}^2$. En gardant les mêmes notations, l'équation de transport pour la variance de la fraction de mélange (1.35) peut alors être ré-écrite :

$$\mathcal{L}_F(\bar{\rho}\tilde{V}_\xi) = -2T_{\xi,k} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k} - 2\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}_\xi, \quad (4.4)$$

où le second terme de droite est le taux de dissipation des fluctuations scalaire :

$$\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}_\xi = \overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \frac{\partial \xi}{\partial x_k}} - \bar{\rho} \tilde{D} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k}, \quad (4.5)$$

1. Sa partie instantanée est $\mathcal{L}(\rho\varphi) = \partial(\rho\varphi)/\partial t + \partial(\rho u_k \varphi)/\partial x_k - \partial/\partial x_k (\rho D \partial\varphi/\partial x_k)$.

Le modèle le plus simple et le plus couramment utilisé fait intervenir un temps caractéristique scalaire τ_ξ . C'est le modèle de relaxation linéaire, voir chapitre 2.2 :

$$\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}_\xi = \frac{\bar{\rho}\tilde{V}_\xi}{\tau_\xi} \quad (4.6)$$

Comme pour l'équation (4.2) les termes de transport convectif non-résolus $T_{\tilde{\xi},k}$ et $T_{\tilde{V}_\xi,k}$ peuvent être représentés simplement par une loi gradient :

$$T_{\tilde{\xi},k} = \bar{\rho}D_T \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k}, \quad (4.7)$$

$$T_{\tilde{V}_\xi,k} = \bar{\rho}D_T \frac{\partial \tilde{V}_\xi}{\partial x_k} \quad (4.8)$$

4.3 Données tabulées

L'intérêt de traiter séparément les mécanismes physiques : mélange, propagation de flamme et auto-allumage est de permettre l'utilisation des données de cinétique chimique détaillée tabulées et adaptées à chacun des mécanismes. Par exemple l'utilisation de réacteur homogène fermé pour déterminer les propriétés d'auto-allumage, des calculs de flammes laminaires pour déterminer les propriétés de propagation et des calculs de flammes de diffusion pour déterminer la composition des gaz brûlés d'écoulement non-prémélangé contrôlé par le mélange. L'utilisation de données issues de calculs d'écoulements spécifiques (flamme laminaire, réacteur, etc.) pour leur utilisation dans un écoulement différent est bien entendu discutable mais permet de tenir compte de certaines caractéristiques essentielles du fluide. De plus, rien n'empêche d'utiliser des données issues de différents types d'écoulement canonique voire même d'utiliser des schémas cinétiques différents adaptés à chaque mécanisme.

Les compositions et la température des états frais et brûlés sont tabulées et permettent d'en déduire la composition moyenne du mélange. Ces deux états sont stockés respectivement dans deux tables en fonction de la fraction de mélange moyenne et sa variance ((4.2) et (4.4)). La fraction de mélange moyenne $\tilde{\xi}$ et le taux de ségrégation $S_\xi = \tilde{V}_\xi / \left(\tilde{\xi} (1 - \tilde{\xi}) \right)$ sont les données d'entrée. Puisqu'il s'agit de quantité moyenne, cette méthode permet aussi de stocker n'importe quel terme de corrélation croisée [162].

De manière rigoureuse, il faudrait disposer des moyennes et variances de fraction de mélange conditionnée dans les gaz frais et brûlés. Toutefois, pour des raisons de simplicité, la même PDF est utilisée pour les gaz frais et gaz brûlés. Cette hypothèse consiste à considérer le temps caractéristique chimique négligeable devant les temps caractéristiques de mélange : les processus chimiques sont infiniment rapides quelque soit la valeur de fraction de mélange. Les corrélations croisées $\widetilde{c''\xi''}$, où c est la variable d'avancement sont donc négligeables. Cette PDF s'exprime alors comme $\widetilde{P}(\xi^*; \widetilde{\xi}, \widetilde{V}_\xi)$ (pour les gaz frais et brûlés) dans les sections suivantes avec ξ^* la fraction de mélange locale.

4.3.1 État de gaz frais

En utilisant les équations (1.17) et (1.12), nous pouvons en déduire une équation pour la température du mélange pur non réactif ($\sum_i Q_{p,i}^0 \omega_i = 0$) :

$$\bar{c}_p \frac{\partial}{\partial t} (\rho T) + \bar{c}_p \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k T) = \bar{c}_p \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial T}{\partial x_k} \right) \quad (4.9)$$

avec $\bar{c}_p = \sum_i c_{p,i} Y_i$ la capacité calorifique du mélange spécifique.

La composition locale des gaz frais ($Y_{j,u}, T_u$) avec $Y_{j,u}$ la fraction massique de l'espèce j dans les gaz frais et T_u la température des gaz frais est obtenue par des calculs préliminaires de mélange non réactif entre deux courants d'injection. Ces calculs sont effectués avec *Cantera* [70]. Nous pouvons alors déterminer la fraction massique moyenne de l'espèce j :

$$\widetilde{Y}_{j,u} = \int_0^1 Y_{j,u}(\xi^*) \widetilde{P}(\xi^*; \widetilde{\xi}, \widetilde{V}_\xi) d\xi^* \quad (4.10)$$

avec $Y_{j,u}(\xi^*)$ la fraction massique de l'espèce j dans les gaz frais quand la valeur de fraction de mélange vaut ξ^* et $\widetilde{P}(\xi^*; \widetilde{\xi}, \widetilde{V}_\xi)$ la probabilité associée pour le cas où la fraction moyenne et sa variance valent respectivement $\widetilde{\xi}$ et \widetilde{V}_ξ . La température moyenne des gaz frais s'écrit alors :

$$\widetilde{T}_u = \int_0^1 T_u(\xi^*) \widetilde{P}(\xi^*; \widetilde{\xi}, \widetilde{V}_\xi) d\xi^* \quad (4.11)$$

avec $T_u(\xi^*)$ la température des gaz frais.

Un exemple des profils de la température des gaz frais T_u en fonction de la fraction de mélange \widetilde{x}_i pour différentes valeurs de la ségrégation S ($S = 0, S = 0, 1, S = 0, 5, S = 0, 9$) issus de la configuration de Dally [46] qui sera présentée dans le paragraphe suivant est présenté sur la figure 4.1. On constate que le cas sans fluctuation $S = 0$ n'est pas une

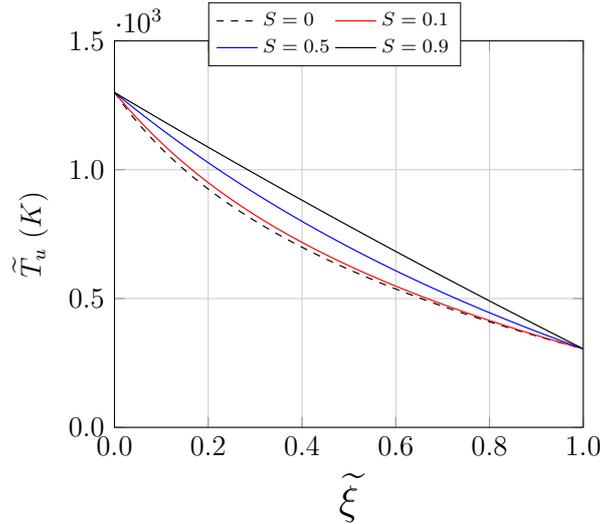


FIGURE 4.1 – Exemple des profils de la température des gaz frais T_u en fonction de la fraction de mélange pour différentes valeurs de la ségrégation S ($S = 0, S = 0, 1, S = 0, 5, S = 0, 9$) issus de la configuration de Dally [46].

droite car le c_p est variable avec la température. Naturellement, plus les fluctuations sont importantes, plus cet effet est atténué.

4.3.2 État de gaz brûlés

Pour déterminer la composition locale des gaz brûlés $(Y_{j,b}, T_b)$ où $Y_{j,b}$ est la fraction massique de l'espèce j dans les gaz brûlés et T_b est la température des gaz brûlés, deux cas différents ont été étudiés : (1) l'équilibre chimique et (2) des flammes de diffusion étirées laminaires. L'utilisation de données issues de flammes laminaires de diffusion étirées semble contradictoire avec l'hypothèse de chimie infiniment rapide considérée ici. Toutefois, les différentes réactions chimiques conduisant à l'équilibre présentent des temps caractéristiques très différents. Elles ne peuvent donc pas toutes être considérées infiniment rapide. L'utilisation de flamme de diffusion comme état de gaz brûlés permet donc d'éliminer les réactions trop lentes par rapport au temps de l'écoulement. Ainsi, nous pouvons toujours considérer que l'état brûlé obtenu dans la flamme étirée est atteint infiniment rapidement. La fraction massique moyenne de l'espèce j est alors évaluée sous la

forme :

$$\tilde{Y}_{j,b} = \int_0^1 Y_{j,b}(\xi^*) \tilde{P}(\xi^*; \tilde{\xi}, \tilde{V}_\xi) d\xi^* \quad (4.12)$$

avec $Y_{j,b}(\xi^*)$ la fraction massique de l'espèce j dans les gaz brûlés quand la valeur de fraction de mélange vaut ξ^* et $\tilde{P}(\xi^*; \tilde{\xi}, \tilde{V}_\xi)$ la probabilité associée pour le cas où la fraction moyenne et sa variance valent respectivement $\tilde{\xi}$ et \tilde{V}_ξ . La température moyenne des gaz brûlés est déterminée par :

$$\tilde{T}_b = \int_0^1 T_b(\xi^*) \tilde{P}(\xi^*; \tilde{\xi}, \tilde{V}_\xi) d\xi^* \quad (4.13)$$

avec $T_b(\xi^*)$ la température des gaz brûlés.

Un exemple de profils de la température des gaz brûlés T_b en fonction de la fraction de mélange ξ pour différentes valeurs de la ségrégation S ($S = 0$, $S = 0,1$, $S = 0,5$, $S = 0,9$) issus de la configuration de Dally qui sera présentée dans le paragraphe suivant sont présentés sur la figure 4.2 pour une flamme à l'équilibre chimique. Là encore, comme attendu les fluctuations de composition ($S > 0$) ont tendance à atténuer les variations de température obtenues pour l'équilibre chimique ($S = 0$).

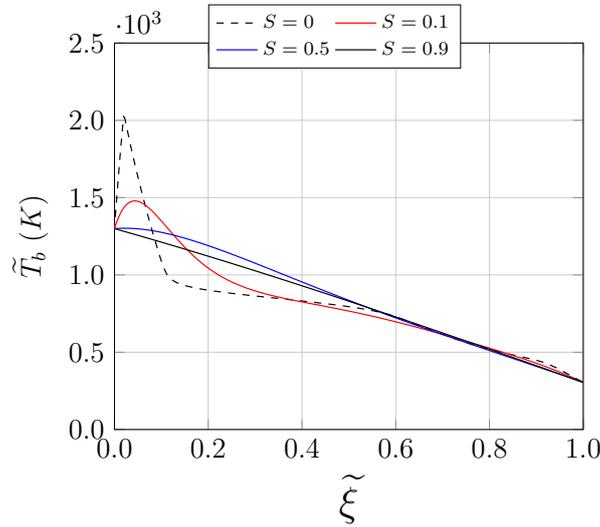


FIGURE 4.2 – Exemple des profils de la température des gaz brûlés T_b en fonction de la fraction de mélange pour différentes valeurs de la ségrégation S ($S = 0$, $S = 0,1$, $S = 0,5$, $S = 0,9$) issus de la configuration de Dally [46].

4.4 Analyse préliminaire de la réponse du modèle de mélange

Un brûleur de type JHC (Jet-in-Hot-Coflow) constitué d'un jet de combustible central froid et d'un écoulement co-courant d'air chaud vicié (mélangé avec des produits de combustion). Ce brûleur permet d'étudier des flammes non-prémélangées. L'augmentation de la vitesse d'éjection des réactifs peut conduire au prémélange partiel du combustible avec l'oxydant avant que la réaction chimique ne se produise. Les flammes sont alors susceptibles d'être décollées de la lèvre du brûleur (phénomène de "liftoff") et la propagation des extrémités de la flamme joue alors un rôle essentiel dans leur stabilisation. Deux montages expérimentaux académiques de type JHC : configuration de Dally et celle de Cabra sont utilisés pour tester la réponse du modèle de mélange.

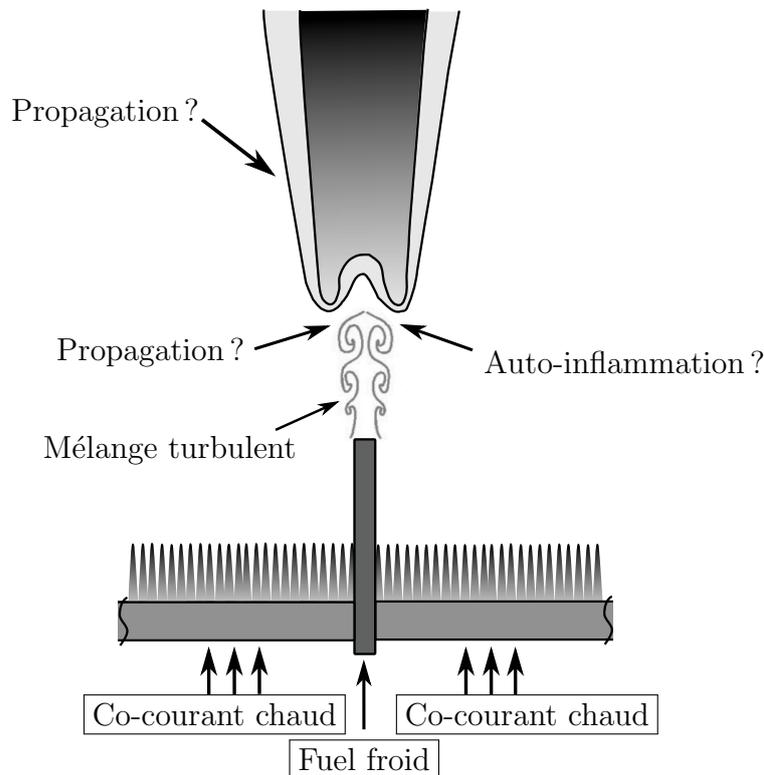


FIGURE 4.3 – Flamme détachée stabilisée d'un brûleur de type JHC.

4.4.1 Description des montages expérimentaux

Le montage expérimental de Dally et al. [46] est un brûleur académique constitué d'un jet central de combustible froid et d'un co-courant d'air vicié chaud (mélange d'azote, d'oxygène et des produits de combustion). Le tout est placé dans une veine de soufflerie. Un schéma représentatif de ce montage est montré sur la figure 4.3 avec un récapitulatif de ces conditions reportées dans le tableau 4.1. Seuls les essais du cas composé de 9% d'oxygène dans le co-courant (HM9%) sont testés dans ce manuscrit.

	d (mm)	V (m/s)	T (K)	Y_{O_2}	Y_{N_2}	Y_{H_2O}	Y_{CO_2}	Y_{CH_4}	Y_{H_2}
CJ	4,25	73,5	305	0,0	0,0	0,0	0,0	0,885	0,115
CF	82	3,2	1300	0,09	0,79	0,065	0,055	0,0	0,0
WT	-	3,2	300	0,233	0,767	0,0	0,0	0,0	0,0

TABLE 4.1 – Conditions expérimentales du cas HM9% de Dally et al. [46], CJ, CF et WT représente respectivement le jet central, le co-courant et la soufflerie, d les diamètres correspondants.

Le montage expérimental de Cabra et al. [31] est un brûleur dont la hauteur de stabilisation de la flamme est plus élevée par rapport à celle du cas Dally. Le schéma représentatif de ce montage est identique à celui de Dally, voir figure 4.3. Les conditions expérimentales pour le cas CH_4/Air sont données dans le tableau 4.2. Le jet central est un prémélange froid riche (mélange de combustible, d'oxygène et d'azote), le jet co-courant est un mélange d'oxygène, d'azote et des produits chauds de combustion.

	d (mm)	V (m/s)	T (K)	X_{O_2}	X_{N_2}	X_{H_2O}	X_{CH_4}	X_{H_2}
CJ	4,57	100	320	0,15	0,52	0,0029	0,33	0,0
CF	210	5,4	1350	0,12	0,73	0,15	0,0003	0,0

TABLE 4.2 – Conditions expérimentales de Cabra et al. [31], CJ et CF représente respectivement le jet central et le co-courant, d les diamètres correspondants.

4.4.2 Description de la configuration de calcul

L'axisymétrie des dispositifs permet d'utiliser des maillages structurés 2D ayant 20,000 à 100,000 cellules qui représente une tranche du domaine physique. Une condition de symétrie est imposée sur le bord latéral du domaine de calcul. Les bords bas et haut sont respectivement la condition d'entrée et de sortie, voir la figure 4.4. La dimension caractéristique du maillage est $\Delta = \sqrt{\Delta x_1 \cdot \Delta r}$ avec $r = \sqrt{x_2^2 + x_3^2}$ la coordonnée radiale variant de 0,7 à 1,5 mm. Le temps de calcul nécessaire pour obtenir la convergence totale d'une simulation numérique avec le maillage le plus fin est quelques heures en utilisant un ordinateur de six-cores quadri-processeurs (Xeon (R) E5-2620@2GHz). Ce très faible coût de calcul est un des principaux avantages du modèle numérique proposé ici. Les conditions aux limites sont obtenues par des simulations numériques préliminaires d'écoulements turbulents dans les canaux.

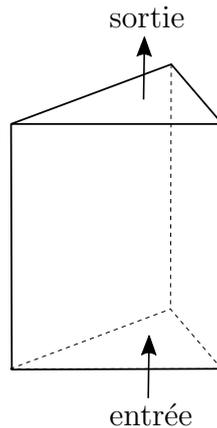


FIGURE 4.4 – Schéma représentatif du domaine de calcul.

4.4.3 Résultats numériques

Ce paragraphe présente quelques résultats numériques préliminaires permettant d'évaluer d'une part la pertinence des deux tables envisagées pour représenter l'état moyen "gaz brûlés" et d'autre part l'impact du mécanisme de mélange seul, c'est-à-dire, sans l'utilisation des modèles de propagation et d'auto-allumage. Ces résultats correspondent donc à ceux obtenus par l'utilisation d'un modèle dit à "chimie infiniment rapide". Les tables sont produites par des simulations numériques préliminaires (*Cantera*) effectuées en utilisant le schéma cinétique GRI-Mesh 3.0 (53 espèces chimiques et 325 étapes de réaction

élémentaires). L'évolution des profils de température avec la fraction de mélange issue de ces tables correspond aux deux cas : “équilibre chimique” et “flamme de diffusion étirée”, voir la figure 4.5. La comparaison de ces deux cas permet de mettre en évidence les effets

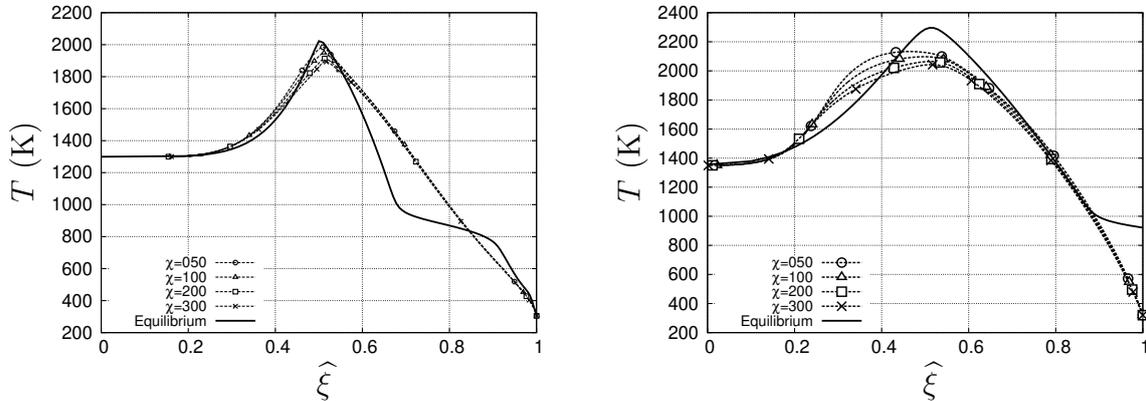


FIGURE 4.5 – Gauche : profils de température axiale avec différentes valeurs de taux d'étirement χ en fonction de fraction de mélange normalisée $\hat{\xi}$ pour les conditions de Dally [46] (gauche) et de Cabra [30, 31] (droite). La fraction de mélange normalisée est définie comme : $\hat{\xi} = \xi \frac{\log 0.5}{\log \xi_{st}}$, voir la référence [162].

de diffusion différentielle et de cinétique chimique finie. Les courants issus des deux configurations (Dally et Cabra) sont présentés. Dans le cas des flammes de diffusion étirées, le taux d'étirement est défini au chapitre 3.2.2 Eq. (3.8). La différence significative observée entre “équilibre chimique” et “flamme de diffusion” montre l'importance de prendre en compte la cinétique chimique finie car les réactions de fin de combustion conduisant à l'équilibre chimique sont très lentes. Néanmoins, l'influence modérée de la valeur du taux d'étirement sur les profils de température montre que le taux de dégagement de chaleur peut être décrit par l'utilisation d'un seul temps caractéristique. La différence maximale de température obtenue pour ces différentes flammelettes de diffusion étirées se trouve autour de la stœchiométrie ($\hat{\xi}_{st} = 0.5$). Cette différence vaut moins de 5% pour la configuration de Dally et al. [46] et moins de 10% pour celle de Cabra et al. [30, 31]. Comme cet écart ne concerne que les conditions proches de la stœchiométrie qui sont localisées dans une zone restreinte de l'écoulement, son impact sur le résultat global sera considéré négligeable. Quelle que soit la valeur du taux d'étirement utilisé dans la table, le champ de température et l'écoulement ne sera quasiment pas affecté. Nous choisissons donc d'utiliser des données issues d'une seule flamme de diffusion à contre-courant dont la valeur

du taux d'étirement est $\chi = 100 \text{ s}^{-1}$ (Il s'agit d'un ordre de grandeur estimé à partir de la turbulence en entrée du domaine de calcul). Finalement, le paramètre de modélisation le plus important introduit pour représenter le mécanisme de mélange est le rapport du temps caractéristique du mélange et du temps caractéristique turbulent $C_\xi = \tau_\xi/\tau_T$ apparaissant dans le modèle du taux de dissipation scalaire : le modèle de relaxation linéaire (LRM). Une valeur standard $C_\xi = 0,8$ de ce rapport est utilisée.

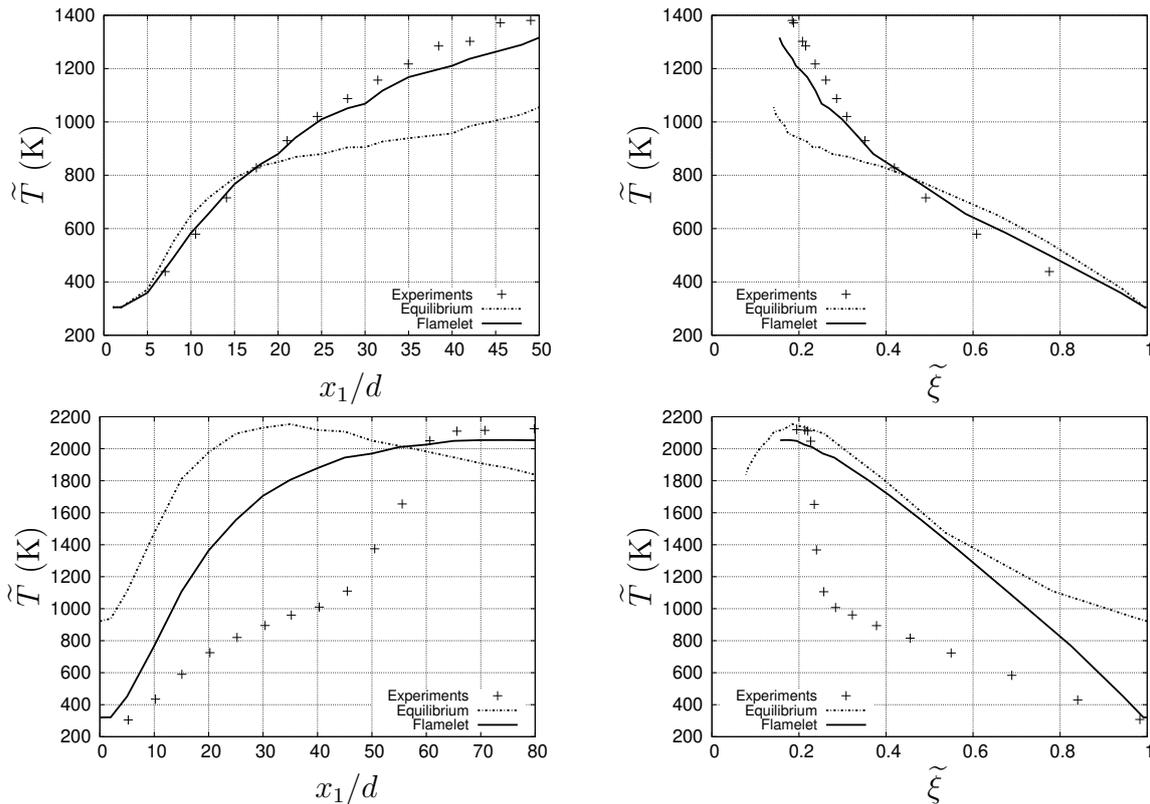


FIGURE 4.6 – Profils de température moyenne axiale issus des données expérimentales et des résultats numériques en fonction des coordonnées axiales (gauche) et de la fraction de mélange moyenne $\tilde{\xi}$ (droite) pour les configurations de Dally [46] (haut) et de Cabra [30, 31] (bas).

Les profils axiaux de température moyenne comparés avec les données expérimentales [46, 31] sont tracés sur la gauche de la figure 4.6. Seules les équations de transport de fraction de mélange moyenne et sa variance sont résolues dans ces simulations effectuées avec le code de calcul CFD *Code_Saturne*, voir annexe. L'objectif de ce calcul préliminaire est de mettre en évidence l'intérêt d'une table basée sur des flammelettes de diffusion étirées laminares par rapport au cas d'équilibre chimique. Le temps caractéristique chimique est

considéré négligeable devant les temps caractéristiques de l'écoulement : "chimie infiniment rapide". Ainsi, la valeur moyenne de taux d'avancement est fixée à l'unité : seule la table des gaz brûlés est utilisée. La flamme turbulente est alors attachée à la lèvre du brûleur. Dans le cas de la configuration de Dally [46], l'équilibre chimique sous-estime le niveau de température moyenne alors que le résultat obtenu avec la table basée sur une flammelette étirée est tout à fait satisfaisant pour estimer la température des gaz brûlés, voir la figure 4.6. Nous remarquons que le résultat du calcul de la configuration de Dally [46] est en accord avec les données expérimentales. Comme la hauteur de stabilisation de la flamme est très courte dans cette expérience, l'hypothèse de chimie rapide est justifiée. La configuration de Cabra [31], quant à elle, permet d'observer une flamme détachée ayant une hauteur de stabilisation assez importante. Dans ce cas, la considération du seul mécanisme de mélange n'est plus suffisant pour reproduire tous les mécanismes physiques. Ainsi, seule la configuration de Cabra sera utilisée pour l'application du modèle complet présenté dans les parties suivantes de ce manuscrit. Les profils axiaux de température moyenne en fonction de la fraction de mélange moyenne $\tilde{\xi}$ sont tracés pour la configuration de Dally (en haut) et celle de Cabra (en bas), voir la droite de la figure 4.6.

Finalement, nous pouvons conclure que les tables de données basées sur des flammelettes de diffusion fournissent des résultats corrects lorsque la flamme turbulente non-prémélangée est attachée à la lèvre du brûleur. Néanmoins, si la flamme est détachée du brûleur un prémélange partiel est obtenu en amont de la flamme. Le modèle de combustion turbulente doit donc tenir compte de la présence des gaz frais réactifs partiellement mélangés mais qui n'ont pas encore réagi. Une table supplémentaire "gaz frais" est établie par des calculs préliminaires : mélange non réactif de ces deux courants. De ce fait, la table de flammelette de diffusion étirée représente l'état des gaz brûlés et la table de mélange non réactif décrit l'état des gaz frais. Un scalaire : le taux d'avancement permet de déterminer la proportion des gaz brûlés. Ce scalaire et son utilisation pour lire dans les tables les valeurs de température et de masse volumique seront introduit dans le chapitre suivant.

4.5 Conclusions

- Pour décrire le mélange deux scalaires sont utilisés : $\tilde{\xi}$, \tilde{V}_ξ .
 - Les tables de données issues de flammelettes étirées pour une valeur fixe de l'étirement sont suffisantes pour décrire l'état du mélange brûlé.
 - Les paramètres de modélisation sont fixés à des valeurs classiques constantes et ne seront plus modifiés.
 - L'hypothèse de chimie infiniment rapide est suffisante pour la configuration de Dally mais pas pour celle de Cabra.
-

Chapitre 5

Propagation d'un front de flamme

5.1 Hypothèses principales

L'utilisation d'une loi d'Arrhénius comme terme source d'une équation de transport permet de prendre en compte aussi bien les mécanismes d'auto-inflammation que de propagation. Toutefois, dès lors que les longueurs et temps caractéristiques associés à ces lois très non-linéaires ne peuvent pas être résolus (RANS, LES), un modèle associé à chacun des mécanismes doit être introduit. Les modèles tenant compte de la propagation (EBU, Σ [130], etc.) sont très nombreux, voir le chapitre 3. En revanche, les modèles permettant de traiter correctement à la fois la propagation et l'auto-inflammation sans utiliser directement de lois d'Arrhénius sont plus rares. L'objectif de ce travail est justement de traiter séparément ces mécanismes pour fournir des résultats cohérents lorsque les deux phénomènes se produisent au sein du même écoulement. Néanmoins, cette séparation des mécanismes nécessite tout de même d'adapter le modèle de propagation. Le modèle de propagation choisi est celui développé récemment dans l'équipe Combustion Turbulente de l'Institut Pprime. C'est une extension du modèle BCL qui s'appuie sur une PDF quasi bimodale : une flamme sépare les états frais des états brûlés.

La considération de ces deux états de gaz permet d'introduire le taux d'avancement. Toutefois, en présence de processus d'auto-inflammation, la composition et la température de l'état "gaz frais" peut légèrement évoluer sous l'effet des réactions chimiques. Bien que les variations de température soient faibles, le temps nécessaire pour atteindre l'auto-inflammation peut diminuer très significativement. Les gaz frais peuvent alors être trans-

formés en gaz brûlés par auto-inflammation dans tout le volume de gaz frais d'une cellule. L'hypothèse de travail principal permettant de séparer les mécanismes de propagation et d'auto-inflammation est la suivante : le temps caractéristique du dégagement de chaleur, que ce soit par propagation de flamme ou par auto-inflammation, sont petits devant le temps caractéristique de mélange turbulent. Ainsi, le modèle de flammelettes est parfaitement adapté pour décrire la propagation : un "front" (interface définie spatialement) dont la caractéristique au premier ordre est sa vitesse de propagation sépare les gaz frais des gaz brûlés, voir figure 5.1. La structure interne de ce front sera aussi tabulée. Les faibles variations de température dans les gaz frais pouvant conduire à l'auto-inflammation sont donc négligeables devant les variations de température durant l'inflammation qui est considérée très rapide. Ainsi, l'auto-inflammation peut être décrite au premier ordre par l'"instant" qui définit la transition des gaz frais aux gaz brûlés, voir figure 5.1. La structure interne (au sens temporelle) de cet "instant" sera également tabulée. Cette hypothèse permet de considérer que l'évolution des gaz frais pendant l'auto-inflammation n'affecte pas la composition ni la température moyenne qui peuvent toujours être décrites par les états "gaz frais" stockés dans les tables introduites au chapitre précédent. Les variations de masse volumique dans les gaz frais dues à l'auto-inflammation et ses conséquences sur l'écoulement sont donc aussi négligées. Finalement, la PDF bimodale est toujours valable pour décrire la propagation du front de flamme dans un milieu susceptible de s'auto-inflammer.

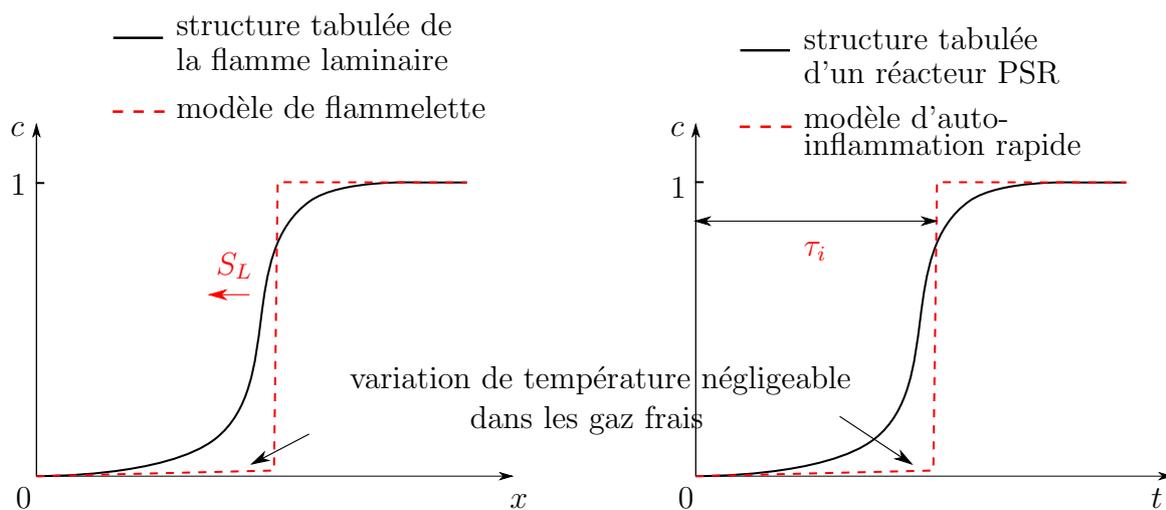


FIGURE 5.1 – Variation spatiale et temporelle du taux d'avancement c avec ou sans l'utilisation de modèle.

Le taux d'avancement $c(\mathbf{x}, t)$ est défini comme étant une enthalpie sensible normalisée ou une fraction massique d'espèce chimique normalisée de telle sorte que $c \equiv 0$ dans les gaz frais et $c \equiv 1$ dans les gaz brûlés. Sa valeur moyenne (ou filtrée) est déduite de l'équation suivante :

$$\mathcal{L}_F(\bar{\rho}c) = \bar{\omega} = \bar{\rho}\tilde{\Omega}, \quad (5.1)$$

où $\bar{\omega}$ représente le taux de production chimique moyen.

5.2 Modèle de flammelettes d'épaisseurs finies

Le modèle de flammelettes d'épaisseur finie introduit par Kha et al. [82] (les mêmes notations sont utilisées ici) permet de décrire la structure d'une flamme turbulente. Dans un premier temps, je vais montrer pourquoi la PDF quasi-bimodale introduite par Bray et Moss [23] doit être généralisée et comment cette généralisation peut être utilisée pour représenter l'auto-inflammation. La PDF quasi bimodale BML est la suivante :

$$\tilde{P}(c, x) = \alpha_c \delta(c) + \beta_c \delta(1 - c) + \gamma_c \tilde{f}(c) \quad (5.2)$$

avec $\alpha_c + \beta_c + \gamma_c = 1$. En considérant une flamme mince ni courbée, ni étirée, la fonction $\tilde{f}(c)$ est la PDF intérieure des flammelettes qui est inversement proportionnelle au gradient du taux d'avancement dc/dx [23]. La forme de la PDF $\tilde{f}(c)$ s'écrit alors :

$$\tilde{f}(c) = C_1^* (dc/dx^*)^{-1} \quad (5.3)$$

où x^* est la variable d'espace adimensionnelle ($x^* = x/\delta_L$) avec δ_L l'épaisseur de flamme et C_1^* est une constante de normalisation. En utilisant la condition de normalisation de la PDF $\tilde{f}(c)$, c'est-à-dire, $\int_0^1 \tilde{f}(c) dc = 1$ on en déduit l'expression pour cette constante C_1^* :

$$C_1^* = \left(\int_0^1 \frac{1}{dc/dx^*} dc \right)^{-1} = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dx^* \right)^{-1} \quad (5.4)$$

On remarque tout de suite que cette intégrale est divergente et donc $C_1^* \rightarrow 0$. En utilisant le modèle BCL [26], les moments du premier ordre (\tilde{c} : moyenne), du deuxième ordre (\tilde{c}^2 : variance) du taux d'avancement et le taux de ségrégation s'expriment de la même manière que ceux issus des équations (3.26), (3.27) et (3.30). Le taux de réaction chimique moyen s'écrit alors comme l'équation (3.32) avec I_ω le taux de réaction chimique moyen

conditionné à l'intérieur des flammelettes qui peut être déterminé à partir d'une flamme laminaire de la façon suivante :

$$I_\omega = \int_0^1 \frac{\omega_c(c)}{\rho} \tilde{f}(c) dc \quad (5.5)$$

$\omega_c(c)$ peut être déterminé par une loi d'Arrhénius si une réaction globale est considérée ou directement intégré à partir des résultats de calcul de flamme laminaire. Les deux moments conditionnés à l'intérieur des flammelettes, notés I_1 et I_2 , sont définis de la façon suivante :

$$I_1 = \int_0^1 c \tilde{f}(c) dc = C_1^* \int_0^1 c (dc/dx^*)^{-1} dc = C_1^* \int_{-\infty}^{+\infty} c(x^*) dx^* \quad (5.6)$$

$$I_2 = \int_0^1 c^2 \tilde{f}(c) dc = C_1^* \int_0^1 c^2 (dc/dx^*)^{-1} dc = C_1^* \int_{-\infty}^{+\infty} c(x^*)^2 dx^* \quad (5.7)$$

avec C_1^* sous la forme (5.4). Les intégrales I_1 et I_2 sont aussi divergentes, des valeurs finies des bornes d'intégration doivent être introduites pour déterminer leurs valeurs. Ces bornes permettent d'évaluer la constante C_1^* :

$$C_1^* = \left(\int_{x_{min}^*}^{x_{max}^*} dx^* \right)^{-1} = (x_{max}^* - x_{min}^*)^{-1} = \delta_{x^*}^{-1} \quad (5.8)$$

où x_{min}^* et x_{max}^* sont les limites spatiales (adimensionnelles) des flammelettes. Cette constante d'intégration représente donc l'inverse de l'épaisseur de la flammelette. Ces bornes spatiales doivent être associées à des bornes dans l'espace des compositions c_{min} et c_{max} , voir figure 5.2.

L'introduction de ces bornes nécessitent donc de décrire la structure d'une flamme turbulente en différentes couches. Un schéma simplifié représentatif de ces couches est montré sur la figure 5.3, plus de détails peuvent être trouvés dans la référence de Kha et al. [82]. Afin de ne pas définir ces bornes de manière arbitraire, l'épaisseur des flammelettes $l_x = x_{max} - x_{min}$ est considérée égale à l'échelle de Kolmogorov η . Les bornes des flammelettes dans l'espace physique (x_{min} et x_{max}) et l'espace des compositions (c_{min} et c_{max}) sont donc des fonctions du nombre de Karlovitz. Dans le cas où le nombre de Zeldovich est infiniment grand ($Ze \rightarrow \infty$), la valeur de coupure c_{max} vaut 1 et la valeur de coupure c_{min} s'exprime de la façon suivante [82] :

$$c_{min}^{Ze \rightarrow \infty} = \exp(-1/\sqrt{Ka}) \quad (5.9)$$

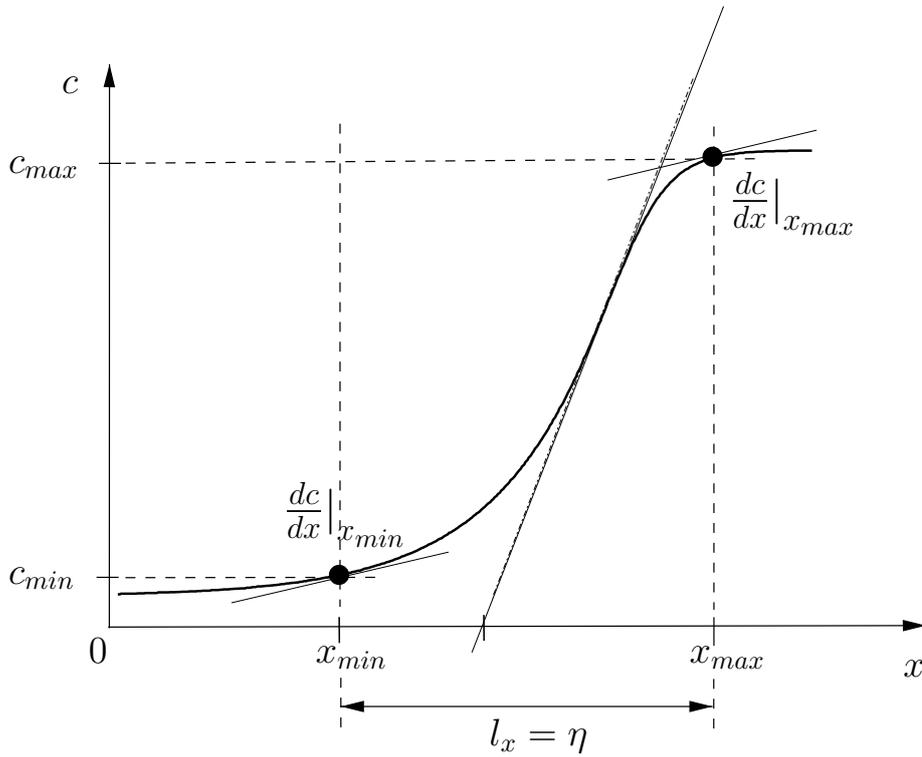


FIGURE 5.2 – Description des limites des flammelettes dans l’espace physique et l’espace des compositions [82]

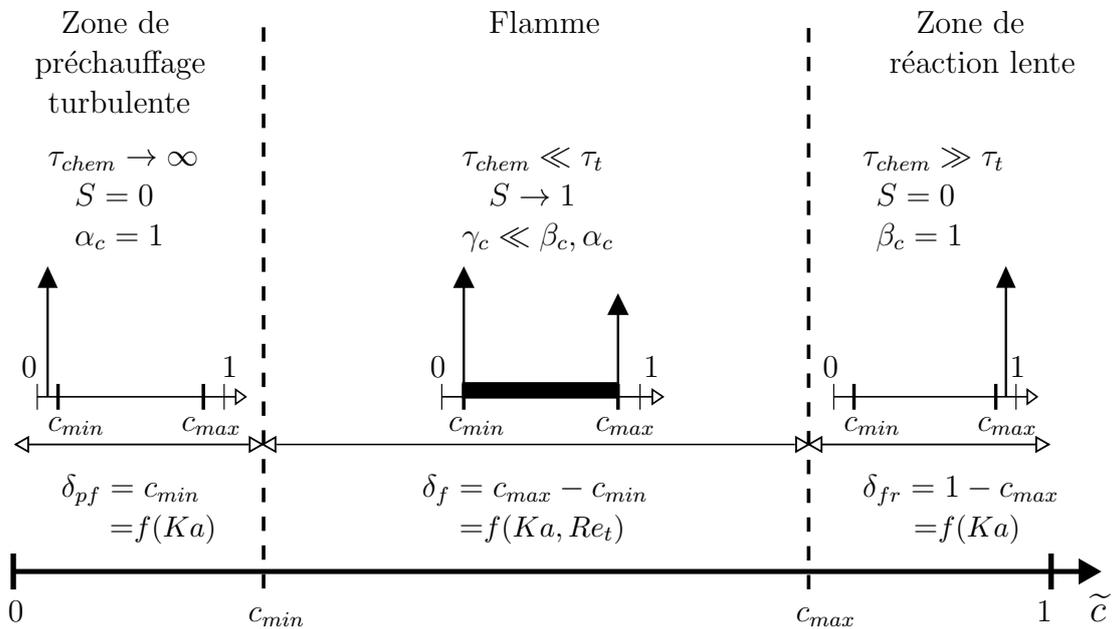


FIGURE 5.3 – Structure simplifiée d’une flamme turbulente prémélangée et la PDF $P(c)$ coresspondante.

La définition précise de ces bornes d’intégration permet de calculer les valeurs de

toutes les intégrales caractéristiques des flammelettes. Ainsi, le terme $\frac{I_\omega}{I_1 - I_2}$ représente une quantité caractéristique du mécanisme de propagation qui est tabulée à partir de calculs de flammes laminaires parfaitement prémélangées (*Cantera*). L'équation (3.32) décrit alors le terme de propagation.

L'intérêt de ce modèle est de justifier théoriquement la coupure c_{min} qui est nécessaire pour décrire les limites des flammelettes et qui va également être indispensable pour tenir compte de l'auto-inflammation possible dans les gaz frais ($c < c_{min}$). Ainsi, ce modèle permet de séparer spatialement les flammelettes de l'auto-inflammation et facilite ainsi sa modélisation.

5.3 Décomposition du taux de production chimique

Grâce au modèle de propagation introduit, une procédure de décomposition peut être appliquée directement au taux de réaction chimique, lequel est exprimé comme la somme de deux contributions indépendantes : $\omega = \omega_i + \omega_p$ avec ω_i le terme source associé aux processus d'inflammation et ω_p le terme lié au mécanisme de propagation de flamme. L'objectif du modèle proposé ici est d'appliquer cette décomposition dans le cadre de la PDF présumée généralisée introduite par Kha et al. [82], qui permet de décrire les limites des structures de flammelettes qui se propagent. La PDF de Kha qui est une généralisation de la PDF BCL [23] qui s'écrit sous la forme :

$$\tilde{P}(c) = \alpha\delta(c - c_{min}) + \gamma f(c) + \beta\delta(c_{max} - c), \quad (5.10)$$

avec α , β et γ les poids de chaque contribution, gaz frais, gaz brûlés, flammelettes. La condition de normalisation impose : $\alpha + \beta + \gamma = 1$. La valeur de γ devient infiniment petite en régime flammelettes ($\gamma \ll \alpha, \beta$). Les distributions de Dirac positionnées en $c = c_{min}$ et $c = c_{max}$ sont associées respectivement aux contributions des gaz frais et des gaz brûlés. La PDF $f(c)$ est la distribution décrivant les structures internes des flammelettes dont l'intervalle est : $[c_{min} : c_{max}]$. L'introduction des valeurs de coupure c_{min} et c_{max} est la base de l'approche proposée par Kha et al. [82] qui a permis de décrire précisément les différentes couches d'une flamme turbulente. Plus de détails de cette étude sont présentés dans le paragraphe suivant. La PDF introduite permet : (1) de déterminer la distribution des états internes à la flammelette à partir des données tabulées de flamme de

prémélange laminaire, (2) d'introduire les caractéristiques propagatives des flammelettes dans le modèle, et (3) de décrire la structure d'une flamme turbulente du bord d'attaque au bord de fuite. Comme les valeurs de l'avancement inférieure à la coupure ($c < c_{min}$) représente des "gaz frais" qui peuvent avoir réagi légèrement ($c_{min} > 0$) [82, 128], cette PDF présumée est parfaitement adaptée à notre objectif qui consiste à séparer les processus d'auto-inflammation qui ont lieu dans les gaz frais ($c < c_{min}$) des processus de propagation de front de flamme ($c_{min} < c < c_{max}$). Sur la base de cette étude la PDF proposée ici s'écrit sous la forme :

$$\tilde{P}(c) = \alpha f_i(c) + \gamma f(c) + \beta f_b(c) \quad (5.11)$$

Dans l'expression ci-dessus, $f_i(c)$ est la PDF partielle associée aux petites valeurs de taux d'avancement (compositions des gaz frais) et bornée :

$$\int_0^{c_{min}} f_i(c^*) dc^* \equiv 1 \quad (5.12)$$

$f_b(c)$ est la PDF partielle bornée associée aux grandes valeurs de taux d'avancement (compositions des gaz brûlés) :

$$\int_{c_{max}}^1 f_b(c^*) dc^* \equiv 1 \quad (5.13)$$

La PDF des gaz frais est maintenant notée $f_i(c)$ ("igniting") puisque le processus d'auto-inflammation modifie l'état correspondant aux gaz frais. Ils sont alors des gaz frais au sens de la flamme se propageant mais peuvent réagir au sens de l'auto-inflammation. En revanche, cette distinction n'est pas nécessaire pour les gaz brûlés. L'impact possible de cette modification de composition (température et fraction massique d'espèces) des gaz frais sur la vitesse de propagation de la flamme n'est pas prise en compte par le modèle dans cette première étude pour des raisons de simplicité. En utilisant la PDF (5.11), le taux de réaction moyen peut alors s'écrire :

$$\bar{\omega} = \bar{\rho} \int_0^1 \Omega(c) \tilde{P}(c) dc = \alpha \bar{\omega}_i + \gamma \bar{\omega}_f + \beta \bar{\omega}_b = \bar{\omega}_i + \bar{\omega}_p + \bar{\omega}_b \quad (5.14)$$

où $\bar{\omega}_i = \alpha \bar{\omega}_i$ est la contribution du taux de réaction chimique due à l'auto-inflammation, $\bar{\omega}_p = \gamma \bar{\omega}_f$ est la contribution associée au mécanisme de propagation de flamme et $\bar{\omega}_b = \beta \bar{\omega}_b$ celle liée aux gaz brûlés. Cette dernière contribution est négligée dans cette

étude ($c_{max} \rightarrow 1$) mais pourrait être utile pour décrire la chimie lente associée à la production de certains polluants. La contribution de l'auto-inflammation sera discutée au chapitre suivant. La contribution de propagation de flamme est obtenue par la méthode récemment proposée par Kha et al. [81, 82].

5.4 Extension du modèle de propagation en présence d'auto-allumage

Le cas d'un mélange parfaitement prémélangé est considéré dans ce paragraphe pour faciliter la présentation du modèle. Seul le mécanisme de propagation est modélisé ici mais ce modèle doit tenir compte de l'auto-allumage possible dans les gaz frais. En conservant les mêmes notations introduites dans la section 5.3 et en utilisant la méthode de modélisation présentée dans la section 5.2 les moments conditionnels du premier ordre s'écrivent comme :

$$\tilde{c}_i = \int_0^{c_{min}} c \tilde{P}_i(c) dc, \quad \tilde{c}_f = \int_{c_{min}}^{c_{max}} c \tilde{P}_f(c) dc, \quad \text{et} \quad \tilde{c}_b = \int_{c_{min}}^{c_{max}} c \tilde{P}_b(c) dc \quad (5.15)$$

les valeurs de c conditionnés dans les gaz frais et brûlés ne sont plus 0 et 1 mais \tilde{c}_i et \tilde{c}_b . La condition de normalisation de la PDF est : $\alpha + \beta + \gamma = 1$. L'expression de la valeur moyenne (ou filtrée) de l'avancement est :

$$\tilde{c} = \alpha \tilde{c}_i + \beta \tilde{c}_b + \gamma \tilde{c}_f \quad (5.16)$$

Les poids associés aux états des gaz frais et des gaz brûlés :

$$\alpha = \frac{\tilde{c}_b - \tilde{c}}{\tilde{c}_b - \tilde{c}_i} - \gamma \frac{\tilde{c}_b - \tilde{c}_f}{\tilde{c}_b - \tilde{c}_i} \quad (5.17)$$

$$\beta = \frac{\tilde{c} - \tilde{c}_i}{\tilde{c}_b - \tilde{c}_i} - \gamma \frac{\tilde{c}_f - \tilde{c}_i}{\tilde{c}_b - \tilde{c}_i} \quad (5.18)$$

En négligeant les fluctuations de taux d'avancement dans les gaz frais et les gaz brûlés la relation des moments conditionnels du deuxième ordre s'expriment par : $(\tilde{c}^2)_i = (\tilde{c}_i)^2$ et $(\tilde{c}^2)_b = (\tilde{c}_b)^2$. Nous pouvons alors en déduire les moyennes conditionnelles dans les gaz frais et les gaz brûlés : $\tilde{c}_i = c_{min}$ et $\tilde{c}_b = c_{max}$.

Ainsi, la variance s'écrit :

$$\tilde{c}^{\prime 2} = \alpha (\tilde{c}_i)^2 + \beta (\tilde{c}_b)^2 + \gamma (\tilde{c}^2)_f - \tilde{c}^2, \quad (5.19)$$

Le poids de la contribution des flammelettes peut alors s'exprimer sous la forme :

$$\gamma = \frac{(S_{max} - S) \tilde{c}(1 - \tilde{c})}{(c_{max} - \tilde{c}_f)(\tilde{c}_f - c_{min}) - \left(\widetilde{c'^2}\right)_f}, \quad (5.20)$$

où le dénominateur est totalement déterminé à partir des propriétés des flammelettes et de leurs limites. Le numérateur introduit l'écart de la ségrégation S à sa valeur maximale possible S_{max} définies de la manière suivante :

$$S = \frac{\widetilde{c'^2}}{\tilde{c}(1 - \tilde{c})} \quad \text{et} \quad S_{max} = \frac{(c_{max} - \tilde{c})(\tilde{c} - c_{min})}{\tilde{c}(1 - \tilde{c})} \quad (5.21)$$

Cet écart ($S_{max} - S$) est modélisé par :

$$S_{max} - S = \frac{\Theta}{Da_T + \Theta} \quad \text{et} \quad Da_T = \frac{\tau_T}{\tau_c} \quad (5.22)$$

où Θ est le paramètre de modélisation, Da_T le nombre de Damköhler turbulent, τ_T et τ_c sont respectivement le temps caractéristique de la turbulence (intégrale ou échelle sous-maille) et le temps caractéristique chimique. Par conséquent, la contribution de "propagation de flamme" au taux de réaction chimique dans un mélange parfaitement prémélangé s'écrit :

$$\bar{\omega}_p = \gamma \bar{W}_f = \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \frac{F \Theta}{Da_T + \Theta} \quad (5.23)$$

où la quantité F regroupe tous les paramètres calculés et tabulés à partir des structures de flammelettes laminaires

$$F = \frac{\bar{W}_f}{(c_{max} - \tilde{c}_f)(\tilde{c}_f - c_{min}) - \left(\widetilde{c'^2}\right)_f} \quad (5.24)$$

Une forme simplifiée de cette expression (5.24) a été introduite dans l'étude de Kha et al. [82] en considérant $c_{min} \rightarrow 0$ et $c_{max} \rightarrow 1$. La quantité F est simplifiée alors sous la forme suivante :

$$F = \frac{\bar{W}_f}{\tilde{c}_f(1 - \tilde{c}_f) - \left(\widetilde{c'^2}\right)_f} \quad (5.25)$$

Cette quantité F et l'échelle de temps caractéristique chimique τ_c peuvent être déterminées par des calculs de flammes de prémélange laminaires, voir la référence [82]. Ces deux paramètres sont alors tabulés en fonction de la fraction de mélange moyenne $\tilde{\xi}$ et la

ségrégation S_ξ . Ainsi, la contribution de la propagation de flamme au taux de réaction chimique dans une flamme non-prémélangée s'exprime finalement comme :

$$\bar{\omega}_p(\tilde{c}, \tilde{\xi}, S_\xi) = \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \frac{F(\tilde{\xi}, S_\xi) \Theta}{Da_T(\tilde{\xi}, S_\xi) + \Theta} \quad (5.26)$$

Comme ce modèle n'est valable qu'à l'intérieur de la flamme turbulente ($\tilde{c} > c_{min}$), voir figure 5.3, l'effet du nombre de Karlovitz sur la valeur de c_{min} doit être considéré. Pour éviter de rajouter le nombre de Karlovitz comme une entrée de la tabulation, son effet est pris en compte seulement dans la valeur de coupure : c_{min} , qui est donc une fonction du nombre de Karlovitz, voir Eq. (5.9). La contribution de la propagation de flamme au taux de réaction chimique est infiniment petite en dehors de la flamme turbulente, c'est-à-dire, $\tilde{\omega}_p(\tilde{c}, \tilde{\xi}, S_\xi) = 0$ lorsque $\tilde{c} < c_{min}$.

Ce modèle de propagation introduit une quantité Θ , laquelle peut être considérée comme un paramètre de modélisation représentatif du nombre de Damköhler. Nous allons étudier la sensibilité de ce paramètre dans la partie suivante. La vitesse de propagation de la flamme est sensible aux valeurs de ce paramètre. Toutefois, malgré l'existence d'un très grand nombre de modèle de combustion turbulente différent dans la littérature (RANS et LES), tous font intervenir des paramètres qui affectent sensiblement la vitesse de propagation. Le seul moyen d'obtenir un résultat précis est d'utiliser des lois d'Arrhénius et des tailles de mailles cohérentes avec ces lois. Néanmoins, l'utilisation de maillage si raffiné est inenvisageable dans la plupart des configurations pratiques. Ainsi, le paramètre le plus important du modèle représentant le mécanisme de propagation : Θ est clairement identifié. La valeur de coupure c_{min} est également un paramètre dont l'impact est étudié [82, 155, 128] dans la partie suivante.

Le chapitre suivant est dédié au modèle concernant la contribution des processus d'auto-inflammation au taux d'avancement.

5.5 Conclusions

- Un modèle de flammelettes récent basé sur une définition précise des limites spatiales des structures réactives est étendu pour être valable en présence d'auto-inflammation.

-
- Le terme source chimique moyen fait apparaître deux contributions : une de propagation et l'autre d'auto-inflammation.
 - La contribution de propagation fait intervenir deux paramètres. Un représentatif des effets de Karlovitz : c_{min} et l'autre représentatif des effets de Damköhler : Θ .
-

Chapitre 6

Auto-inflammation

6.1 Délais d'auto-allumage et terme source chimique

La caractéristique physique du processus d'auto-inflammation la plus importante au premier ordre est le temps nécessaire pour qu'une particule fluide brûle : c'est le délai d'auto-allumage. Plusieurs définitions de ce délai sont envisageables et présentées dans le chapitre 1. Le délai d'auto-allumage est défini dans ce manuscrit par le temps où la dérivée temporelle du profil du taux d'avancement est maximale, voir figure 3.12. La considération des effets de chimie détaillée et l'évolution précise des taux de production des radicaux ou des espèces intermédiaires est essentielle pour déterminer ce temps d'allumage d'un mélange. Ainsi, les caractéristiques du processus d'auto-inflammation qui seront tabulées sont issues de simulations de réacteurs chimiques homogènes réalisées avec *Cantera* et utilisant un schéma cinétique détaillé (GRI-Mesh 3.0 [165] et Conaire [133]). Les deux types de réacteurs homogènes : parfaitement agité fermé (batch) ou parfaitement agité ouvert (PSR) peuvent être utilisés pour déterminer ce délai d'auto-allumage. Des méthodes de tabulation du taux de réaction dans des conditions d'auto-inflammation ont déjà été utilisées avec succès, voir Ribert et al. [149]. Dans ce travail, c'est directement le terme source chimique $\Omega(c)$ qui est tabulé pour être utilisé dans l'équation bilan pour c et représenter les effets d'auto-allumage. Dans notre cas ce sont les valeurs du délai qui sont tabulées sur une plage de valeur restreinte de la fraction de mélange où l'auto-inflammation est possible. En dehors de cette plage, les délais tendent vers l'infini. Le terme source est également tabulé pour obtenir une échelle caractéristique du dégagement de chaleur cor-

recte mais le délai d'allumage est imposé par l'équation pour le temps de résidence. De plus, l'utilisation directe de $\Omega(c)$ dans l'équation pour c n'est pas possible car cette loi d'Arrhénius conduirait à la fois à des mécanismes d'auto-inflammation et de propagation, or la propagation est déjà prise en compte dans le terme source $\bar{\omega}_p$ (voir chapitre 5).

Ainsi, en plus des valeurs du délai d'auto-allumage, nous tabulerons également le terme source chimique en fonction du temps passé dans le réacteur 0D : $\Omega_i(t_{0D})$. Figure 6.1 présente un exemple de variation temporelle de ce terme source.

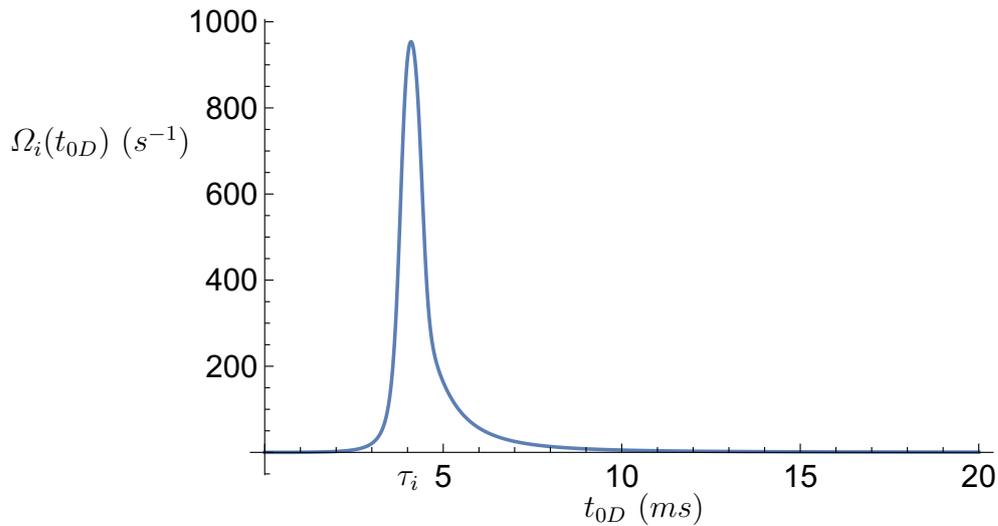


FIGURE 6.1 – Exemple de la variation temporelle de terme source pour la configuration de Cabra CH_4/Air où la fraction de mélange $\xi = \xi_{MR}$.

6.2 Temps de résidence et délai d'auto-allumage

Le temps de résidence est une quantité utilisée habituellement dans les réacteurs chimiques. Le temps de résidence, appelé aussi le temps de séjour, est le temps moyen nécessaire à un élément fluide pour traverser un système. Dans ces réacteurs, il peut donc être comparé directement au délai d'auto-allumage, si celui-ci a été déterminé préalablement dans un réacteur équivalent, pour évaluer le temps restant avant l'auto-inflammation. Toutefois, l'objectif de ce travail est justement d'utiliser le délai d'auto-allumage obtenu dans un réacteur donné pour estimer le temps restant avant l'auto-inflammation dans un écoulement quelconque. La comparaison directe entre le délai d'auto-allumage τ_i et le temps de résidence τ_r pour localiser le point d'allumage a été réalisée dans les travaux

de Gomet et al. [69] et Mouangué et al. [120]. Le champ scalaire “temps de résidence” peut aussi être utilisé pour déterminer le taux de production chimique si celui-ci a été tabulé en fonction du temps : $\Omega_i(t_{0D})$ où t_{0D} est le temps passé dans le réacteur 0D ayant servi à créer la tabulation. Là encore, cela signifie qu’il existe une relation directe entre le temps de résidence dans l’écoulement et le délai d’auto-allumage tabulé à partir du réacteur 0D de telle sorte que $t_{0D} = \tau_r$. Toutefois, cette comparaison n’est possible que si la condition initiale du réacteur 0D est cohérente avec celle de l’écoulement simulé. De plus, si l’écoulement présente des caractéristiques susceptibles de modifier l’état initial au cours du calcul : compression, mélange, pertes thermiques (ce qui est le cas dans la plupart des écoulements pratiques), alors l’équivalence des temps $\tau_r = \tau_{0D}$ n’est plus possible. Dans notre cas, comme la composition des gaz frais n’est pas homogène (flamme non-prémélangée), le délai d’auto-allumage et le taux de réaction seront tabulés aussi en fonction de la fraction de mélange : $\tau_i(\xi)$, $\Omega_i = \Omega_i(\tau_{0D}, \xi)$.

6.3 Temps de résidence et terme source moyen

La contribution moyenne des processus d’auto-allumage au taux de réaction, issue de l’équation (5.14), s’écrit :

$$\bar{W}_i = \int_0^1 \int_0^\infty \rho \Omega_i(\tau_r, \xi) P(\tau_r, \xi) d\tau_r d\xi \quad (6.1)$$

où la quantité $P(\tau_r, \xi)$ est la PDF jointe du temps de résidence τ_r et de la fraction de mélange ξ . Le terme source local $\Omega_i(\tau_r, \xi)$ est introduit bien que le lien avec la tabulation $\Omega_i(\tau_{0D}, \xi)$ ne soit pas encore établi (paragraphe 6.5). En conservant le même niveau d’approximation que les études précédentes [69, 120] : (i) hypothèse d’indépendance statistique entre ces deux variables (c’est-à-dire, $\rho P(\tau_r, \xi) = \rho P(\tau_r)P(\xi)$) et (ii) les fluctuations non-résolues du temps de résidence négligeables, cette PDF jointe peut être estimée par :

$$P(\tau_r) = \delta(\tau_r - \bar{\tau}_r) \quad (6.2)$$

Cette forme de PDF du temps de résidence est la plus simple que nous pouvons considérer, elle correspond à celle d’un PFR, ce qui conduit à

$$\bar{W}_i = \bar{\rho} \int_0^1 \Omega_i(\bar{\tau}_r, \xi) \tilde{P}(\xi) d\xi \quad (6.3)$$

Cette contribution des processus d'auto-allumage au taux de réaction est donc une fonction (i) du temps de résidence moyen, (ii) de la fraction de mélange moyenne, et (iii) de sa variance (ou taux de ségrégation) : $\bar{W}_i(\bar{\tau}_r, \tilde{\xi}, S_\xi)$.

Pour déterminer le temps de résidence moyen d'un écoulement quelconque, l'équation¹ suivante est résolue (voir Equation (1.23)) :

$$\mathcal{L}_F(\bar{\rho\tau}_r) = \bar{\rho} \quad (6.4)$$

Le seul terme source de cette équation est le terme de vieillissement des particules. Toutefois, la résolution de cette équation introduit deux difficultés importantes qui sont maintenant discutées.

La première difficulté concerne la définition des conditions initiales et des conditions aux limites, qui sont nécessaires pour résoudre l'équation (6.4) : Quel âge ont les particules en entrée ? C'est-à-dire, quelle est la valeur de τ_r ? Dans les réacteurs batch la condition initiale est connue si le mélange peut atteindre instantanément l'état initial correspondant : dans ce cas la naissance des particules ($\tau_r = 0$) est associée au début du calcul ($t = 0$). Toutefois, cette condition n'est pas toujours réalisable en pratique. Considérons par exemple le cas d'une machine à compression rapide (RCM), voir les références [169, 170, 18, 19]. Ce type de machine est justement utilisée pour mesurer les délais d'auto-allumage. L'état initial est le point mort haut obtenu en fin de course de compression. Cependant, les réactions chimiques peuvent commencer avant la fin de compression, ce qui modifie significativement la valeur de délai d'allumage mesurée au point mort haut. Ainsi, l'histoire des particules : c'est-à-dire, l'évolution de la composition du mélange pendant la compression doit être prise en compte dans ces cas. Une difficulté analogue est rencontrée dans les configurations nécessitant des conditions aux limites d'entrée : par exemple les PSR, PFR ou un brûleur de gaz. Dans ce dernier cas, la valeur du temps de résidence en entrée est arbitraire. Or, cette valeur peut affecter considérablement la hauteur de flamme et le développement de la combustion si le temps de résidence est comparé directement au délai d'auto-allumage. Une technique pour éviter cette difficulté a déjà été proposée dans les travaux de Enjalbert et al. [55]. Celle proposée ici est présentée dans la partie suivante.

1. Différentes formes de cette équation ont déjà été étudiées dans les références [157, 2, 65, 69, 120, 163].

La seconde difficulté liée à l'utilisation de l'équation de transport de temps de résidence concerne l'histoire des particules avant l'auto-inflammation. C'est-à-dire les différentes conditions de pression, température et composition qu'elles vont rencontrer dans le système avant l'auto-inflammation. Par exemple dans le cas de la RCM cité précédemment, si les réactions commencent avant la fin de la compression, les particules vont subir une variation de pression et température avant l'auto-inflammation. Le délai d'auto-allumage, défini au sens d'un réacteur $0D$, va donc varier alors que le temps de résidence lui ne va faire qu'augmenter avec le temps sans subir l'impact de la compression. La comparaison directe à un instant donné du délai d'auto-allumage et du temps de résidence n'a donc plus de sens et ne pourra plus décrire l'instant d'allumage. De la même manière, dans le cas des flammes non-prémélangées, les particules subissent différentes conditions de température et de composition au cours de leur trajectoires dans la couche de mélange. Ces différentes conditions affectent la capacité d'allumage des mélanges. Le délai d'auto-allumage varie de manière significative, voir la figure 6.2 et ne peut plus être comparé au temps de résidence. Ainsi, l'histoire des particules le long des trajectoires devient importante et doit être prise en compte : c'est l'objectif de la méthode introduite dans le paragraphe suivant.

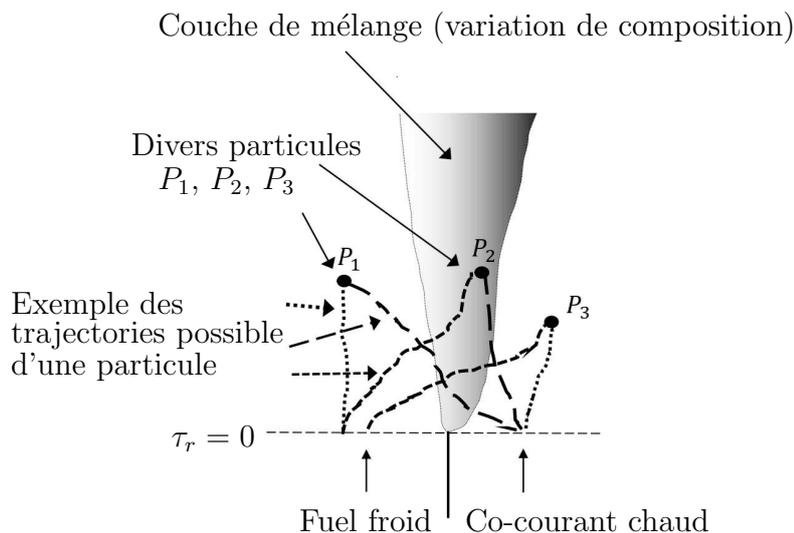


FIGURE 6.2 – Trajectoires typiques observées dans un brûleur de type JHC (Jet-in-Hot-Coflow)

6.4 Temps de résidence normalisé

Pour résoudre les difficultés citées ci-dessus, une nouvelle variable est introduite : le temps de résidence normalisé par le délai d'auto-allumage, $\tau^* = \tau_r/\tau_i$. Le délai d'auto-allumage $\tau_i(\xi)$ dépend de la valeur de la fraction de mélange locale, ce n'est donc pas une constante mais un champ. L'équation de transport obtenue pour ce temps de résidence normalisé moyen est alors :

$$\mathcal{L}_F(\overline{\rho\tau^*}) = \mathcal{L}_F\left(\overline{\rho\frac{\tau_r}{\tau_i}}\right) = \overline{\rho\left(\frac{1}{\tau_i}\right)} - \overline{\tau_r}\mathcal{L}\left(\overline{\frac{\rho}{\tau_i}}\right) - 2\rho D\frac{\partial\tau_r}{\partial x_k}\frac{\partial(1/\tau_i)}{\partial x_k}. \quad (6.5)$$

L'équation (6.5) contient trois termes sources distinctifs. Le premier est la forme normalisée du terme de vieillissement des particules. Les variations locales du délai d'allumage sont donc intégrées au cours du temps lorsque cette équation est résolue. Les deux autres termes représentent les effets croisés d'un point de vue statistique entre le temps de résidence et le délai d'auto-allumage. Ces deux derniers termes sont négligeables dans des conditions homogènes car τ_i est constant. Dans ce travail, ces deux derniers termes sont négligés pour des raisons de simplicité. La forme simplifiée de l'équation de transport du temps de résidence normalisé peut s'écrire alors sous la forme :

$$\mathcal{L}_F(\overline{\rho\tau^*}) = \frac{\overline{\rho}}{T_i}, \quad (6.6)$$

où T_i est l'échelle de temps caractéristique du vieillissement des particules. Cette quantité T_i ou plutôt son inverse est tabulée en fonction de la fraction de mélange moyenne $\tilde{\xi}$ et la ségrégation S_ξ en utilisant la PDF présumée de ξ :

$$\frac{1}{T_i} = \overline{\rho\left(\frac{1}{\tau_i}\right)}/\overline{\rho} = \int_0^1 \frac{1}{\tau_i(\xi)}\tilde{P}(\xi)d\xi \quad (6.7)$$

Notons que l'équation pour le temps de résidence normalisé 6.5 est, une fois simplifiée (equation 6.6), très proche de l'équation 3.46 introduite initialement dans les travaux de Oran et al. [134] puis réutilisée par Clifford et al. [71, 72] et, dans un autre contexte, de Pires [140]. Cette équation qui a été utilisée pour des raisons physiques et pratiques, plutôt par intuition, est maintenant démontrée à partir de l'équation pour le temps de résidence. Les termes négligés sont clairement identifiés.

L'évolution de la valeur du délai d'auto-allumage τ_i en fonction de la fraction de mélange pour la configuration de Cabra CH_4/Air est présentée sur la figure 6.3. Il est

important de noter que les tabulations correspondantes présentent des discontinuités dès lors que le mélange ne peut plus réagir : $\tau_i \rightarrow \infty$. Seules les fractions de mélange proche de la fraction de mélange la plus réactive $\xi_{MR} = 0.00427$ (Most Reactive) sont présentées. Cette valeur minimale du délai d'auto-allumage est de l'ordre de 4 ms .

L'équation (6.6) présente l'avantage, comparativement à l'équation (6.4), d'éviter les deux difficultés présentées dans la section précédente. Tout d'abord, la valeur du temps normalisé en condition limite d'entrée tend presque toujours vers 0 si on considère qu'il n'est pas permis d'injecter un gaz prêt à s'auto-inflammer dans le domaine de calcul ($\tau_r \ll \tau_i$). Cette condition est respectée dans les configurations pratiques non-prémélangées.

De plus, le terme source de cette équation tient compte de "l'histoire" des particules en intégrant les effets du délai d'auto-allumage local au cours de leur trajectoires via le terme source. Ainsi, les particules vieillissent plus rapidement (d'un point de vue normalisé) dans les zones où la valeur du délai d'auto-allumage est petite.

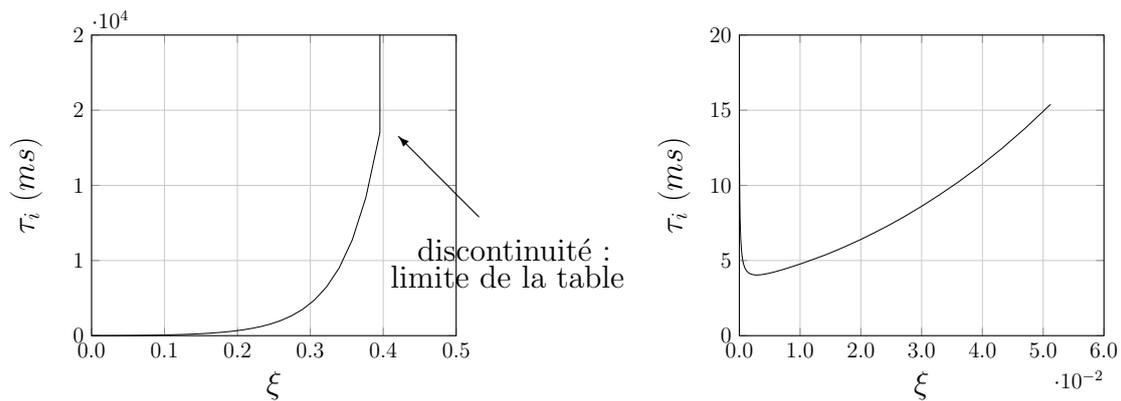


FIGURE 6.3 – Délai d'auto-allumage τ_i (gauche) et son zoom (droite) en fonction de la fraction de mélange ξ .

Un exemple de champ de temps de résidence normalisé $\tilde{\tau}^*$ obtenu en résolvant l'équation (6.6) est présenté sur la figure 6.4 (gauche). La valeur minimum qui est représentée en gris clair est choisi à $\tilde{\tau}^* = 0.3$ pour mettre en évidence les zones où le temps de résidence est du même ordre de grandeur que le délai d'auto-allumage. L'iso-ligne stœchiométrique ξ_{st} (ligne blanche intérieure) et celle de la fraction de mélange la plus réactive ξ_{MR} (ligne blanche extérieure) sont superposées au champ. Ce champ de délai d'auto-allumage normalisé $\tilde{\tau}^*$ est comparé à celui obtenu en résolvant l'équation (6.4) pour différentes valeurs

de conditions aux limites de $\tilde{\tau}_r$ à l'entrée : centre $\tilde{\tau}_r = 0$ en $x = 0$ et droite $\tilde{\tau}_r = 0$ en $x = -10d$ avec d le diamètre du jet central d'entrée. Le champ de τ_r obtenu est ensuite normalisé par le délai d'auto-allumage local $\tau_i(\tilde{\xi}, \tilde{V}_\xi)$ en post-traitement. Lorsque l'équation 6.4 est utilisée le champ obtenu (figure 6.4 centre et droite) présente donc les mêmes discontinuités que la table $\tau_i(\xi)$, voir figure 6.3. De plus, comme expliqué dans la section précédente, les résultats de la résolution de l'équation (6.4) sont très sensibles aux valeurs choisies en condition limite : choisir $\tilde{\tau}_r = 0$ en $x = -10d$ revient à abaisser le champ de temps de résidence de $10d$ par rapport au cas où $\tilde{\tau}_r = 0$ en $x = 0$, ce qui conduit à accrocher la flamme à la lèvre du brûleur. La condition limite de τ_r contrôle donc la position de la flamme si τ_r est issu de l'équation (6.4) puis comparé à τ_i .

L'équation (6.6), quant à elle, ne présente pas cette sensibilité aux conditions aux limites. La condition limite $\tilde{\tau}^* = 0$ appliquée en $x = 0$ ou $x = -10d$ conduit au même résultat. En effet, la valeur du temps de résidence normalisé commence à augmenter seulement dans la couche de mélange, là où la valeur du délai d'auto-allumage est finie.

6.5 Tabulation des propriétés d'auto-allumage

Comme discuté au paragraphe 6.2 la comparaison directe du temps passé dans le réacteur $0D$ permettant de créer la tabulation, au temps de résidence obtenu dans un écoulement quelconque n'est pas possible. En revanche, la comparaison des temps normalisés est une hypothèse beaucoup plus réaliste qui sera analysée en détail par des simulations directes ($0D$, $1D$) au chapitre 8. Ainsi, l'hypothèse de départ pour pouvoir utiliser les tabulations est : $\tau_{0D}^* = \tau^*$ soit $t_{0D} = \tau^* \tau_i$, ce qui permet d'écrire le terme source d'auto-allumage sous la forme :

$$\bar{\omega}_i = \alpha \bar{W}_i = \alpha \bar{\rho} \int_0^1 \Omega_i(\bar{\tau}_{0D}, \xi) \tilde{P}(\xi) d\xi \quad (6.8)$$

Pour calculer cette intégrale, il faut d'abord déterminer le temps de résidence moyen $\bar{\tau}_{0D}$. Or, la résolution de l'équation (6.6) permet d'obtenir la valeur moyenne (Favre) du temps de résidence normalisé $\tilde{\tau}^*$ qui s'écrit aussi :

$$\tilde{\tau}^* = \int_0^1 \int_0^\infty \frac{t_{0D}}{\tau_i(\xi)} \tilde{P}(t_{0D}, \xi) dt_{0D} d\xi, \quad (6.9)$$

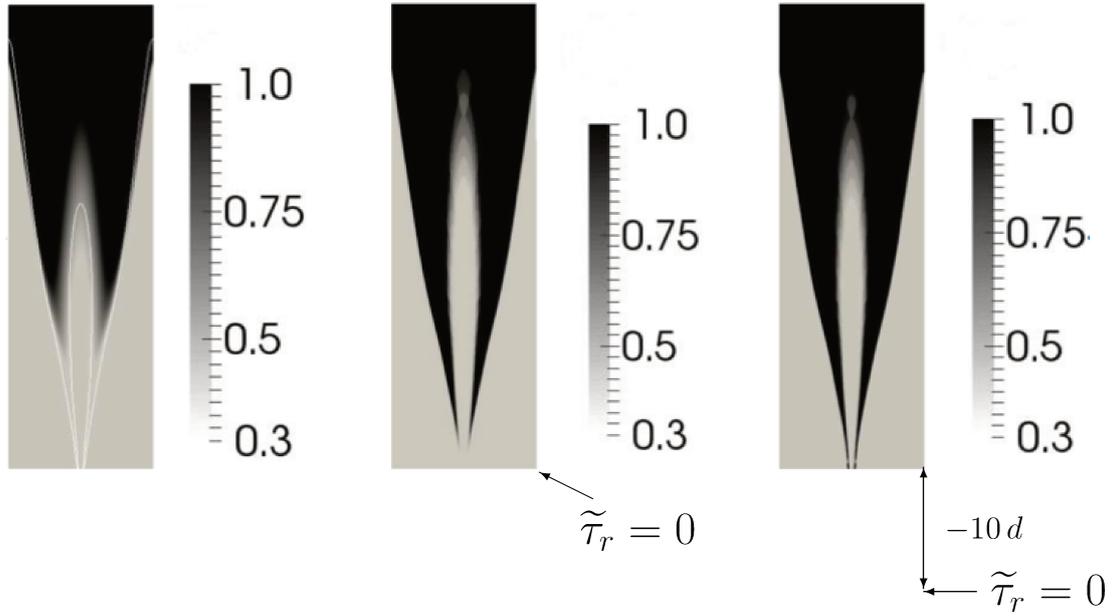


FIGURE 6.4 – Gauche : champ de temps de résidence normalisé moyen $\tilde{\tau}^*$ calculé par l'équation (6.6); Milieu : champ de temps de résidence normalisé moyen déduit de l'équation (6.4); Droite : champ de temps de résidence normalisé moyen issu de l'équation (6.4) avec une augmentation de $10d$ pour la longueur de chaque entrée (d est le diamètre du jet central).

L'hypothèse qui a permis d'obtenir l'équation (6.3), $\tilde{P}(t_{0D}, \xi) = \delta(t_{0D} - \bar{\tau}_{0D})\tilde{P}(\xi)$, permet aussi d'écrire la relation suivante :

$$\tilde{\tau}^* = \bar{\tau}_{0D} \int_0^1 \frac{1}{\tau_i(\xi)} \tilde{P}(\xi) d\xi = \frac{\bar{\tau}_{0D}}{T_i}, \quad (6.10)$$

Par conséquent, la valeur moyenne de temps de résidence $\bar{\tau}_{0D}$ peut être déduite facilement de la valeur moyenne de temps de résidence normalisé $\tilde{\tau}^*$.

Finalement, la contribution des processus d'auto-allumage peut être exprimée sous la forme : $\bar{\omega}_i = \alpha \bar{W}_i(\tilde{\tau}^*, \tilde{\xi}, S_\xi)$ où le poids de la contribution α peut être déduit de l'équation (5.17) avec $\gamma = 0$ et $\tilde{c}_b = 1$: $\alpha = (1 - \tilde{c}) / (1 - \tilde{c}_i)$, où \tilde{c}_i qui est la valeur moyenne de l'avancement dans les gaz en train de s'auto-allumer est aussi tabulé en fonction de $\tilde{\tau}^*$, $\tilde{\xi}$ et S_ξ .

Pour conclure, la contribution des processus d'auto-allumage est exprimée comme :

$$\bar{\omega}_i = (1 - \tilde{c}) I(\tilde{\tau}^*, \tilde{\xi}, S_\xi) \quad (6.11)$$

où la quantité $I(\tilde{\tau}^*, \tilde{\xi}, S_\xi)$ est une fonction tabulée du temps de résidence normalisé moyen $\tilde{\tau}^*$, de la fraction de mélange moyenne $\tilde{\xi}$ et de la ségrégation S_ξ obtenues par des calculs de réacteur chimique :

$$I(\tilde{\tau}^*, \tilde{\xi}, S_\xi) = \frac{\overline{W}_i(\tilde{\tau}^*, \tilde{\xi}, S_\xi)}{1 - \tilde{c}_i(\tilde{\tau}^*, \tilde{\xi}, S_\xi)} \quad (6.12)$$

6.6 Conclusions

- Une équation représentative de "l'avancement des mécanismes d'allumage" a été obtenue à partir de l'équation pour le temps de résidence.
- Cette équation pour le temps de résidence normalisé introduite permet d'éviter les difficultés associées aux conditions limites lorsqu'une équation pour le temps de résidence est utilisée.
- Cette équation permet aussi de tenir compte de l'"histoire" des conditions rencontrées par les particules avant l'auto-inflammation.
- Les données tabulées issues de réacteurs servent à la fois à obtenir le bon délai d'auto-allumage grâce à l'équation pour le temps de résidence normalisé et à obtenir le bon taux de dégagement de chaleur grâce au terme source chimique moyen de l'équation pour \tilde{c} .
- Aucun paramètre de modélisation supplémentaire n'est introduit.

Chapitre 7

Synthèse du modèle de combustion turbulente proposé

Le modèle de combustion turbulente proposé dans ces trois derniers chapitres permet de tenir compte simultanément des trois mécanismes : le mélange d'espèces chimiques, la propagation de flamme et l'auto-inflammation. Les caractéristiques principales du modèle de combustion turbulente sont synthétisées dans la figure 7.1 et les principales hypothèses listées ci-dessous :

- Chimie rapide spatialement : existence de structure de flammelettes finies $\forall \xi$ ($\widetilde{c''\xi''} = 0$).
- Chimie rapide temporellement : existence de structure d'auto-inflammation courte $\forall c$ ($\widetilde{c''\tau_r''} = 0$).
- Séparation spatiale des mécanismes auto-inflammation et propagation.
- Impact de l'auto-inflammation sur les caractéristiques de propagation des flammes négligé.
- Fluctuation de temps de résidence négligées $\tau_r'' = 0$ (les fluctuations de temps de résidence normalisé sont quant à elles prises en compte via V_ξ).

Les données tabulées nécessaires au modèle sont issues à la fois de flammelettes de diffusion pour décrire l'état du mélange, de flammelettes de prémélange pour décrire les caractéristiques de propagation et de réacteur chimique (batch) pour décrire l'auto-inflammation. Les paramètres de modélisation introduits sont issus du modèle de propagation : Θ qui représente les effets du nombre de Damköhler et c_{min} qui représente les

effets du nombre de Karlovitz.

Les résultats de simulations numériques obtenues avec ce modèle sont présentés dans les chapitres suivants.

Processus physiques	Échelle du temps	Variables scalaires
- Mélange d'espèces	- Mélange turbulent	- Fraction de mélange ξ
- Propagation de flamme	$\tau_\xi = C_\xi \tau_T$ - Temps caractéristique de flamme de prémélange	- Taux d'avancement c - Temps de résidence normalisé $\tau^* = \tau_r / \tau_i$
- Auto-inflammation	- Délai d'auto-allumage τ_i	

Données tabulées (en gras)

- Composition moyenne du mélange déterminée par $\tilde{Y}_j = \tilde{c} \tilde{Y}_{j,b} + (1 - \tilde{c}) \tilde{Y}_{j,u}$
 - Réactifs frais (**mélange pur**)
 $\tilde{Y}_{j,u} = \int_0^1 Y_{j,u}(\xi^*) \tilde{P}(\xi^*; \tilde{\xi}, \tilde{V}_\xi) d\xi^*$ (Équation (4.13))
 - Produits brûlés (**flammes de diffusion laminaires 1D**)
 $\tilde{Y}_{j,b} = \int_0^1 Y_{j,b}(\xi^*) \tilde{P}(\xi^*; \tilde{\xi}, \tilde{V}_\xi) d\xi^*$ (Équation (4.12))
- Caractéristiques d'auto-inflammation (**réacteurs homogènes 0D**)
 - Échelle caractéristique du taux de production de temps de résidence normalisé
 $\mathbf{1}/\mathbf{T}_i(\tilde{\xi}, S_\xi) = \int_0^1 (1/\tau_i(\xi)) \tilde{P}(\xi) d\xi$ (Équation (6.7))
 - Contribution normalisée d'auto-inflammation au taux de réaction chimique moyen
 $\mathbf{I}(\tilde{\tau}^*, \tilde{\xi}, S_\xi) = \overline{\mathbf{W}}_i(\tilde{\tau}^*, \tilde{\xi}, S_\xi) / (1 - \tilde{c}_i(\tilde{\tau}^*, \tilde{\xi}, S_\xi))$ (Équation (6.12))
- Caractéristiques de propagation (**flammes laminaires de prémélange 1D**)
 - Temps chimique impliqué dans la définition de nombre Damköhler turbulent $\mathbf{Da}_T = \tau_T / \tau_c$
 $\tau_c(\tilde{\xi}, S_\xi) = \int_0^1 \tau_f(\xi^*) \tilde{P}(\xi^*; \tilde{\xi}, \tilde{V}_\xi) d\xi^*$ avec $\tau_f(\xi^*)$ le temps caractéristique de la flamme de prémélange
 - Contribution normalisée de la flamme de prémélange au taux de réaction chimique moyen
 $\mathbf{F}(\tilde{\xi}, S_\xi) = \int_0^1 F \tilde{P}(\xi^*; \tilde{\xi}, \tilde{V}_\xi) d\xi^*$ avec l'expression de F donnée par l'équation (5.24)

Équations de transport des scalaires

- Fraction de mélange moyenne et sa variance (pas de quantités tabulées)
 - Équation (4.2) : $\mathcal{L}_F(\bar{\rho}\tilde{\xi}) = 0$
 - Équation (4.4) : $\mathcal{L}_F(\bar{\rho}\tilde{V}_\xi) = 2\bar{\rho}D_T(\partial\tilde{\xi}/\partial x_k)(\partial\tilde{\xi}/\partial x_k) - 2\bar{\rho}\tilde{V}_\xi/\tau_\xi$
- Taux d'avancement moyen (quantités tabulées : $\mathbf{I} = \overline{\mathbf{W}}_i/(1 - \tilde{c}_i)$, \mathbf{F} , et $D\mathbf{a}_T = \tau_T/\tau_c$)
 - Équation (5.1) : $\mathcal{L}_F(\bar{\rho}\tilde{c}) = \Theta\mathbf{F}(\tilde{\xi}, S_\xi)\tilde{c}(1 - \tilde{c})/(\Theta + D\mathbf{a}_T) + (1 - \tilde{c})\mathbf{I}(\tilde{\tau}^*, \tilde{\xi}, S_\xi)$
- Temps de résidence normalisé moyen (une seule quantité tabulée : $\mathbf{1}/\mathbf{T}_i$)
 - Équation (6.6) : $\mathcal{L}_F(\bar{\rho}\tilde{\tau}^*) = \bar{\rho}(\mathbf{1}/\mathbf{T}_i)$

FIGURE 7.1 – Description globale du modèle. Haut : les processus physiques, les échelles du temps caractéristique et les variables associées. Milieu : les quantités tabulées et les paramètres déterminés notant en gras. Bas : les quatre équations de transport des scalaires aux lesquelles le modèle de combustion turbulente est basé.

Troisième partie

Validation et simulations numériques

Chapitre 8

Validation de l'équation pour le temps de résidence normalisé

Le modèle proposé dans la partie précédente a été développé directement pour être utilisé en RANS. Les résultats obtenus seront présentés au chapitre 9. Son application à la LES est un travail en cours dont les premiers résultats seront présentés au chapitre 10.

Ce chapitre consiste à valider l'équation introduite pour le temps de résidence normalisé à partir de simulation numérique directe (DNS). Bien que l'objectif soit de valider cette équation dans un cas turbulent $3D$, les résultats présentés ici concernent des configurations très simplifiées mettant en évidence l'intérêt de cette variable. Les configurations étudiées sont un réacteur homogène soumis à une compression pendant l'auto-inflammation et une couche de diffusion s'auto-allumant. Ces configurations ont été choisies car dans les deux cas, le mélange subit, par un autre mécanisme que les réactions chimiques, des variations de composition et de température avant l'auto-inflammation.

Le solveur DNS *ASPHODELE* [16], voir annexe, est utilisé pour la couche de diffusion et *Cantera* pour le réacteur subissant une compression. Pour bien comprendre le sens physique d'une équation pour le temps de résidence lorsqu'elle est appliquée à un problème de combustion, une analogie avec les méthodes "level-set" est tout d'abord présentée.

8.1 Analogie temps de résidence/“level-set”

La méthode “level-set” appliquée en combustion (Équation G [185]) permet de suivre un front (interface définie spatialement) transporté par l'écoulement et ayant une vitesse propre de propagation S_F : équation (3.35).

L'auto-inflammation, n'est pas un mécanisme propagatif, mais une explosion (combustion d'un volume homogène) décrit par une évolution temporelle. Néanmoins, lorsque le mélange est hétérogène, l'auto-inflammation aura lieu d'abord dans des zones très localisées spatialement correspondant au mélange le plus réactif puis successivement dans les zones un peu moins réactives de telle sorte que la zone de réaction semble se propager, voir par exemple pour plus de détails les études HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) dans les références [171, 6, 4, 1]. On parle alors de front d'auto-inflammation. Dans ces cas hétérogènes, le délai d'auto-allumage $\tau_i(\mathbf{x}, t)$ défini par rapport à la condition initiale du système (comme dans un réacteur $0D$, voir la section 3.15) est un champ scalaire dont l'iso-surface $\tau_i(\mathbf{x}, t) = t$ est le front d'auto-allumage permettant de séparer spatialement les gaz frais des gaz brûlés. La vitesse de propagation de ce front d'auto-allumage, notée S_I , est obtenue par l'inverse du module du gradient de délai d'auto-allumage [189] :

$$S_I = \frac{1}{\|\nabla\tau_i\|} \quad (8.1)$$

Par analogie à l'équation G (3.35), une fonction de niveau (“level-set”) H représentant la propagation du front d'auto-allumage est introduite :

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla H = S_I \|\nabla H\| \quad (8.2)$$

La fonction H n'est pas définie ici comme une fonction de distance (distance au front) mais comme une fonction du temps (temps restant avant le passage du front) de la façon suivante :

$$\begin{cases} H(\mathbf{x}, t) = t - \tau_i(\mathbf{x}, t) < 0 & \text{dans les gaz frais} \\ H(\mathbf{x}, t) = t - \tau_i(\mathbf{x}, t) > 0 & \text{dans les gaz brûlés} \\ H(\mathbf{x}, t) = 0 & \text{au front d'auto-inflammation} \end{cases} \quad (8.3)$$

La définition de H , équation (8.3), met en évidence la relation directe entre la norme du gradient de délai d'auto-allumage et la norme du gradient de la fonction H :

$$\|\nabla\tau_i\| = \|\nabla H\| \quad (8.4)$$

Ainsi, l'équation (8.2) devient :

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla H = 1 \quad (8.5)$$

Cette équation (8.5) permet de suivre un front d'auto-allumage dans un milieu hétérogène ($\|\nabla\tau_i\| \neq 0$), mais peut également décrire l'allumage d'un mélange homogène ($\|\nabla\tau_i\| = 0$) où H est alors une séparation temporelle (on ne peut plus parler d'interface) des gaz frais et des gaz brûlés. On peut constater que l'équation (8.5) présente un terme source identique à celui de l'équation pour le temps de résidence, représentatif du vieillissement des particules fluides. Ainsi, l'équation (8.5) permet de démontrer que le temps de résidence lorsqu'il est appliqué à un problème de combustion peut être vu comme une fonction "level-set" décrivant la position d'un front d'auto-allumage.

La principale différence entre l'équation (8.5) et celle pour le temps de résidence est le terme de diffusion qui n'est pas dans l'équation H . Toutefois, l'équation (8.1) de la vitesse de propagation de l'iso-ligne $H = 0$ ne tient pas compte du mécanisme de diffusion susceptible de modifier la position de l'iso-ligne. Imaginons l'exemple suivant pour mettre en évidence ce défaut : Deux prémélanges de même composition et température initiale issus de deux réacteurs différents sont mis en contact après avoir chacun évolué un temps différent dans leur réacteur respectif. Compte tenu de la définition choisie pour τ_i , ces deux mélanges ont le même délai d'auto-allumage ($\tau_i = 20 \text{ ms}$) puisque la condition initiale de chaque réacteur est la même. Le mélange 1 et le mélange 2 sont restés dans leur réacteur respectif 15 ms ($H = -5 \text{ ms}$) et 10 ms ($H = -10 \text{ ms}$) avant d'être mis en contact. Si le coefficient de diffusion est suffisamment grand, une couche de diffusion s'établit entre les deux gaz avant l'auto-inflammation. Ainsi, la zone où le mélange est le plus réactif va être réduite par dilution avec le gaz moins réactif. Toutefois, la résolution de l'équation (8.5), sans terme de diffusion, ne fera pas apparaître de couche de diffusion et l'allumage aurait lieu successivement dans les deux zones initiales où $H = -5 \text{ ms}$ et $H = -10 \text{ ms}$.

Ainsi, la vitesse de déplacement de l'iso-ligne $H = 0$ doit être corrigée pour tenir compte du mécanisme de diffusion de H . De plus, si les variations de masse volumique sont prises en compte, l'équation (8.5) conduit exactement à l'équation pour le temps de résidence :

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla H - \nabla \cdot (\rho D \nabla H) = \rho \quad (8.6)$$

La résolution de cette équation conduit aux mêmes difficultés que celle pour le temps de résidence : la solution obtenue est contrôlée par les conditions initiales et aux limites choisies. Prenons par exemple l'exemple suivant : Deux mélanges de mêmes compositions mais de température différente sont mis en contact au temps $t = 0$. Le champ de H est donc initialisé par deux valeurs négatives correspondant aux gaz considérés :

$$H(x_1 < 0, t = 0) = -\tau_{i1} \quad \text{et} \quad H(x_1 > 0, t = 0) = -\tau_{i2} \quad (8.7)$$

avec $\tau_{i1} < \tau_{i2}$. Lorsque le temps caractéristique de diffusion est suffisamment long devant les délais d'auto-allumage, c'est-à-dire lorsque le mécanisme de diffusion est négligeable devant l'auto-inflammation, alors l'emballement thermique a lieu d'abord dans le mélange 1, le plus réactif, à $t = \tau_{i1}$. Ce mélange n'a pas subi les effets de mélange avec le gaz 2. Ainsi, la résolution de l'équation (8.6) conduit à $H = 0$ en $t = \tau_{i1}$, ce qui est parfaitement exact. Néanmoins, cette solution est définie par la condition initiale choisie $H(\mathbf{x}, 0) = -\tau_{i1}$. De plus, dès lors que le temps de diffusion n'est plus négligeable, alors la température du mélange le plus réactif est susceptible de diminuer modifiant ainsi l'instant d'auto-allumage. Dans ce cas, la résolution de l'équation (8.6) ne donnera pas le bon résultat. L'historique de température pendant la phase de diffusion a un effet non négligeable sur le temps d'allumage. Ce cas sera étudié en détail à la section 8.3. Afin d'éviter ce problème, comme pour le temps de résidence, nous introduisons une quantité normalisée :

$$H^*(\mathbf{x}, t) = \frac{H(\mathbf{x}, t)}{\tau_i(\mathbf{x}, t)} \quad (8.8)$$

En utilisant équation (8.4) l'équation pour cette nouvelle quantité s'écrit comme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial H^*}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla H^* - \nabla (D \nabla H^*) &= \frac{1}{\tau_i} - \frac{H^*}{\tau_i} \left[\frac{\partial \tau_i}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \tau_i - \nabla (D \nabla \tau_i) \right] \\ &+ DH^* \frac{\nabla \rho}{\rho} \cdot \frac{\nabla \tau_i}{\tau_i} + D \nabla H^* \cdot \frac{\nabla \rho}{\rho} \\ &+ 2D \nabla H^* \cdot \frac{\nabla \tau_i}{\tau_i} \end{aligned} \quad (8.9)$$

Les corrélations sont négligées dans un premier temps pour étudier la forme simple de l'équation suivante :

$$\frac{\partial H^*}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla H^* - \nabla (D \nabla H^*) = \frac{1}{\tau_i} \quad (8.10)$$

Grâce à cette nouvelle définition de la fonction "level-set", la condition initiale est : $H^* = -1$ dès lors que le mélange initial est loin des conditions d'allumage : $t \ll \tau_i(\mathbf{x}, t)$. Ainsi,

dans l'exemple vu ci-dessus où la diffusion est négligeable, la solution de l'équation (8.10) conduit au même résultat parfaitement exact mais la solution n'est plus pilotée par les conditions initiales. Elle dépend désormais du délai d'auto-allumage $\tau_i(\mathbf{x}, t)$ local. L'intérêt de cette équation (8.10) est maintenant démontré dans deux configurations simples où les conditions locales de température sont susceptibles de varier avant l'auto-inflammation soit par effet de diffusion soit par compression.

8.2 Application à la compression d'un mélange

Le cas de la compression rapide d'un mélange (CH_4/Air) dans un réacteur homogène est maintenant considéré, voir figure 8.1. Dans le cas où la compression est infiniment rapide devant le temps d'auto-allumage, seul l'état de fin de compression est nécessaire pour déterminer le temps d'allumage du mélange. Dans ce cas, la résolution de l'équation (8.10)

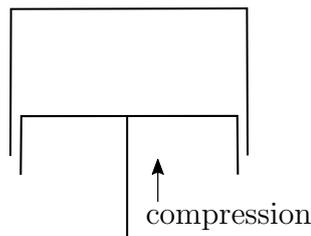


FIGURE 8.1 – Schéma représentatif d'un réacteur subissant une compression.

permet bien de retrouver le moment exact de l'auto-allumage, $H^* = 0$, dès lors que le délai d'auto-allumage $\tau_i(T_u)$ est connu. En revanche, dans le cas où le temps de compression n'est plus négligeable, alors les conditions de pression et température intermédiaires, pendant la compression, jouent un rôle non négligeable sur le moment d'allumage. Les réactions chimiques débutent avant la fin de la compression. Un exemple des évolutions de pression et de température dans ce réacteur est présenté sur la figure 8.2. Les profils rouges et verts sont respectivement obtenus avec ou sans considération des réactions chimiques. Dans ce cas, avant de résoudre l'équation (8.10), il est nécessaire de calculer et stocker préalablement les différents délais d'auto-allumage correspondants à tous les états "gaz frais" rencontrés pendant la compression. En utilisant *Cantera*, la compression du mélange est réalisée en annulant d'abord toutes les réactions chimiques. Ce résultat fournit donc les

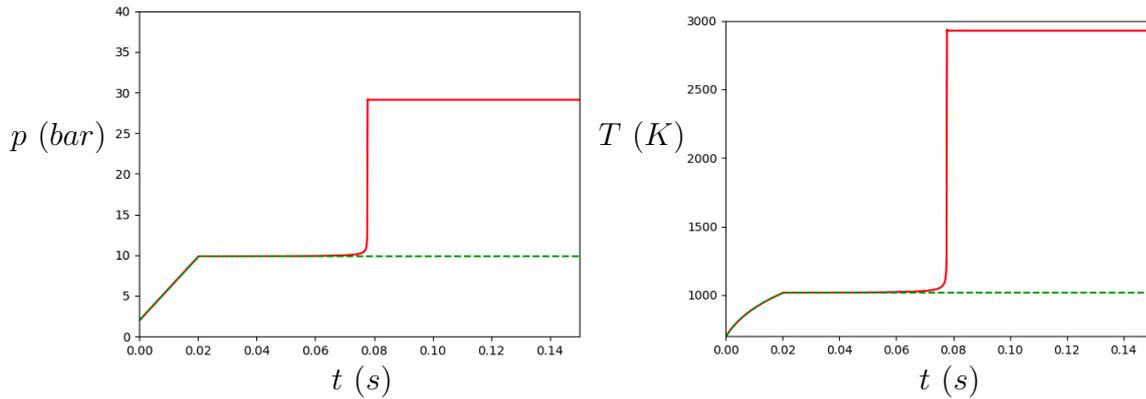


FIGURE 8.2 – Exemple des évolutions de pression (gauche) et de température (droite) dans un réacteur subissant une compression. Profils rouges et verts sont respectivement obtenus avec ou sans considération des réactions chimiques.

états “gaz frais” qui correspondent à un certain couple Pression (P_u), Température (T_u), voir courbes vertes de la figure 8.2. Dans un second temps, des simulations de réacteurs homogènes sans compression mais en tenant compte des réactions chimiques à chacune des conditions “gaz frais” obtenues sont réalisées pour déterminer les délais d’auto-allumage $\tau_i(T_u)$, voir figure 8.3. Ces délais sont stockés dans les tables et utilisés pour résoudre l’équation (8.10) lorsque le mélange subit une compression. Le résultat est présenté sur la figure 8.4 et comparé au résultat d’un cas où le schéma cinétique détaillé est utilisé pendant la compression.

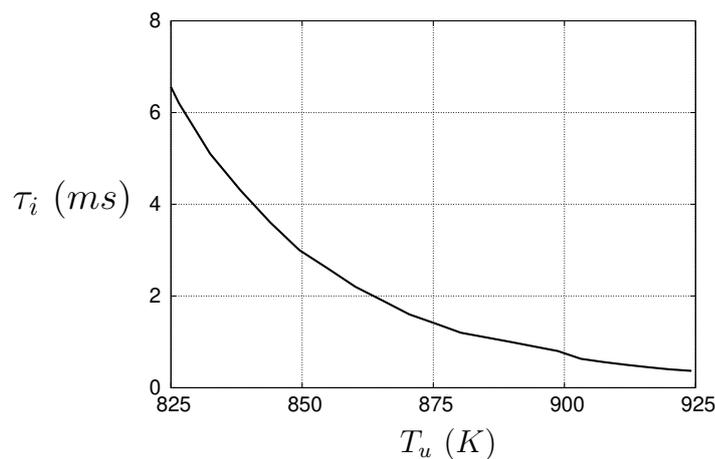


FIGURE 8.3 – Délai d’auto-allumage en fonction de la température maximale des gaz frais $\tau_i(T_u)$.

Le profil de température du haut de la figure 8.4 est considéré comme le résultat de

référence (cinétique chimique détaillée) où l'augmentation brusque de température correspond à l'auto-inflammation. Le profil de H^* est négatif dans les gaz frais ($H^* = -1$) et reste constant tant que le mélange n'est pas réactif, c'est-à-dire que le délai d'auto-allumage est infini ($\tau_i \rightarrow \infty$). Puis, H^* augmente ensuite progressivement pendant la compression lorsque le délai d'auto-allumage est suffisamment petit (valeur finie). Après la fin de la compression, le profil de H^* devient une droite car le délai d'auto-allumage est à nouveau constant car la condition "gaz frais" (T_u) ne varie pas. Enfin, H^* devient nul au moment exact de l'allumage obtenu avec une cinétique chimique détaillée. Ainsi, l'utilisation de l'équation (8.10) permet de décrire parfaitement l'auto-inflammation lorsqu'il y a une évolution de la condition locale des gaz frais imposée par une compression. L'effet d'historique de compression sur les réactions chimiques est bien pris en compte.

8.3 Application à une couche de diffusion

L'équation (8.10) est maintenant appliquée à une couche de diffusion 1D entre deux mélanges de température différente. Les résultats présentés ci-dessous sont obtenus par le solveur DNS bas Mach *ASPHODELE*. Les résultats de référence issus de la résolution des équations pour l'enthalpie sensible et les fractions massiques des espèces chimiques associée à une réaction globale (cas 1) sont présentés sur la figure 8.6, puis ceux associés à une cinétique chimique détaillée (cas 2) sur la figure 8.8. Les nombres de Lewis sont considérés unitaires pour toutes les espèces afin d'éviter les effets de diffusion différentielle dans cette première évaluation. Les délais d'auto-allumage sont calculés en utilisant des réacteurs homogènes et stockés en fonction de la fraction de mélange $\tau_i(\xi)$, voir figure 8.5. Les deux gaz (H_2/Air stœchiométrique) pour le cas 1 (loi globale) ont les propriétés suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{llll} \text{gaz 1 :} & \xi = 1 & T_1 = 690 \text{ K} & \tau_{i1} = 120 \text{ ms} \\ \text{gaz 2 :} & \xi = 0 & T_2 = 650 \text{ K} & \tau_{i2} = 274 \text{ ms} \end{array} \right. \quad (8.11)$$

La figure 8.5 montre les profils de délai d'auto-allumage en fonction de la fraction de mélange.

Pour évaluer le modèle, l'équation (8.10) est résolue en même temps qu'une équation pour la fraction de mélange. Les figures 8.6 et 8.8 présentent les résultats obtenus au

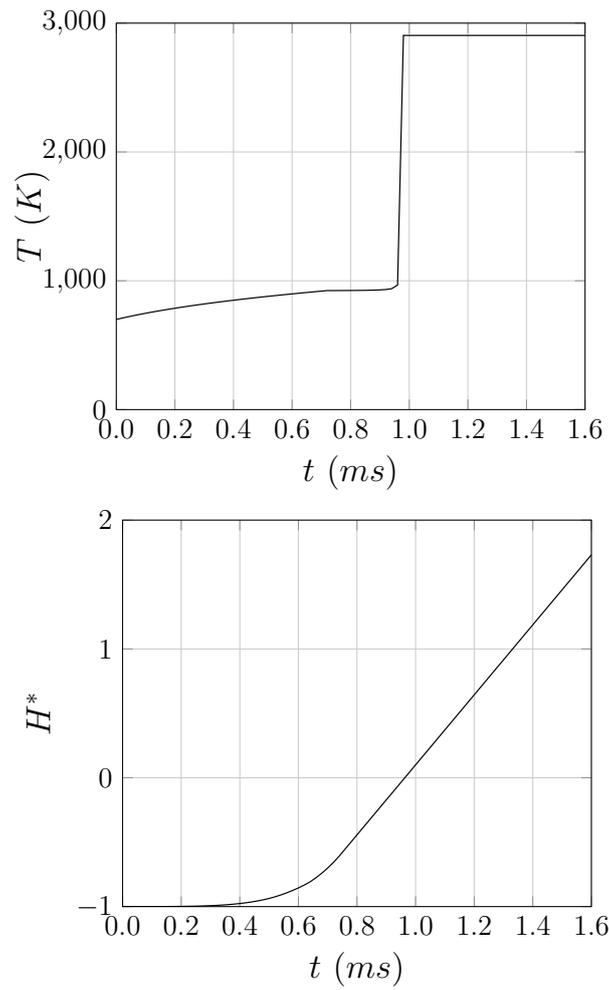


FIGURE 8.4 – Haut : Profil de température temporelle issue d'un calcul utilisant un schéma chimique détaillé. Bas : "Level-set" fonction H^* en fonction du temps.

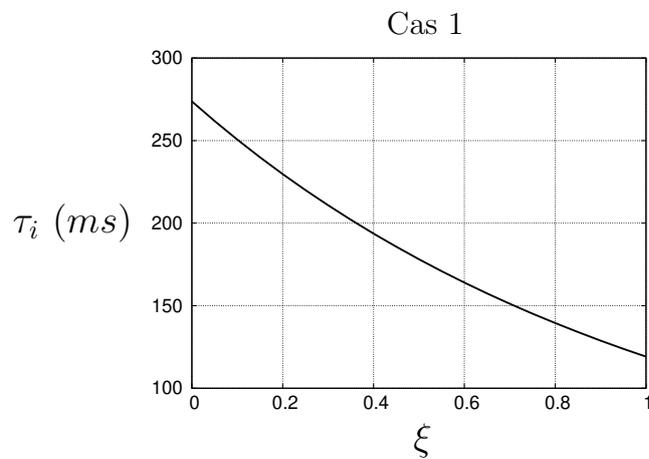


FIGURE 8.5 – Délai d'auto-allumage en fonction de fraction de mélange $\tau_i(\xi)$.

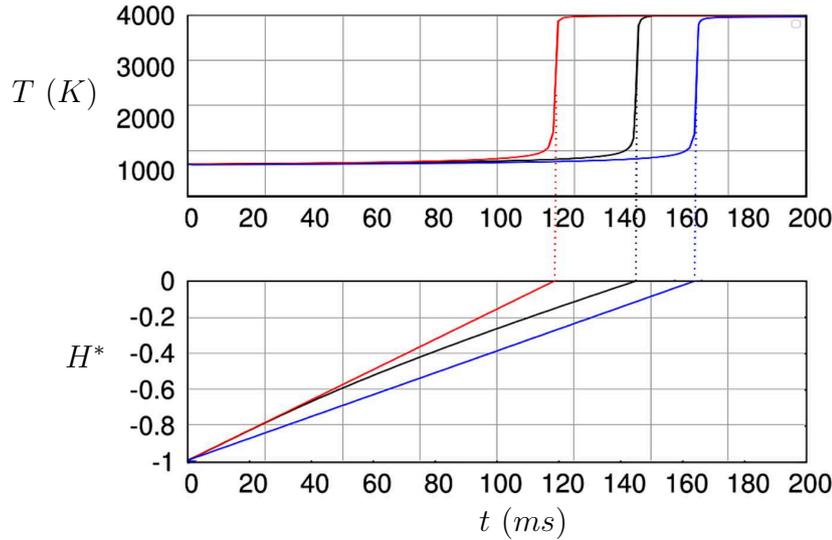


FIGURE 8.6 – Haut : profil temporel de température obtenu avec une loi d’Arrhénius, Bas : “Level-set” fonction H^* en fonction du temps. Lignes rouges : le cas où diffusion négligeable, lignes bleues : le cas où diffusion infiniment rapide, lignes noires : le cas où l’auto-inflammation s’apparaît pendant les processus de mélange.

point le plus réactif de la couche de diffusion ($x = 0$) : le premier point à s’auto-allumer. Les évolutions temporelles de température pour les cas de référence sont tracées sur les figures du haut et les évolutions temporelles de H^* obtenues à ces points sont tracées sur les figures du bas. Les différents cas suivants sont simulés : (i) diffusion négligeable (ligne rouge), c’est-à-dire, les deux mélanges restent parfaitement séparés et l’auto-inflammation est observée dès que $t = \tau_{i1}$, (ii) diffusion infiniment rapide (ligne bleue), c’est-à-dire, un mélange homogène est atteint instantanément à $\xi = 0,5825$ et l’auto-inflammation est obtenue pour $t = \tau_i(0,5825)$, (iii) les réactions débutent pendant le processus de mélange (ligne noire). Les instants correspondants à $H^* = 0$ dans ces trois cas correspondent parfaitement à l’augmentation de température. Comme attendu, les deux profils de H^* rouge et bleu sont des droites car ils correspondent aux cas où le délai d’auto-allumage est constant pendant la simulation. La fraction de mélange est également constante à cette position. En revanche, le profil intermédiaire (noir) de H^* suit d’abord le cas où la diffusion est négligeable (rouge) lorsque $t < 40$ ms puis diverge progressivement lorsque les deux gaz se mélangent. Le cas intermédiaire montre que la résolution de l’équation (8.10) permet de tenir compte de l’historique du mélange des espèces.

Afin de tenir compte des effets de cinétique chimique détaillé, le schéma de Ó Conaire

[133] est maintenant utilisé pour le cas de référence. De plus, les deux mélanges considérés (H_2/Air) sont toujours de même composition mais l'écart de température permet d'obtenir un écart des délais d'auto-allumage très important. Les états de ces mélanges sont décrits par la fraction de mélange :

$$\left\{ \begin{array}{lll} \text{gaz 1 :} & \xi = 1 & T_1 = 900 \text{ K} \quad \tau_{i1} = 35 \text{ ms} \\ \text{gaz 2 :} & \xi = 0 & T_2 = 770 \text{ K} \quad \tau_{i2} = 23193 \text{ ms} \end{array} \right. \quad (8.12)$$

La figure 8.7 montre les profils de délai d'auto-allumage en fonction de la fraction de mélange.

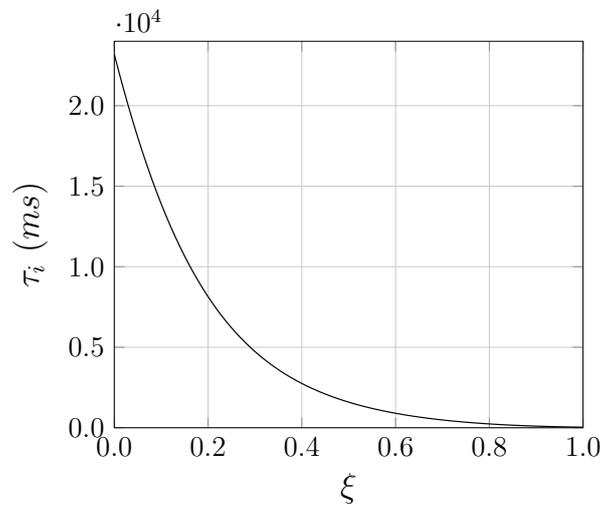


FIGURE 8.7 – Délai d'auto-allumage en fonction de fraction de mélange $\tau_i(\xi)$ en utilisant un schéma cinétique détaillé.

La figure 8.8 présente l'évolution temporelle de température (cas de référence) et de la fonction H^* en $x = 0$ pour les différents cas suivants : (i) diffusion négligeable (ligne violette), (ii) diffusion infiniment rapide (ligne verte), (iii) différentes valeurs du coefficient de diffusion correspondant aux cas où l'auto-inflammation apparaît pendant les processus de mélange (lignes rouge, bleu et noir). Les instants où $H^* = 0$ correspondent parfaitement aux instants où l'augmentation brusque de température est observée sur les cas de référence. On observe que l'augmentation de H^* suit d'abord l'évolution correspondant au mélange le plus réactif (diffusion négligeable) puis H^* augmente moins car τ_i augmente sous l'effet de la diffusion : la fraction de mélange diminue. Ensuite, H^* diminue sous l'effet de diffusion avec un mélange dont la valeur de H^* est plus faible. Enfin, le profil de H^* devient une droite dès lors que le processus de mélange est terminé.

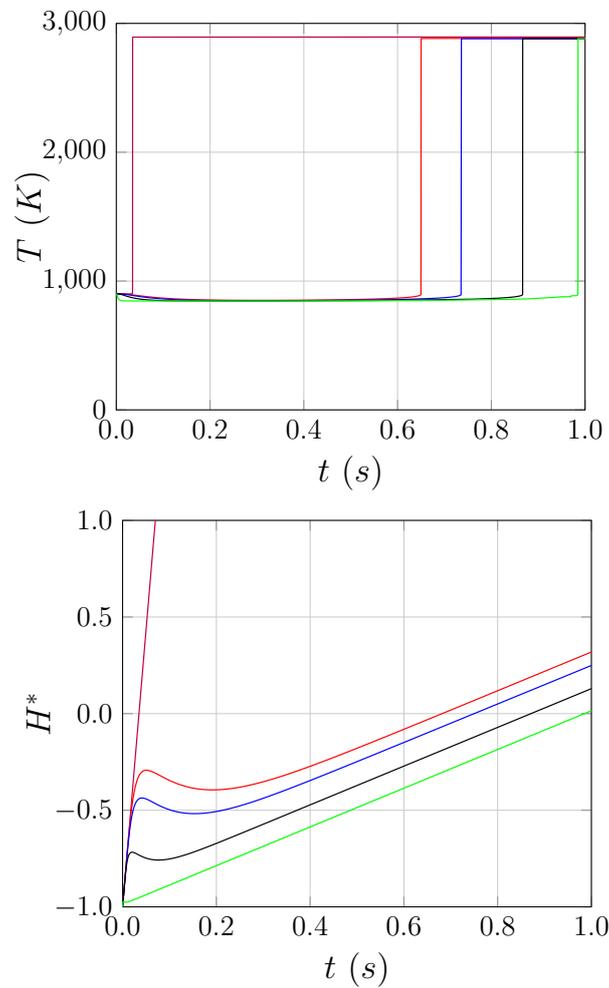


FIGURE 8.8 – Haut : profil temporel de température obtenu avec un schéma cinétique détaillé, Bas : “Level-set” fonction H^* en fonction du temps. Lignes violettes : le cas où diffusion négligeable, lignes vertes : le cas où diffusion infiniment rapide, lignes d’autres couleurs : les cas où l’auto-inflammation apparaît pendant les processus de mélange.

8.4 Conclusions et perspectives

Dans ce chapitre, j'ai montré que le temps de résidence n'était rien d'autre qu'une fonction "level-set" permettant de séparer les gaz frais des gaz brûlés. Cette séparation est spatiale lorsque le milieu est hétérogène mais peut aussi décrire la séparation temporelle entre les gaz frais et les gaz brûlés lorsque le milieu est homogène. La fonction introduite est un temps normalisé dont la résolution de l'équation permet de tenir compte des effets d'historique de composition et de température qui modifie l'instant d'allumage du mélange. Les deux cas tests réalisés ont permis de valider l'équation lorsque le mélange subit une compression ou une dilution pendant la phase d'allumage. Ainsi, l'utilisation de cette équation associée à une tabulation des données de délais d'auto-allumage pour les conditions correspondants aux "gaz frais" permet de retrouver le même instant d'allumage que celui obtenu en considérant une cinétique chimique détaillée. Ces validations mériteraient maintenant d'être complétées par des cas tests plus complexes comme des cas où l'auto-inflammation a lieu dans la couche de diffusion, par des cas tests $3D$, pour différents mélanges et combustibles. Enfin, le couplage avec le mécanisme de propagation doit aussi être analysé plus en détails par exemple en couplant cette équation H^* à une équation G classique et en étudiant l'impact de l'auto-inflammation sur la propagation.

Chapitre 9

Application à une flamme de type JHC (RANS)

9.1 Présentation à la configuration étudiée

La configuration Cabra [30, 31] est un brûleur de référence pour l'étude des flammes de type JHC. Le schéma représentatif de l'installation et les conditions expérimentales lorsque le méthane est utilisé sont respectivement présentés sur la figure 4.3 et dans le tableau 4.2. Le modèle sera aussi validé pour un cas utilisant l'hydrogène. Les conditions expérimentales correspondantes sont présentées dans le tableau 9.2. Les résultats numériques correspondants à ce chapitre ont été présentés en congrès [182] et publiés [183]. Une image expérimentale (chimie luminescence) d'une flamme décollée pour le cas CH_4/Air est présentée sur la figure 9.1 [31]. Les résultats présentés dans ce chapitre

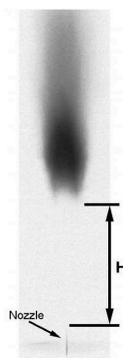


FIGURE 9.1 – Image expérimentale d'une flamme décollée pour le cas CH_4/Air [31].

sont issus des simulations numériques en utilisant un logiciel CFD : *Code_Saturne*, voir annexe.

9.2 Comportement du modèle de propagation

Les résultats présentés dans ce paragraphe sont les résultats numériques lorsque seul le mécanisme de propagation d'un front de flamme est considéré, c'est-à-dire, $\bar{\omega}_i = 0$ dans l'équation (5.14). Le terme source du taux d'avancement moyen est donc calculé par l'équation (5.26). L'approximation de flammes minces permet d'utiliser les deux tables, celle pour les gaz frais et celle pour les gaz brûlés, présentées au chapitre 4, et une PDF quasiment bimodale (extension du modèle BCL) appliquée au taux d'avancement c , voir le chapitre 5. La ségrégation du taux d'avancement $S_c = \tilde{V}_c / (\tilde{c}(1 - \tilde{c}))$ est proche de l'unité dans ce cas mais modélisée par l'expression (5.21). Comme discuté au chapitre 5, la corrélation croisée entre le taux d'avancement et la fraction de mélange est négligée pour des raisons de simplicité, c'est-à-dire, $\tilde{c}\tilde{\xi} - \tilde{c}\tilde{\xi} = 0$. Cette hypothèse implique que les extinctions pour des valeurs extrêmes de la richesse qui affectent le plus ces corrélations ont peu d'effet sur le résultat global puisqu'elles sont localisées sur les bords des flammes.

Comme seul le mécanisme de propagation est considéré ici, il est nécessaire d'allumer le mélange des gaz frais dans les simulations numériques. J'ai choisi ici d'initialiser tout le domaine de calcul par des gaz brûlés¹. J'aurai pu aussi utiliser un terme source représentatif d'une étincelle (volume parfaitement catalytique), voir plus de détails dans la référence [7], mais la stabilisation de la flamme est très dépendante de la position de l'étincelle.

Les champs de température moyenne pour la configuration de Cabra [30, 31] présentés sur la figure 9.2 sont obtenus respectivement sans (gauche) et avec (milieu et droite) la considération de l'équation de transport du taux d'avancement moyen. Si l'équation pour le taux d'avancement n'est pas résolue, il faut imposer, une valeur de l'avancement qui est soit $\tilde{c} = 0$, si l'écoulement n'est pas réactif, soit $\tilde{c} = 1$, si l'état brûlé est atteint infiniment rapidement partout. Les données tabulées utilisées sont alors issues des tables de mélange pur si $\tilde{c} = 0$ et des tables de flamme de diffusion si $\tilde{c} = 1$. Si l'équation pour \tilde{c} est résolue

1. Les compositions des gaz brûlés sont déterminées à partir de l'équation (4.12).

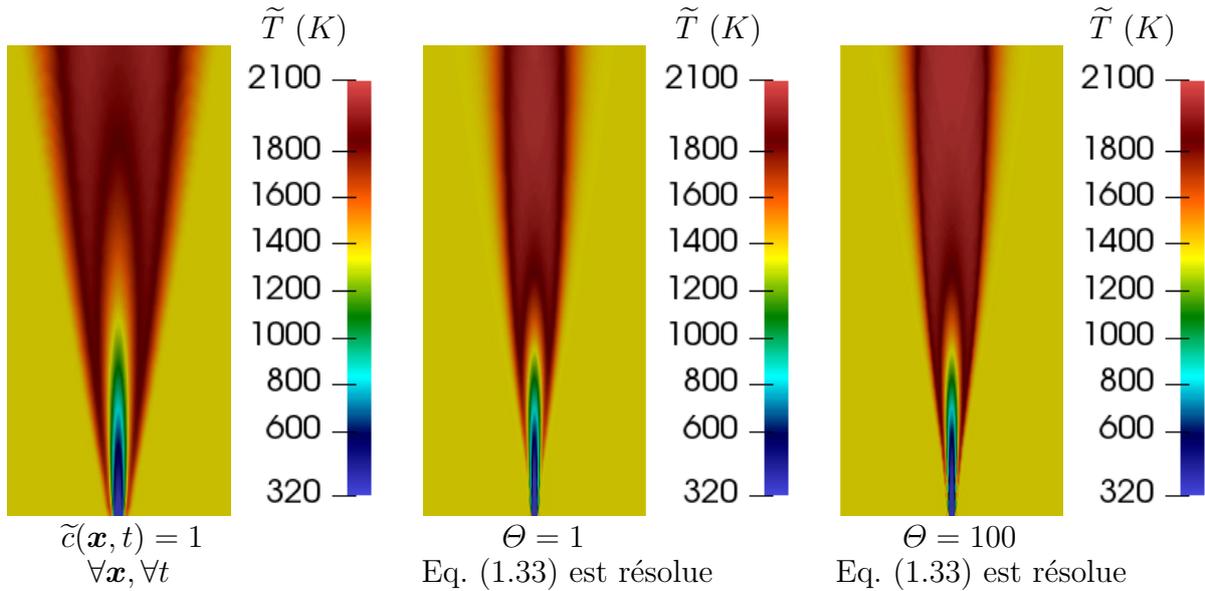


FIGURE 9.2 – Champs de la température moyenne pour la configuration de Cabra [30, 31] obtenus respectivement sans (gauche) et avec (milieu : $\Theta = 1$ et droite : $\Theta = 100$) la considération de l'équation de transport du taux d'avancement moyen.

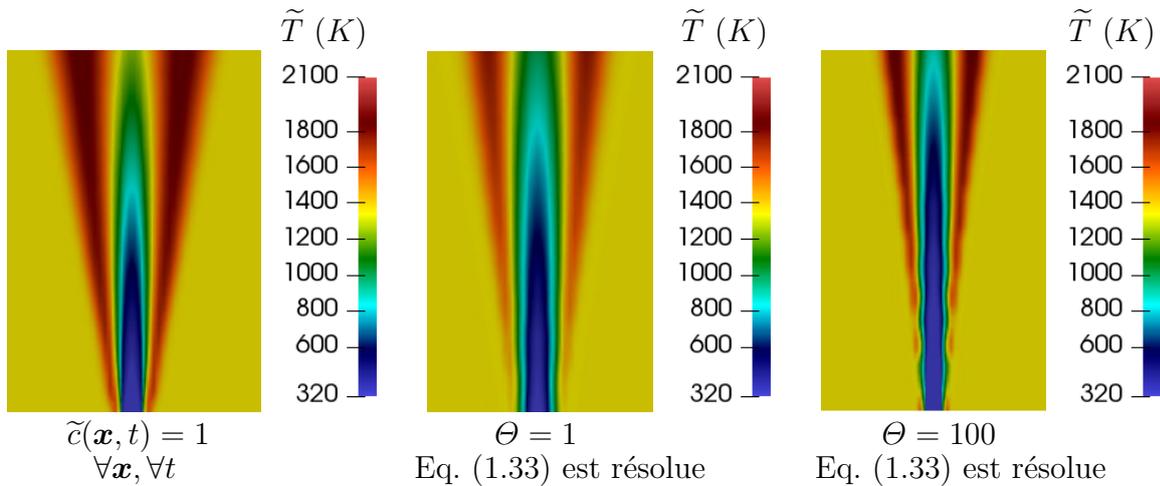


FIGURE 9.3 – Zoom de champs de la température moyenne obtenus respectivement sans (gauche) et avec (milieu : $\Theta = 1$ et droite : $\Theta = 100$) la considération de l'équation de transport du taux d'avancement moyen.

alors les deux tables sont utilisées proportionnellement au poids des gaz frais et des gaz brûlés. La valeur du terme source de cette équation dépend alors du paramètre Θ . Un zoom du champ de température de la figure 9.2 près de la sortie du brûleur est présenté sur la figure 9.3.

Les champs du taux d'avancement moyen correspondants à $\Theta = 1$ et $\Theta = 100$ sont

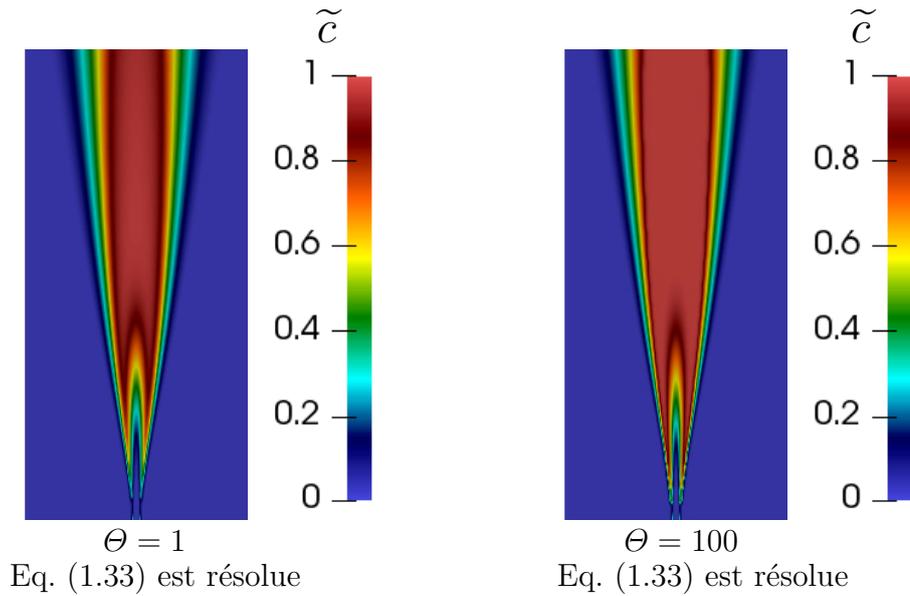


FIGURE 9.4 – Champs du taux d’avancement moyen avec la considération de l’équation de transport du taux d’avancement moyen pour différentes valeurs de Θ (gauche : $\Theta = 1$ et droite : $\Theta = 100$).

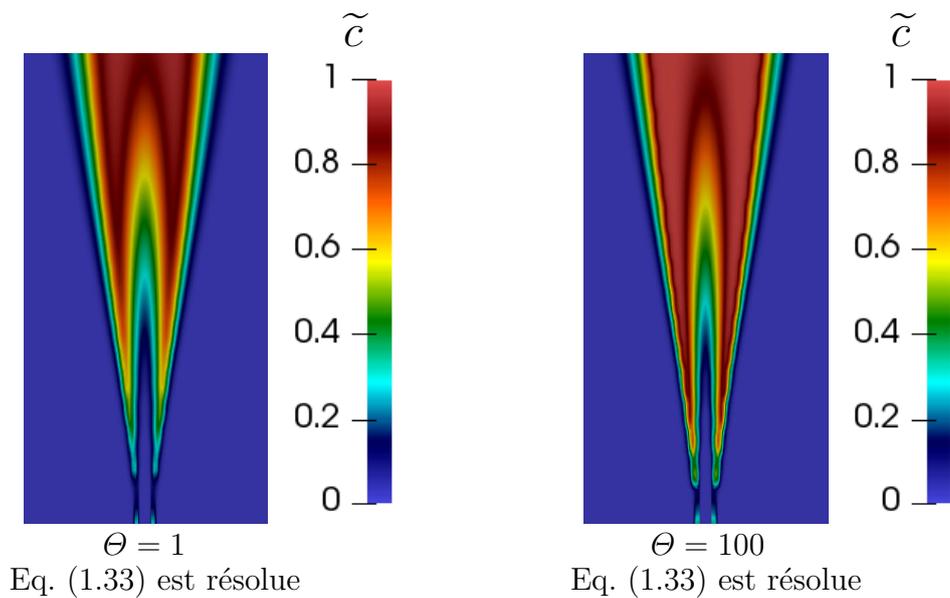


FIGURE 9.5 – Zoom de champs du taux d’avancement moyen avec la considération de l’équation de transport du taux d’avancement moyen pour différentes valeurs de Θ (gauche : $\Theta = 1$ et droite : $\Theta = 100$).

présentés sur les figures 9.4 et 9.5. Nous constatons qu’une flamme quasiment attachée à lèvre du brûleur est obtenue quelque soit la valeur de Θ lorsque seule la propagation de flamme est considérée. Plus Θ est grand plus la flamme est près des lèvres du

brûleur. Si Θ est d'ordre 1 la flamme est très légèrement liftée et une petite zone de mélange apparaît. La hauteur du décollement de la flamme est d'environ $1,2\text{ cm}$. Cette distance minimale est mesurée entre la sortie du brûleur et l'iso-ligne $\tilde{c} = 0,1$. La figure 9.6

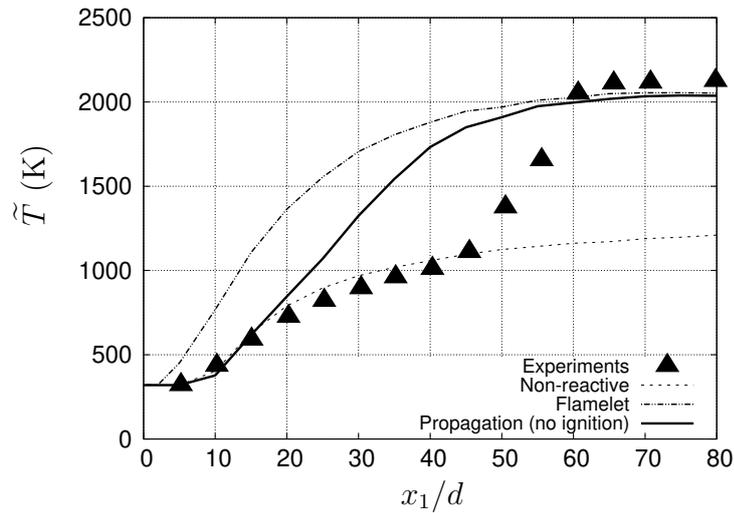


FIGURE 9.6 – Profils axiaux des températures moyennes issues des données expérimentales et des résultats numériques calculés pour la configuration de Cabra.

présente les profils axiaux des cas suivants : (i) données expérimentales (triangles), (ii) simulation non réactive basée uniquement sur la table des gaz frais (pointillé), (iii) simulation réactive basée uniquement sur la table des gaz brûlés (pointillé-continue) et (iv) simulation réactive basée sur les deux tables lorsque l'équation pour \tilde{c} ($\Theta = 1$) est résolue (continue). Comme attendu, le profil numérique pour le cas non réactif est cohérent avec les données expérimentales dans la zone de mélange seulement. De la même manière, le cas réactif qui considère $\tilde{c} = 1$ partout n'est valable que dans la zone des gaz brûlés seulement. Le profil obtenu en considérant l'équation du taux d'avancement est en accord avec les expériences dans ces deux zones mais la zone de réaction n'est pas positionnée correctement. La flamme est beaucoup trop proche des lèvres du brûleur dans ce cas car la méthode d'allumage (gaz brûlés dans tout le domaine) a conduit à l'accrochage de la flamme. Pour initialiser avec des gaz frais, le modèle doit donc tenir compte du mécanisme d'auto-allumage.

9.3 Tabulation des propriétés d'auto-allumage

Nous nous intéressons maintenant à la réponse du modèle lorsque seuls les processus d'auto-inflammation sont considérés, c'est-à-dire, $\bar{\omega} = \bar{\omega}_i$. Les résultats obtenus pour deux méthodes différentes de tabulation du terme source chimique sont présentées dans cette section. La première utilise le caractère auto-similaire des termes sources chimiques pour réduire la taille de la table [149]. La seconde considère une tabulation directe du terme source chimique moyen pour différentes valeurs de la fraction de mélange.

9.3.1 Création de la table réduite : auto-similarité

La tabulation du terme source d'auto-allumage en fonction des conditions locales de composition, pression, température peut conduire à des tables de taille très importante consommant beaucoup de mémoire et donc difficilement utilisable en pratique. Pour réduire les paramètres d'entrée et le stockage de données dans la table, une fonction unique du taux de réaction chimique adimensionnés $\omega_{ad}(t_{ad})$ mais valable pour toutes les valeurs de fraction de mélange est utilisée. Cette fonction est obtenue grâce au caractère auto-similaire des termes sources chimiques.

Dans les travaux de Ribert et al. [149] les variables réduites mettant en évidence le caractère auto-similaire du terme source sont identifiés. Ces variables réduites font intervenir les paramètres suivants :

- $\omega_{max,j}$: maximum du terme source pour une valeur de fraction de mélange j
- $\tau_{i,j}$: délai d'auto-allumage pour une valeur de fraction de mélange j
- $\delta_{t,j}$: temps caractéristique du dégagement de chaleur pour une valeur de fraction de mélange j

Pour mettre en évidence ce caractère dans le cas considéré ici, des simulations de réacteurs homogènes associés à une cinétique chimique détaillée sont réalisées. Les quantités tabulées issues de ces simulations de réacteurs sont donc celles décrites dans la présentation du modèle au chapitre 7 dont le terme source chimique représenté par une fonction unique qui ne dépend pas de ξ : $\omega_{ad}(t_{ad})$ et le délai d'auto-allumage $\tau_i(\xi)$. De plus, les paramètres listés ci-dessus sont également stockés pour différentes valeurs de ξ . Les profils de taux d'avancement dans ces réacteurs pour différentes valeurs de fraction de mélange sont

présentés sur la figure 9.7. On peut voir aussi sur cette figure (gauche) les termes sources chimiques présentés avec les variables réduites mettant en évidence le caractère auto-similaire. Ainsi, la fonction unique retenue pourrait être celle issue du terme source d'une des fractions de mélange ou celle issue de la résolution d'un réacteur homogène où une réaction chimique globale est considérée (cas retenu ici) :

$$\omega = K(1 - c) \exp\left(-\frac{2(1 - c)}{1 - \frac{7}{8}(1 - c)}\right) \quad (9.1)$$

avec $K = 10$. Quelle que soit la valeur de K et E_a , une fois tracé avec ces variables réduites le terme source a une forme similaire. Les paramètres des variables réduites tabulés sont, quant à eux, obtenus à partir des calculs tenant compte d'une cinétique chimique détaillée. La figure 9.7 (gauche) montre que cette loi d'Arrhénius Eq. (9.1) permet de retrouver la même forme du terme source quelle que soit la fraction de mélange. Pour vérifier l'efficacité de la tabulation, le modèle est appliqué aux réacteurs homogènes pour les différentes valeurs de fraction de mélange en résolvant les équations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d(\rho c)}{dt} = \omega_i(t_{ad}) \\ \frac{d(\rho \tau^*)}{dt} = \frac{\rho}{\tau_i(\xi)} \\ t_{ad} = \frac{(\tau^* - 1) * \tau_i(\xi)}{\delta_t(\xi)} \\ \omega_i = \omega_{ad}(t_{ad}) * \omega_{max}(\xi) \end{array} \right. \quad (9.2)$$

où $\tau_i(\xi)$, $\delta_t(\xi)$, $\omega_{max}(\xi)$ et $\omega_{ad}(t_{ad})$ sont les quantités tabulées. Le résultat de la résolution de ces équations est présenté sur la figure 9.7 (droite) sous la dénomination de "Arrhenius". Ce résultat confirme que l'utilisation du temps de résidence normalisé permet de retrouver exactement le délai d'auto-allumage obtenu avec une chimie détaillée (sous la dénomination de "CANTERA"). De plus, une forme unique pour le terme source est suffisante pour décrire le temps caractéristique associé au dégagement de chaleur.

Ces conclusions sont valables quelle que soit la condition initiale du mélange ($\forall \xi$) et quelle que soit le degré de détail du schéma cinétique considéré. Les erreurs commises sur cette forme n'affecteront pas le délai d'auto-allumage obtenu, puisque celui-ci est tabulé séparément et imposé par la résolution de l'équation pour le temps de résidence normalisé.

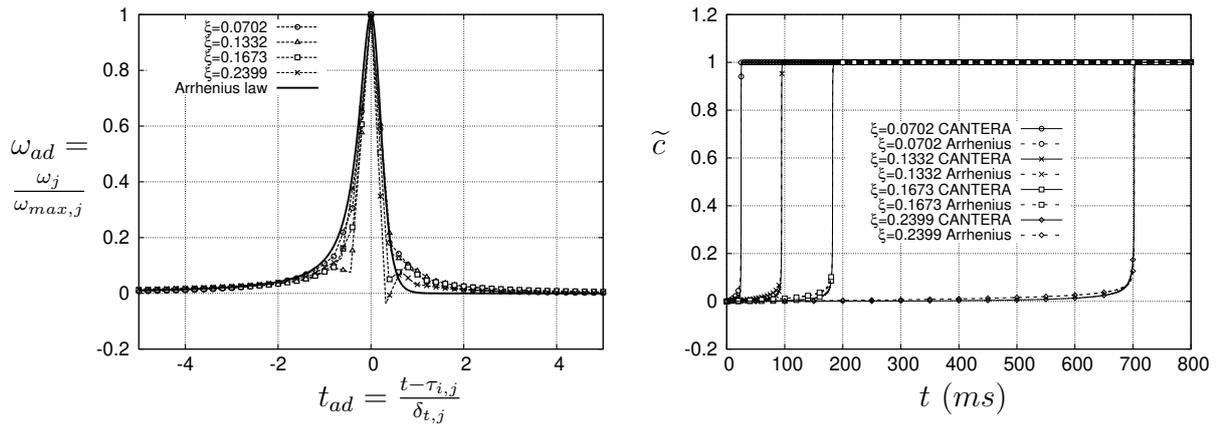


FIGURE 9.7 – Gauche : terme source adimensionnel de la contribution des processus d’auto-inflammation en fonction du temps adimensionnel issus des calculs des réacteurs homogènes en utilisant une loi d’Arrhénius globale et un schéma détaillé pour différentes valeurs de fraction de mélange ($\delta_{t,j}$ est l’échelle du temps caractéristique) ; Droite : profils du taux d’avancement issus des calculs des réacteurs homogènes en utilisant un schéma détaillé et du modèle présent avec l’utilisation d’une loi d’Arrhénius globale et $\bar{\omega}(c) = \bar{\omega}_i(\tilde{\tau}^*)$ issu des données tabulées.

9.3.2 Création de la table complète : $\bar{\omega}_i(\tilde{\tau}^*, \tilde{\xi}, S_\xi)$

Afin de reproduire plus précisément les phases initiales du développement des processus d’auto-inflammation, une table directe du terme source chimique moyen pour différentes fraction de mélange est aussi utilisée. La démarche pour créer cette table complète : $\bar{\omega}_i(\tilde{\tau}^*, \tilde{\xi}, S_\xi)$ est déjà présentée au chapitre 7. Les quantités tabulées sont listées au chapitre 7. Il est important de noter aussi que dans cette table complète, la petite quantité de méthane présente dans le co-courant, voir tableau 9.1 est négligée. En effet, la prise en compte de ce méthane conduit à des délais d’auto-allumage très court dans le co-courant ce qui n’est pas réaliste et fausse la table créée.

	d (mm)	V (m/s)	T (K)	X_{O_2}	X_{N_2}	X_{H_2O}	X_{CH_4}	X_{H_2}
CJ	4,57	100	320	0,15	0,52	0,0	0,33	0,0
CF	210	5,4	1350	0,12	0,73	0,15	0,0	0,0

TABLE 9.1 – Conditions expérimentales de Cabra et al. [31] en négligeant le méthane dans le coflow, CJ et CF représente respectivement le jet central et le co-courant, d les diamètres correspondants.

9.4 Comportement du modèle d'auto-inflammation

9.4.1 Utilisation de la table réduite

Dans un premier temps, pour tester la table réduite, la variance de fraction de mélange n'est pas prise en compte. Le terme source chimique est donc simplement :

$$\bar{\omega}_i = \omega(\tilde{t}_{ad}) \quad (9.3)$$

avec $\tilde{t}_{ad} = \frac{(\tilde{\tau}^* - 1) * \tilde{\tau}_i}{\delta_t}$. De plus, le terme source de vieillissement dans l'équation pour le temps de résidence normalisé devient :

$$\frac{1}{T_i} = \frac{1}{\tau_i(\tilde{\xi})} \quad (9.4)$$

En utilisant les conditions présentées dans le tableau 4.2 au chapitre 4, l'inverse du délai d'auto-allumage en fonction de la fraction de mélange est présentée sur la figure 9.8.

Ce modèle d'auto-allumage ne fait pas intervenir de paramètre de modélisation. L'impact des coupures introduites dans la table réduite, c'est-à-dire l'intervalle de temps normalisé considéré, est évalué en utilisant deux intervalles différents : $t_{ad} \in [-20, 20]$ et $t_{ad} \in [-100, 100]$. On constate sur la figure 9.9 que l'intervalle n'a quasiment pas d'impact sur le résultat. Ce résultat permet de confirmer que la position de la flamme est contrôlée par le temps de résidence normalisé moyen et que l'intervalle de la table n'a pas non plus d'impact sur l'épaisseur caractéristique du dégagement de chaleur. Les champs de temps de résidence normalisé moyen et de taux d'avancement moyen et de la température moyenne (table réduite avec $t_{ad} \in [-100, 100]$) sont présentés sur la figure 9.10. Nous constatons que l'auto-inflammation apparaît exactement à l'endroit où le temps de résidence normalisé atteint l'unité. Toutefois, l'épaisseur de la flamme semble très mince. Ceci est dû à

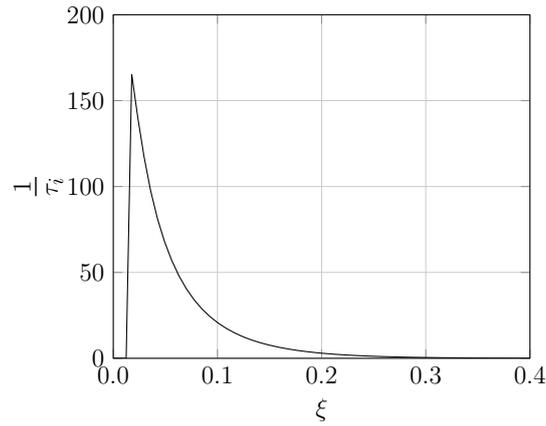


FIGURE 9.8 – Profil $1/\tau_i$ en fonction de la fraction de mélange ξ en utilisant la table réduite.

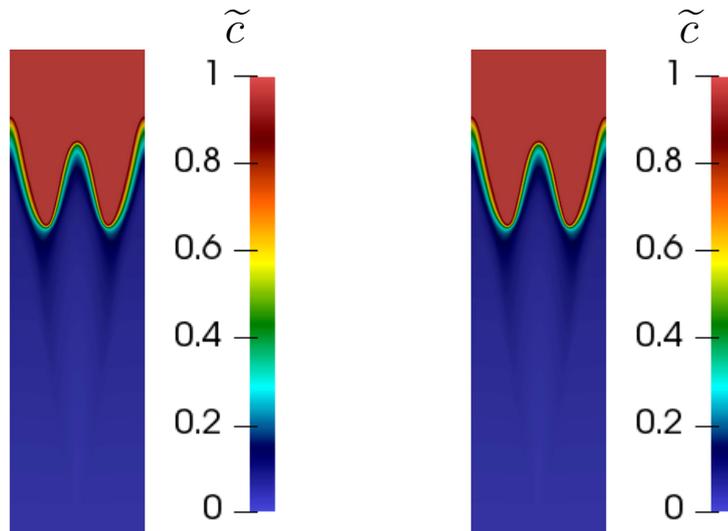


FIGURE 9.9 – Champs de taux d'avancement moyen obtenus sans consideration de la propagation du front de flamme lorsque $t_{ad} \in [-20, 20]$ (gauche) et $t_{ad} \in [-100, 100]$ (droite).

l'utilisation des équations (9.3) et (9.4) où la variance de fraction de mélange est négligée.

Pour prendre en compte l'effet de la variance de la fraction de mélange, la forme unique $\omega_{ad}(t_{ad})$ est utilisée dans l'équation (6.8), rappelée ici :

$$\bar{\omega}_i = \alpha \bar{\rho} \int_0^1 \Omega_i(\bar{\tau}_{0D}, \xi) \tilde{P}(\xi) d\xi \quad (9.5)$$

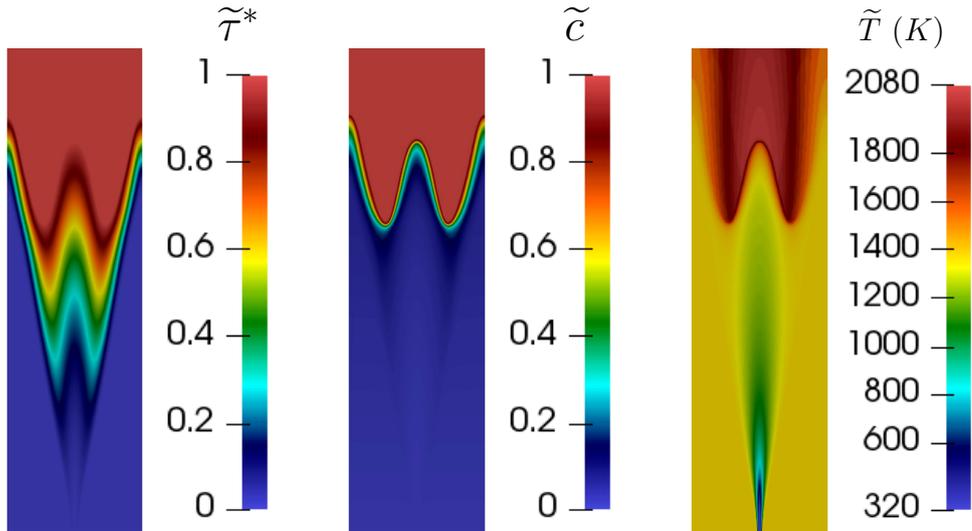


FIGURE 9.10 – Champs de temps de résidence normalisé moyen (gauche) et de taux d’avancement moyen (milieu) et de température moyenne (droite) obtenus sans considération de la propagation du front de flamme en utilisant la table d’auto-similarité sans tenu en compte la variance de la fraction de mélange.

qui devient donc, compte tenu des mêmes hypothèses :

$$\bar{\omega}_i = \alpha \bar{\rho} \int_0^1 \omega_j(t_{ad}(\tau^*, \xi)) * \omega_{max,j}(\xi) \tilde{P}(\xi) d\xi \quad (9.6)$$

où τ^* est une fonction de $\tilde{\tau}^*$ et ξ , voir le chapitre 6. Le terme source de vieillissement de l’équation pour le temps de résidence est alors donné par l’équation (6.7).

Les équations (6.7), (6.11) et (6.12) sont alors utilisées dans les équations pour $\tilde{\tau}^*$ et \tilde{c} puis appliquées à la configuration de Cabra. Les champs de temps de résidence normalisé moyen et de taux d’avancement moyen et de température moyenne sont présentés sur la figure 9.11. On constate que la prise en compte de la variance de la fraction de mélange conduit à l’auto-inflammation du mélange plus en amont, là où la valeur de temps de résidence normalisé moyen est nettement inférieure à 1. La variance de fraction de mélange permet donc de tenir compte de l’apparition des poches de gaz très réactives pour lesquelles $\tau^* = 1$ bien avant que l’âge moyen normalisé atteigne l’unité ($\tilde{\tau}^* \ll 1$). Rappelons que dans le modèle utilisé, les fluctuations de temps de résidence sont négligées $\tau_r'' = 0$ mais pas les fluctuations de temps de résidence normalisé $\tau^{*''} \neq 0$. Comme attendu, la turbulence permet d’accélérer la combustion. La variance de la fraction de mélange a donc un impact très important sur la forme et la position de la flamme.

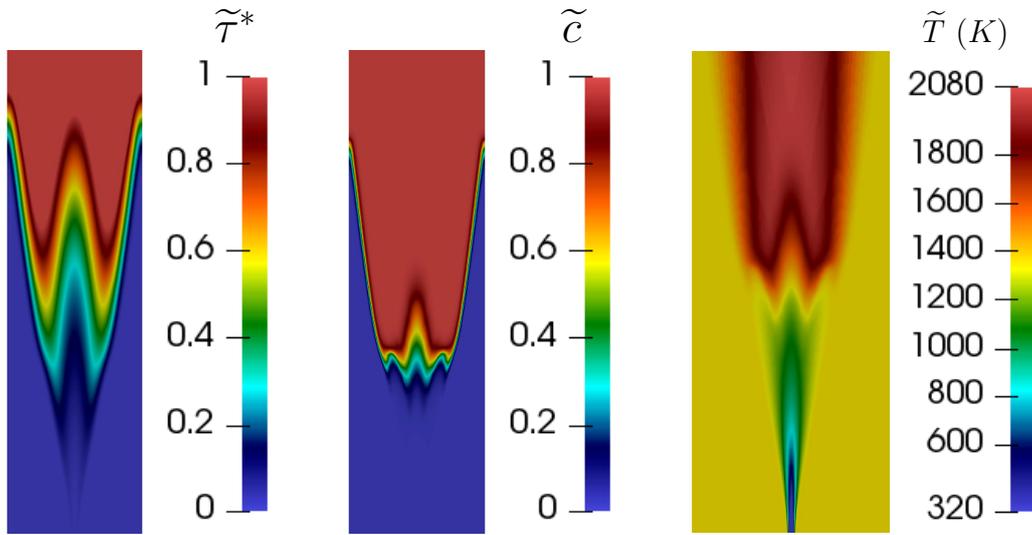


FIGURE 9.11 – Champs de temps de résidence normalisé moyen (gauche) et de taux d’avancement moyen (milieu) et de température moyenne (droite) obtenus sans considération de la propagation du front de flamme en utilisant la table d’auto-similarité avec la prise en compte de la variance de la fraction de mélange.

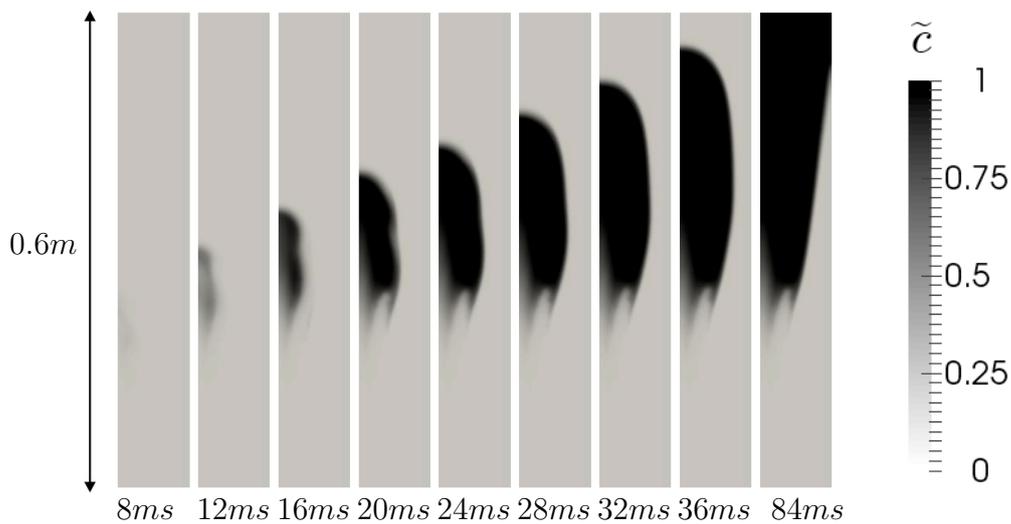


FIGURE 9.12 – Champ de taux d’avancement temporel $\tilde{c}(\mathbf{x}, t)$ obtenu en demi domaine physique sans considération de la propagation du front de flamme ($\bar{\omega}_p = 0$).

La figure 9.12 montre le développement temporel du champ de taux d'avancement moyen $\tilde{c}(\mathbf{x}, t)$ jusqu'à l'état stationnaire lorsque seul ce modèle d'auto-inflammation est pris en compte ($\omega_p = 0$). Le domaine est initialisé par des gaz frais issus des résultats convergés d'une simulation non réactive. Ce résultat montre que le modèle d'auto-allumage permet d'allumer le gaz dans la couche de mélange et de stabiliser la flamme à une certaine hauteur sans que le mécanisme de propagation n'intervienne ($\omega_p = 0$) et sans étincelle initiale.

9.4.2 Utilisation de la table complète

Les mêmes calculs sont maintenant réalisés mais en utilisant la table complète : la forme du terme source est stockée pour chaque valeur de fraction de mélange et la petite quantité de méthane dans le co-courant est négligée pour éviter l'auto-inflammation immédiate à l'intérieur du brûleur. En suivant ces conditions l'inverse du délai d'auto-allumage en fonction de la fraction de mélange et un zoom sont présentés sur la figure 9.13. Cette nouvelle table permet d'éviter la discontinuité obtenue sur la figure 9.8.

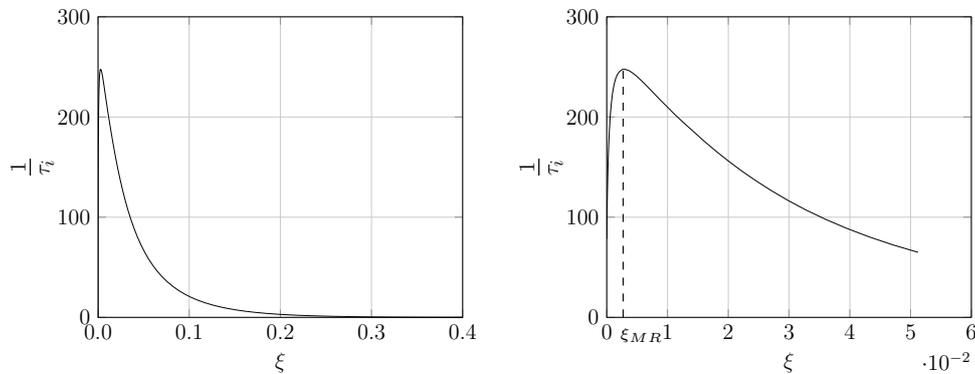


FIGURE 9.13 – Profil $1/\tau_i$ (gauche) et son zoom (droite) en fonction de la fraction de mélange ξ en utilisant la table complète.

La figure 9.14 (gauche) montre le développement temporel du champ de taux d'avancement moyen $\tilde{c}(\mathbf{x}, t)$ jusqu'à l'état stationnaire lorsque seul l'auto-inflammation est prise en compte ($\omega_p = 0$). La flamme se stabilise à la distance de 0.19 m de la sortie du brûleur. Le noyau initial qui est directement lié aux processus de vieillissement des particules fluides, s'élargit tout en maintenant la position amont. La phase de développement de

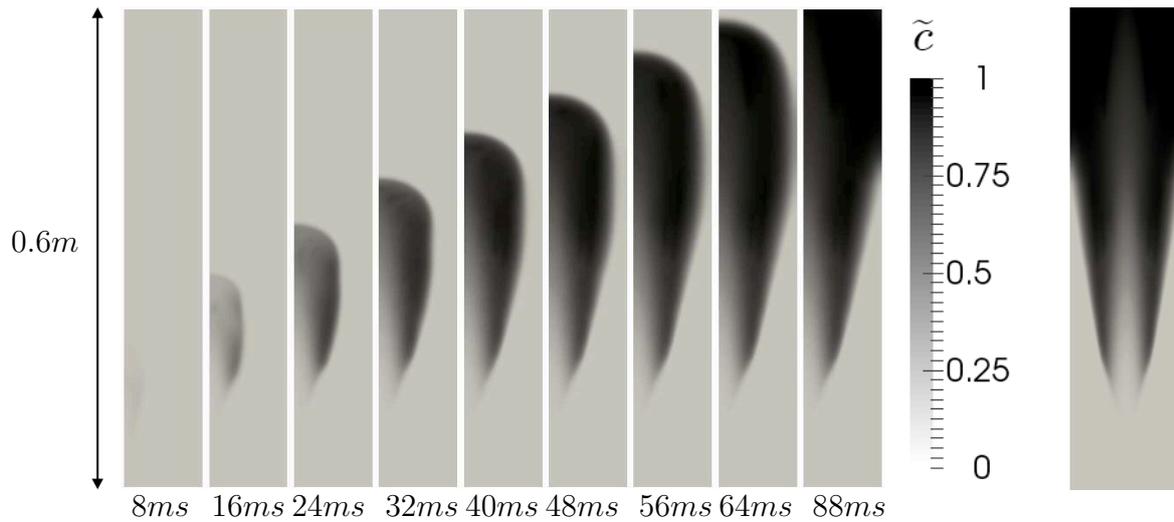


FIGURE 9.14 – Gauche : champ de taux d’avancement temporel $\tilde{c}(\mathbf{x}, t)$ obtenu en demi domaine physique sans consideration de la propagation du front de flamme ($\bar{\omega}_p = 0$). Droite : champ du taux d’avancement moyen stationnaire résolu $\tilde{c}(\mathbf{x})$.

l’écoulement consiste donc à transporter les gaz brûlés produits plus en aval. Là encore, la flamme décrochée (lifted-flame) stationnaire se stabilise bien que seule la contribution des processus d’auto-inflammation soit considérée, voir la figure 9.14 (droite). La flamme

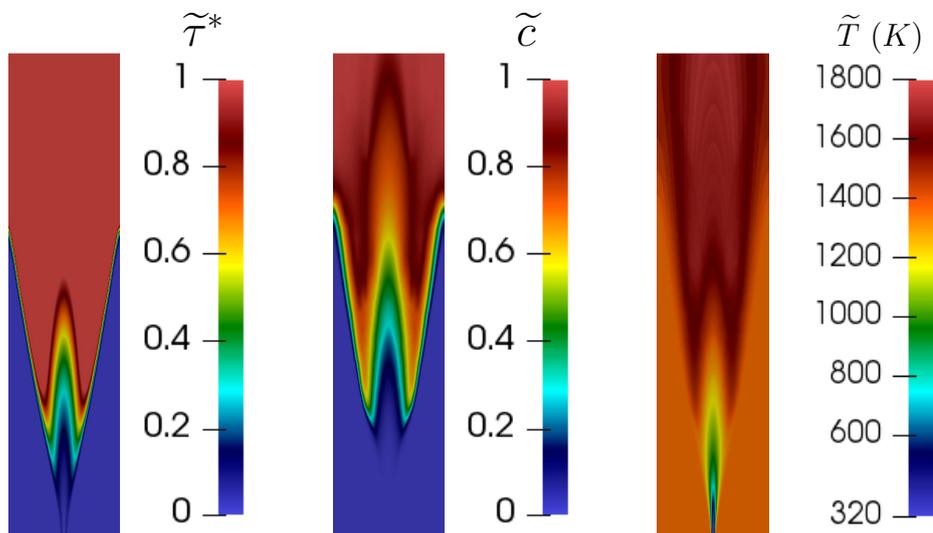


FIGURE 9.15 – Champs de temps de résidence normalisé moyen (gauche) et de taux d’avancement moyen (milieu) et de température moyenne (droite) obtenus sans consideration de la propagation du front de flamme en utilisant la table complète.

se stabilise (position amont) dans la couche de mélange là où la valeur de la fraction de

mélange est égale à la fraction de mélange la plus réactive ξ_{MR} (valeur minimale du délai d'auto-allumage). On constate que la forme de la flamme obtenue avec la table complète Fig. 9.14 est très différente de celle obtenue avec la table réduite Fig. 9.12. Cette différence est aussi observée sur les champs de temps de résidence normalisé moyen, de taux d'avancement moyen et de température moyenne qui sont présentés sur les figures 9.15 (table complète) et 9.11 (table réduite). On constate que les résultats ont une sensibilité importante à la précision de la table créée pour les petites valeurs de fraction de mélange qui correspondent à la plage de fraction de mélange la plus réactive ξ_{MR} . C'est aussi dans cette plage que les écarts entre le terme source unique issu de l'auto-similarité et le terme source issu d'une cinétique chimique détaillée sont les plus importants. Cette différence est principalement due au fait d'avoir négligé la petite portion de méthane dans le co-courant.

9.5 Interaction des modèles de propagation et d'auto-inflammation

Les simulations dans ce paragraphe sont réalisées en considérant $Ka = 0, 2$.

9.5.1 Utilisation de la table réduite pour l'auto-inflammation

Je reprends ici le cas du paragraphe 9.4.1 qui utilise la table réduite pour l'auto-inflammation et néglige la variance de fraction de mélange $\tilde{V}_\xi = 0$ en y intégrant le modèle de propagation. La figure 9.16 (Gauche et Milieu) présente les champs de taux d'avancement lorsque les coupures de la table réduite pour l'auto-inflammation sont différentes. Nous constatons que la hauteur de flamme est plus élevée lorsque la plage du temps adimensionnel est plus large. En effet, le terme source d'auto-allumage normalisé tend vers zéro lorsque le temps adimensionnel t_{ad} tend vers plus ou moins l'infini. Cependant, une valeur finie du terme source, même très faible, permet d'augmenter légèrement la valeur du taux d'avancement plus tôt lorsque $t_{ad} = -20$ que lorsque $t_{ad} = -100$. Cet écart n'a pas d'impact lorsque seul le modèle d'auto-inflammation est utilisé mais a un effet significatif dès lors que les mécanismes sont couplés.

La contribution de l'auto-inflammation est très faible mais très légèrement surestimée

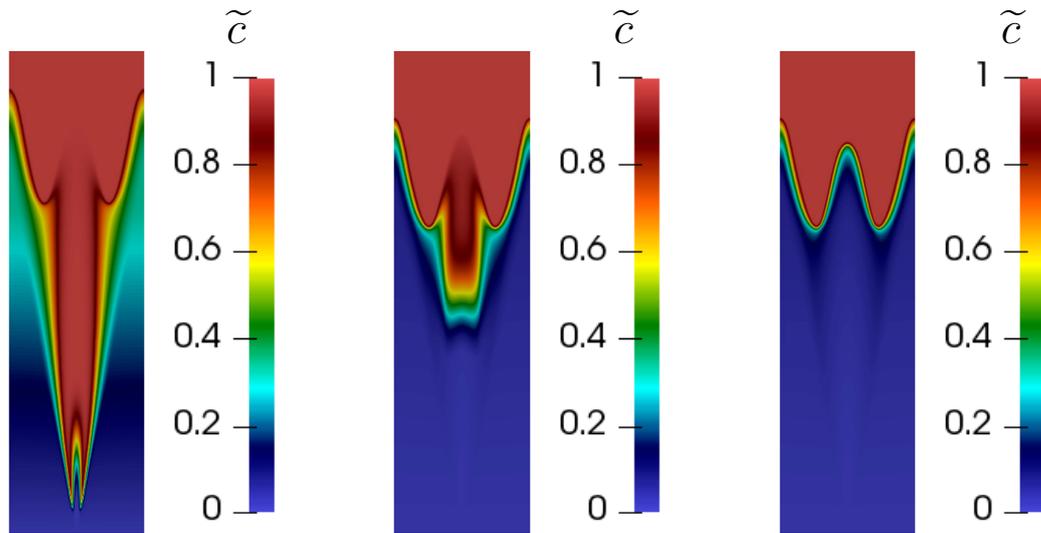


FIGURE 9.16 – Gauche et Milieu : Champs de taux d’avancement moyen obtenus avec considération de la propagation du front de flamme ($\Theta = 2$) lorsque $t_{ad} \in [-20, 20]$ (gauche) et $t_{ad} \in [-100, 100]$ (milieu). Droite : Champs de taux d’avancement moyen obtenus sans considération de la propagation du front de flamme lorsque $t_{ad} \in [-100, 100]$.

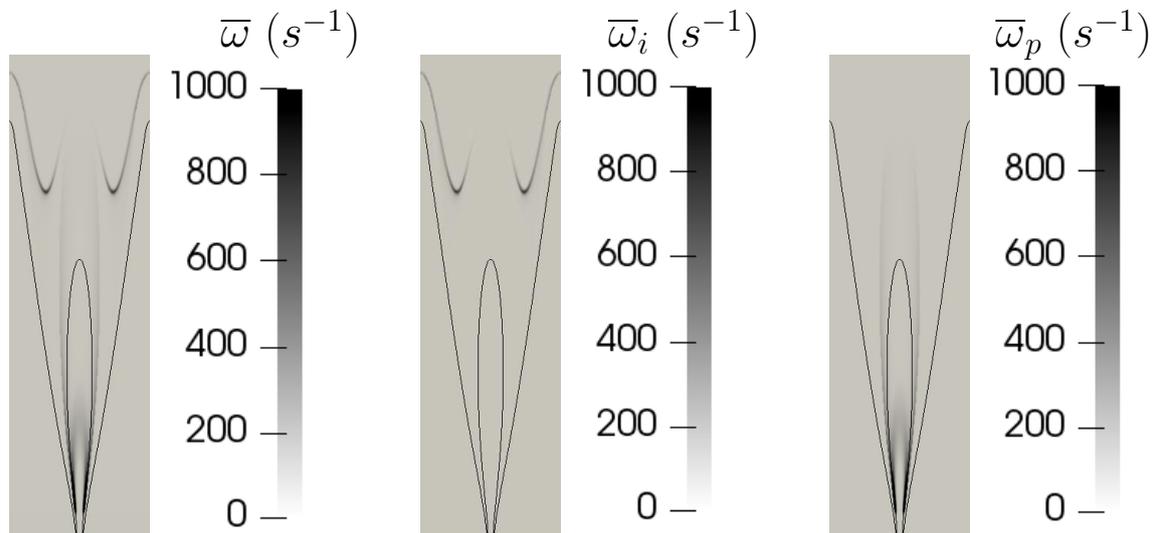


FIGURE 9.17 – Cas $t_{ad} \in [-20, 20]$ et $\Theta = 2$. Gauche : champ du taux de réaction moyen $\bar{\omega}$. Milieu : champ de la contribution $\bar{\omega}_i$ au taux de réaction moyen. Droite : champ de la contribution $\bar{\omega}_p$ au taux de réaction moyen.

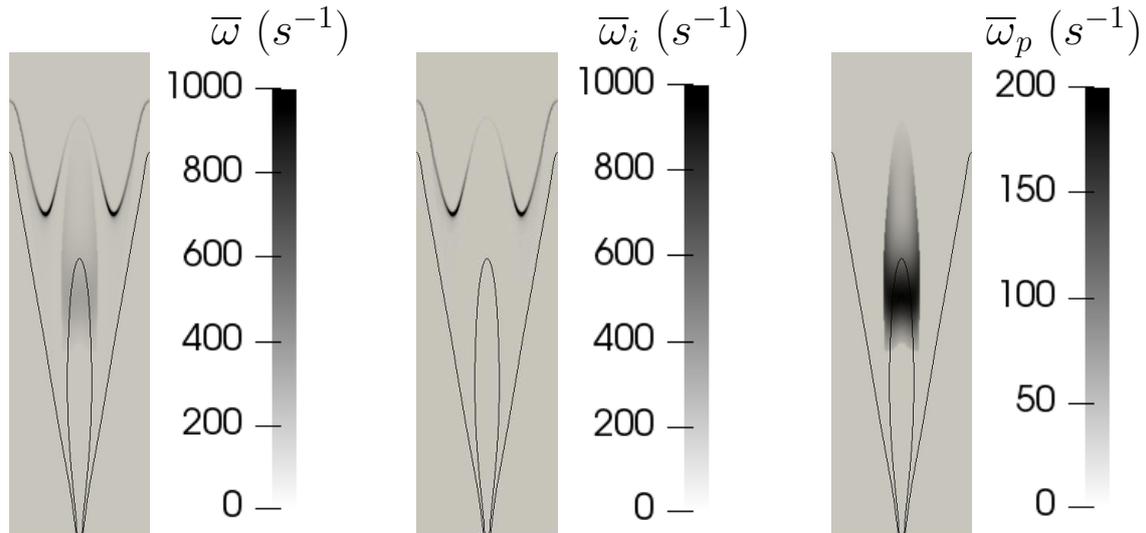


FIGURE 9.18 – Cas $t_{ad} \in [-100, 100]$ et $\Theta = 2$. Gauche : champ du taux de réaction moyen $\bar{\omega}$. Milieu : champ de la contribution $\bar{\omega}_i$ au taux de réaction moyen. Droite : champ de la contribution $\bar{\omega}_p$ au taux de réaction moyen.

si cette plage n'est pas suffisamment large. Cette légère surestimation du terme source affecte peu la contribution d'auto-inflammation mais suffit pour déclencher la propagation, voir les figures 9.17 (pour le cas $t_{ad} \in [-20, 20]$) et 9.18 (pour le cas $t_{ad} \in [-100, 100]$). La ligne interne et externe représentent les lignes iso- $\tilde{\xi}$ stœchiométrique ($\tilde{\xi} = \tilde{\xi}_{st}$) et la plus réactive ($\tilde{\xi} = \tilde{\xi}_{MR}$). La contribution de la propagation est plus importante au tour de l'iso-ligne stœchiométrique, alors que les processus d'auto-inflammation sont localisés entre les deux iso-lignes $\tilde{\xi} = \tilde{\xi}_{st}$ et $\tilde{\xi} = \tilde{\xi}_{MR}$. En utilisant la table la plus petite ($t_{ad} \in [-20, 20]$), la surestimation de la contribution de l'auto-inflammation déclenche la contribution de propagation plus en amont.

Les résultats sont donc très sensibles à la coupe de la table. Ainsi, la table la plus large ($t_{ad} \in [-100, 100]$) est donc retenue pour les simulations suivantes. Ce premier résultat où l'auto-inflammation et propagation interagissent fait très nettement apparaître les zones où les contributions respectives sont importantes.

La figure 9.19 présente les champs de taux d'avancement obtenus lorsque la variance de fraction de mélange est prise en compte. Comme dans le paragraphe 9.4.1, la hauteur de stabilisation de la flamme est moins élevée lorsque la variance est prise en compte (comparer figure 9.19 et figure 9.16 Milieu et Droite) puisque des poches de gaz très

réactives apparaissent pour des valeurs de $\tilde{\tau}^*$ faible. Le résultat de la figure 9.19 met en évidence la zone centrale où l'effet de la propagation est important.

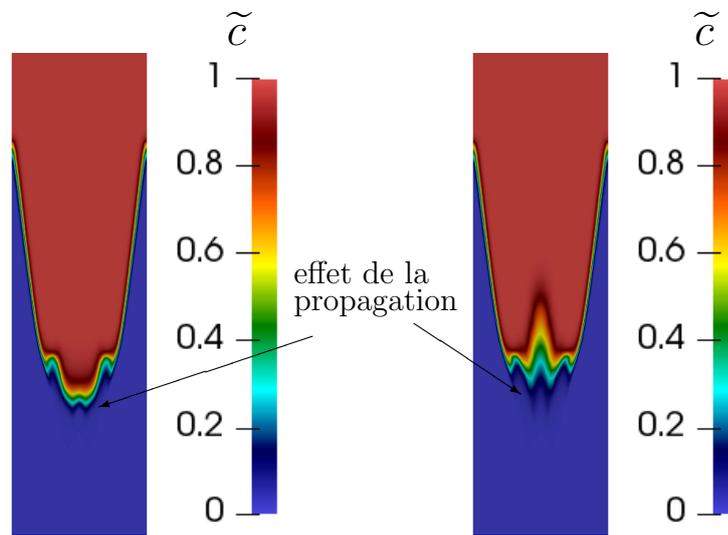


FIGURE 9.19 – Champs de taux d'avancement moyen obtenus avec (gauche) ou sans (droite) considération de la propagation du front de flamme ($\Theta = 2$).

Les développements temporels du champ de taux d'avancement moyen $\tilde{c}(\mathbf{x}, t)$ jusqu'à l'état stationnaire en considérant la propagation et l'auto-inflammation sont présentés sur les figures 9.20 et 9.21. Le domaine est initialisé par des gaz frais et deux valeurs du paramètre de propagation : $\Theta = 1$ et $\Theta = 100$ sont présentées.

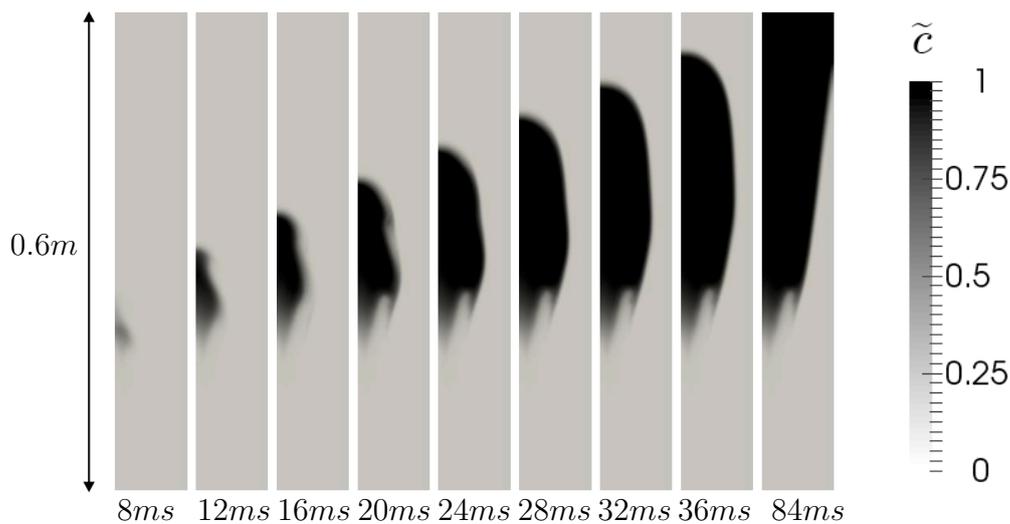


FIGURE 9.20 – Champ de taux d'avancement temporel $\tilde{c}(\mathbf{x}, t)$ obtenu en demi domaine physique avec considération de la propagation du front de flamme ($\Theta = 1$).

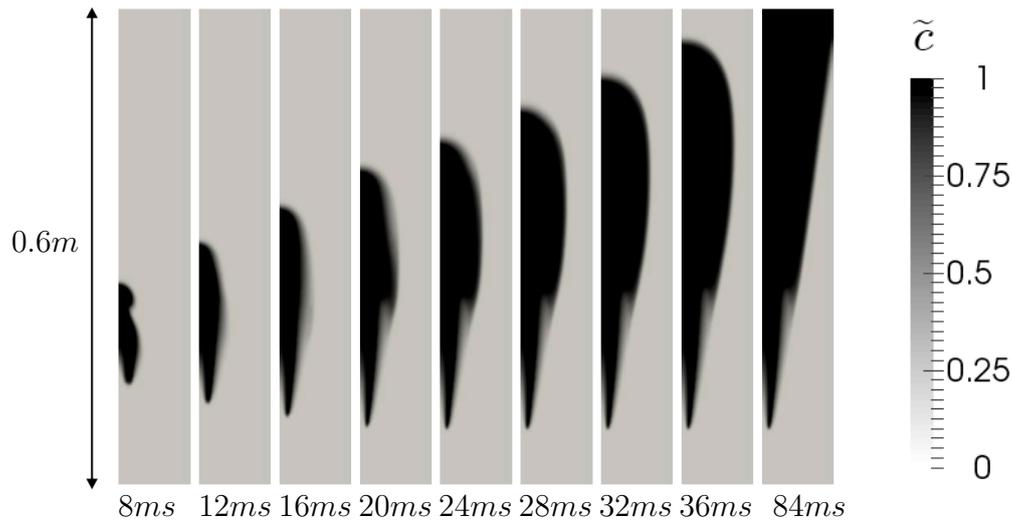


FIGURE 9.21 – Champ de taux d’avancement temporel $\tilde{c}(\mathbf{x}, t)$ obtenu en demi domaine physique avec consideration de la propagation du front de flamme ($\Theta = 100$).

Comme attendu, le développement initial du champ de taux d’avancement est lié aux processus d’auto-inflammation. Les gaz brûlés sont transportés vers la sortie. On constate également que la propagation de la flamme joue un rôle important à l’extrême amont de la flamme au centre de l’écoulement. C’est d’ailleurs la propagation qui définit la position où la flamme se stabilise.

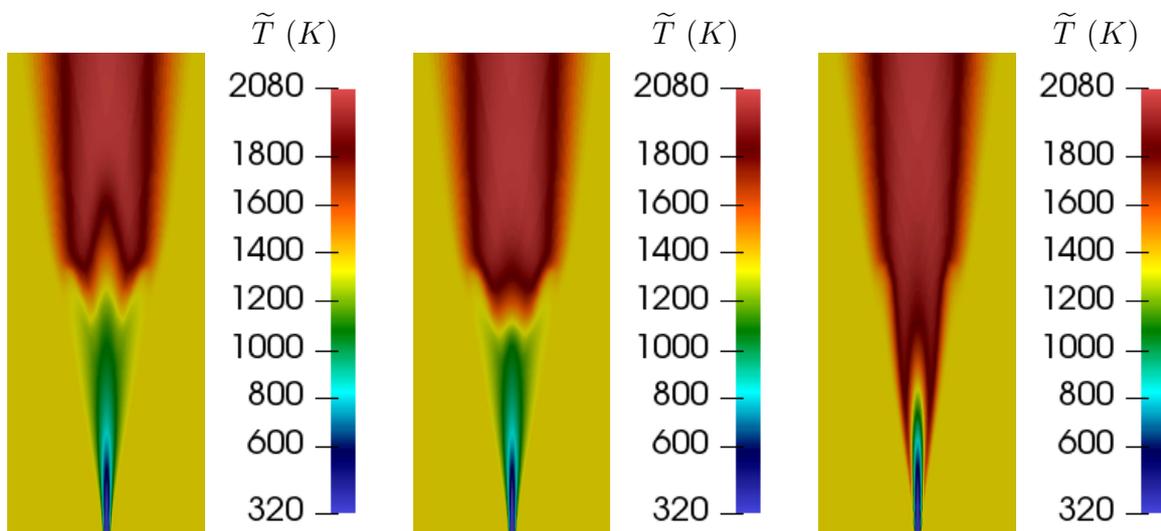


FIGURE 9.22 – Gauche : Champ de température moyenne obtenu sans consideration de la propagation du front de flamme. Milieu et Droite : Champs de température moyenne obtenus avec consideration de la propagation du front de flamme $\Theta = 1$ en initialisant avec des gaz frais (milieu) ou des gaz brûlés (droite).

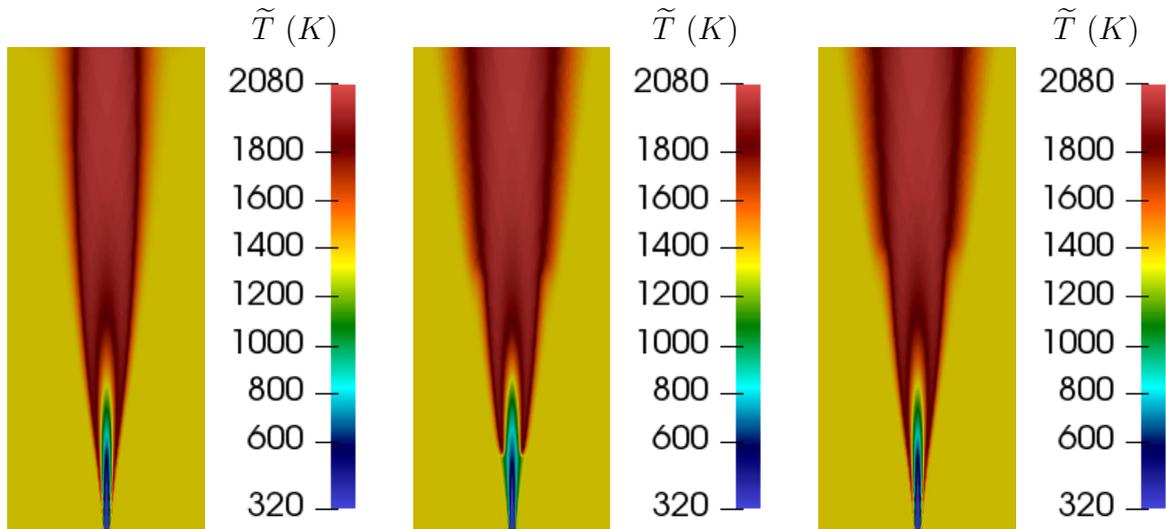


FIGURE 9.23 – Gauche : Champ de température moyenne obtenu sans consideration des processus d’auto-inflammation. Milieu et Droite : Champs de température moyenne obtenus avec consideration de la propagation du front de flamme $\Theta = 100$ en initialisant avec des gaz frais (milieu) et des gaz brûlés (droite).

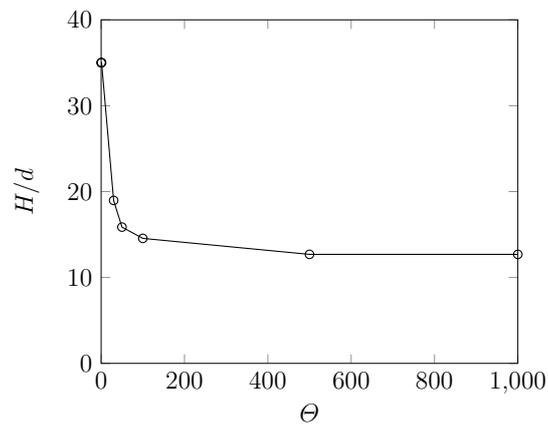


FIGURE 9.24 – Analyse de sensibilité de la hauteur de flamme adimensionnelle à la valeur du paramètre de modélisation Θ en considérant la propagation de flamme et les processus d’auto-inflammation en même temps.

Les figures 9.22 et 9.23 montrent le champ de température moyenne avec ou sans considération de la propagation de flamme, pour différentes valeurs du paramètre de modélisation Θ et différentes conditions initiales (domaine rempli de gaz brûlés ou de gaz frais). Là encore, la position la plus en amont de la flamme est contrôlée par la propagation et la hauteur de flamme est donc très sensible à la valeur du paramètre de modélisation Θ . Les fronts principaux de flamme sont semblables aux fronts de flamme obtenus en ne considérant que la propagation de flamme, voir le paragraphe 9.2. Le profil de la hauteur de flamme pour différentes valeurs de paramètre de modélisation Θ est tracé sur la figure 9.24. Le comportement est très non-linéaire : la flamme est quasiment stable quelles que soient les valeurs de Θ pour $\Theta > 100$ puis la hauteur augmente pour $\Theta < 100$ jusqu'à la hauteur correspondante à la zone où l'auto-inflammation devient importante ($\Theta = 0$). Si le domaine est initialement rempli avec les gaz brûlés ($\tilde{c} = 1$), la propagation agit dès le début du calcul et une flamme se stabilise quasiment aux lèvres du brûleur.

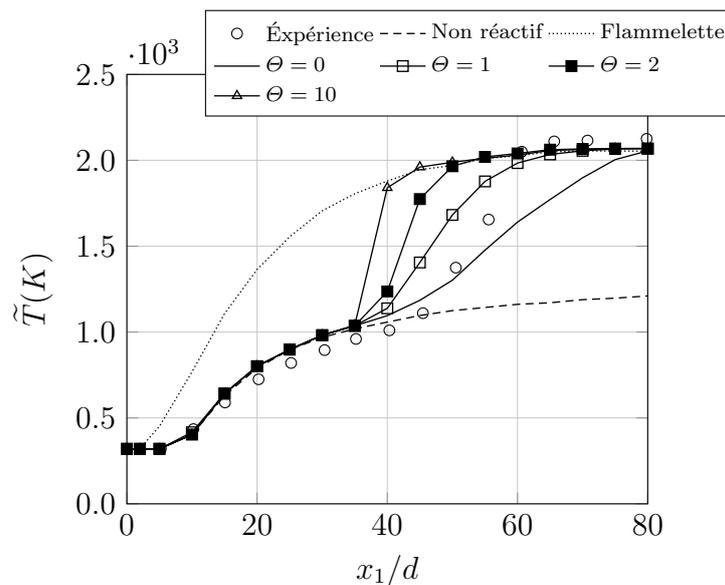


FIGURE 9.25 – Données expérimentales et profils axiaux de la température moyenne issus des calculs numériques pour différentes valeurs de Θ .

Les profils axiaux de température moyenne sont tracés sur la figure 9.25 pour différentes valeurs du paramètre de modélisation Θ . L'augmentation de la valeur de Θ permet d'obtenir une flamme stabilisée plus proche de la sortie du brûleur. Les résultats les plus satisfaisants pour ces profils axiaux de température moyenne sont donc obtenus pour une

valeur de Θ entre 0 et 1.

Les figures 9.26 montre les profils radiaux de la fraction de mélange moyenne et de la température moyenne pour différentes valeurs de Θ à différentes distances de la position de l'injecteur ($x_1/d = 15, 30, 40, 50$ et 70). La figure 9.27 montre ces profils autour de la position $x_1/d = 40$: $x_1/d = 38, 40, 42, 44$. Le maximum de température sur l'axe est décalé vers le centre. Les écarts importants entre les résultats numériques et les données expérimentales se trouvent autour de $x_1/d = 40$ où la flamme se stabilise. Ces profils radiaux sont bien entendu très sensible autour de cette position car un petit décalage de la flamme peut faire basculer la position dans les gaz frais ou les gaz brûlés. L'écart important pour les grandes valeurs de r/d en $x_1/d = 70$ est lié au mélange avec l'air ambiant froid [69].

9.5.2 Utilisation de la table complète pour l'auto-inflammation

Les résultats présentés dans ce paragraphe sont obtenus en utilisant la table complète pour l'auto-inflammation. La figure 9.28 présente les champs de température calculés en initialisant différemment le taux d'avancement dans le domaine de calcul ($\tilde{c} = 0$ ou $\tilde{c} = 1$). L'importance de la condition initiale a déjà été discutée précédemment, voir paragraphe 9.5.1. Ainsi, l'utilisation de ce modèle complet permet d'obtenir une flamme stabilisée lorsque le domaine est initialisé à $\tilde{c} = 0$. Dans ce cas, le processus d'auto-inflammation permet d'augmenter très légèrement le taux d'avancement qui suffit à déclencher le mécanisme de propagation de la flamme.

Les champs de températures sans ou avec la considération du mécanisme de propagation de la flamme sont présentés sur la figure 9.29. En comparant avec la figure 9.28 (gauche) nous observons que la considération de la propagation permet de baisser significativement la hauteur de la flamme. Cette dernière est aussi très sensible à la valeur du paramètre de modélisation Θ . La figure 9.31 présente la phase de stabilisation pour $\Theta = 100$.

En comparant avec les résultats présentés sur la figure 9.14, le noyau de la flamme présenté sur la figure 9.30 apparaît plus tôt et se localise plus près de la sortie du brûleur. Les processus de stabilisation de la flamme peuvent être décrits de la manière suivante :

- (i) le mélange entre deux courants produit des zones où le délai d'auto-allumage est

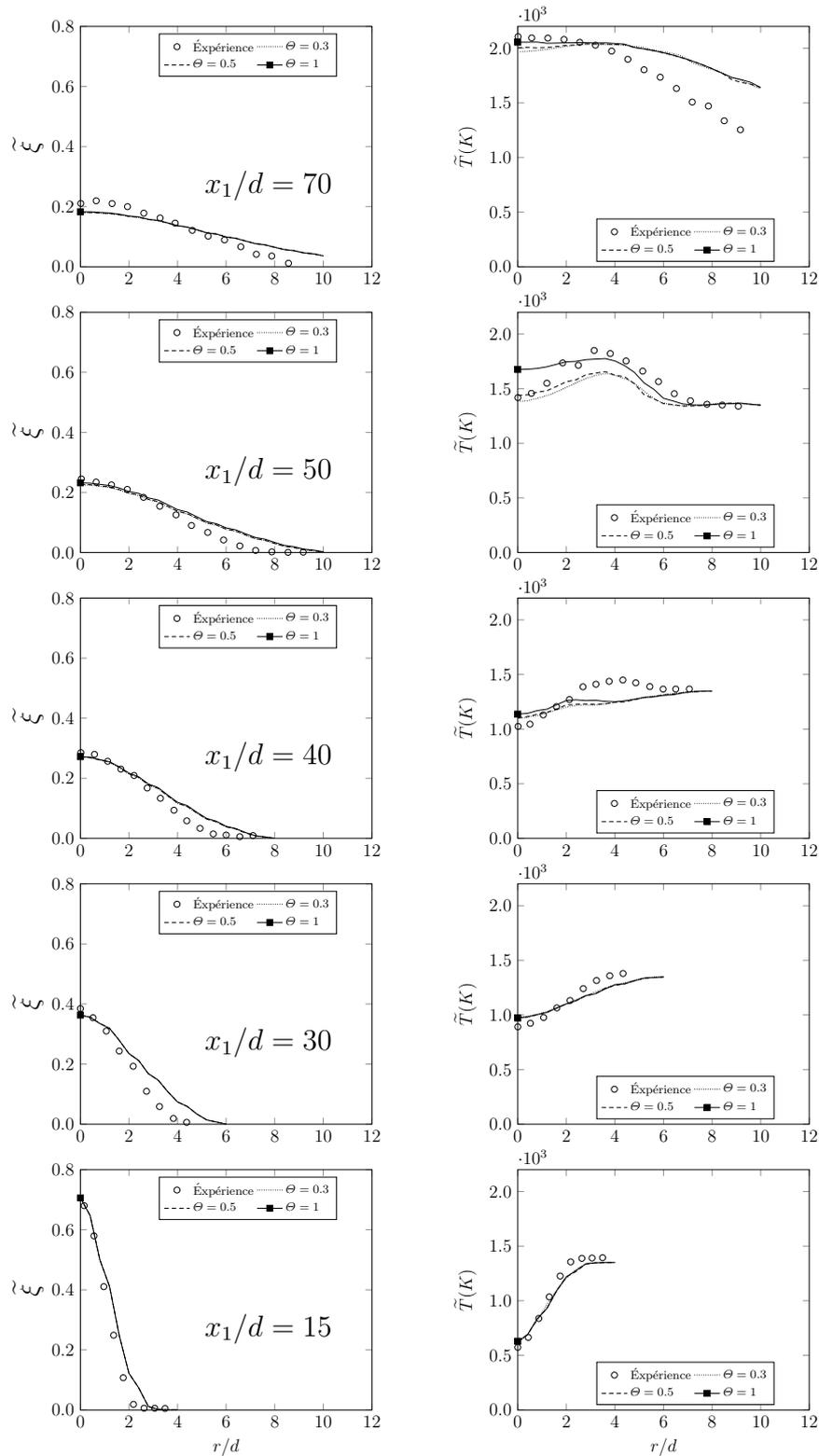


FIGURE 9.26 – Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne (gauche) et de la température moyenne (droite) obtenus à différentes distances axiales de la sortie du brûleur. Comparaison avec des données expérimentales [31] pour différentes valeurs du paramètre de modélisation θ . La table issue par la méthode d'autosimilarité est utilisée.

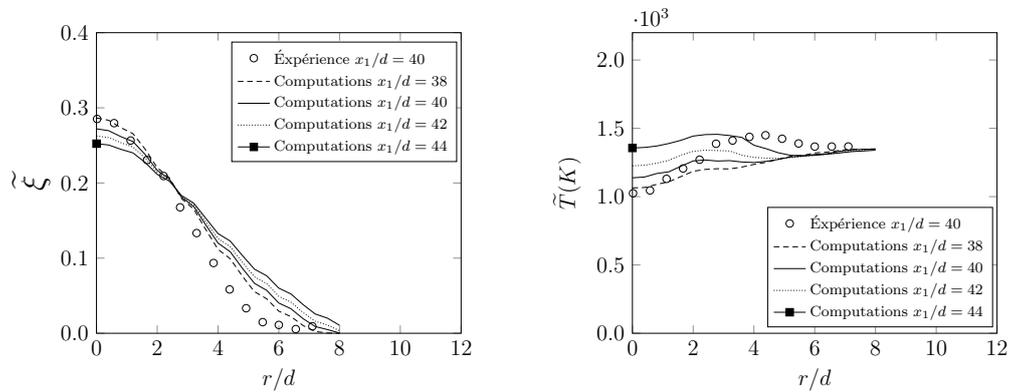


FIGURE 9.27 – Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne et de la température moyenne au tour de $x_1/d = 40$ ($\Theta = 1$). La table issue par la méthode d'autosimilarité est utilisée.

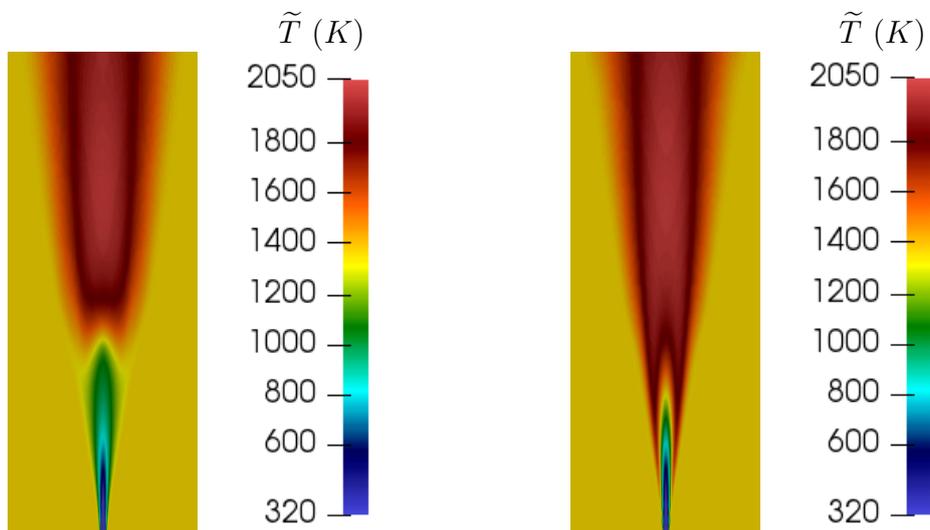


FIGURE 9.28 – Champs de température moyenne obtenus avec considération de la propagation du front de flamme et les processus d'auto-inflammation ($\Theta = 1$) en initialisant $\tilde{c} = 0$ (gauche) et $\tilde{c} = 1$ (droite).

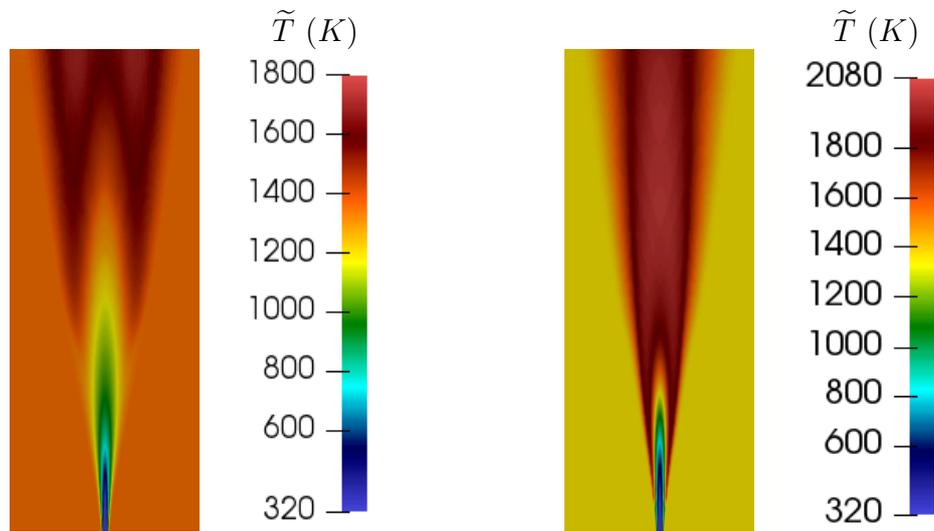


FIGURE 9.29 – Champs de température moyenne obtenus sans (gauche) ou avec (droite) considération de la propagation du front de flamme ($\Theta = 100$).

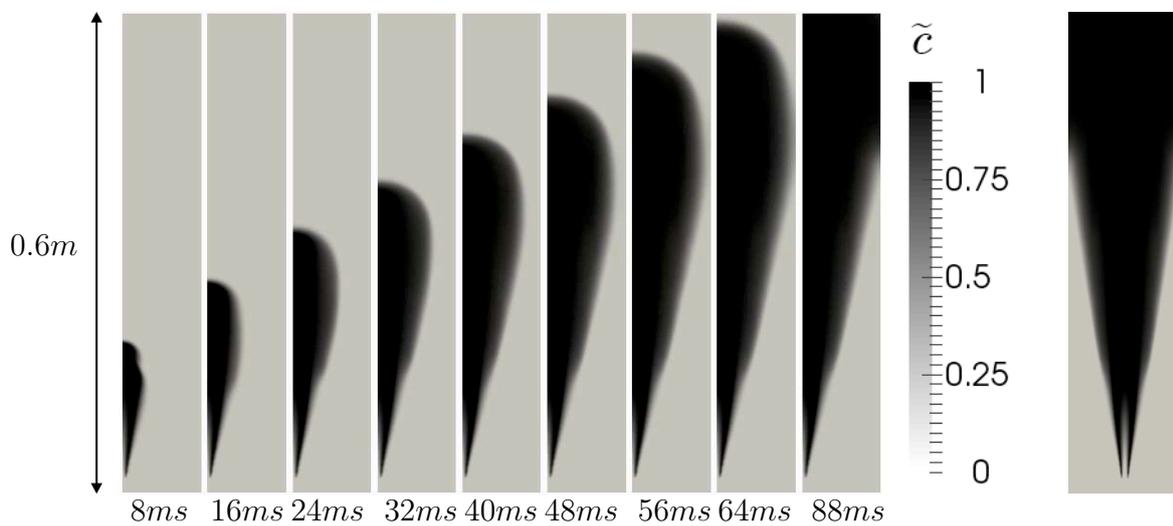


FIGURE 9.30 – Gauche : champ de taux d'avancement temporel $\tilde{c}(\mathbf{x}, t)$ obtenu en demi domaine physique avec considération de la propagation du front de flamme et les processus d'auto-inflammation ($\Theta = 100$). Droite : champ du taux d'avancement moyen stationnaire résolu $\tilde{c}(\mathbf{x})$.

suffisamment faible, (ii) les particules vieillissent sous l'action du terme source de temps de résidence normalisé, (iii) la contribution d'auto-inflammation du terme source chimique fait augmenter très légèrement la variable d'avancement, (iv) l'augmentation de \tilde{c} suffit pour déclencher la contribution de la propagation. Dans le cas où la valeur de Θ est grande, la hauteur de stabilisation de la flamme est principalement contrôlée par la propagation. Ce résultat est similaire au cas où seule la propagation de flamme est considéré ($\bar{\omega} = \bar{\omega}_p$) et en initialisant tout le domaine par des gaz brûlés.

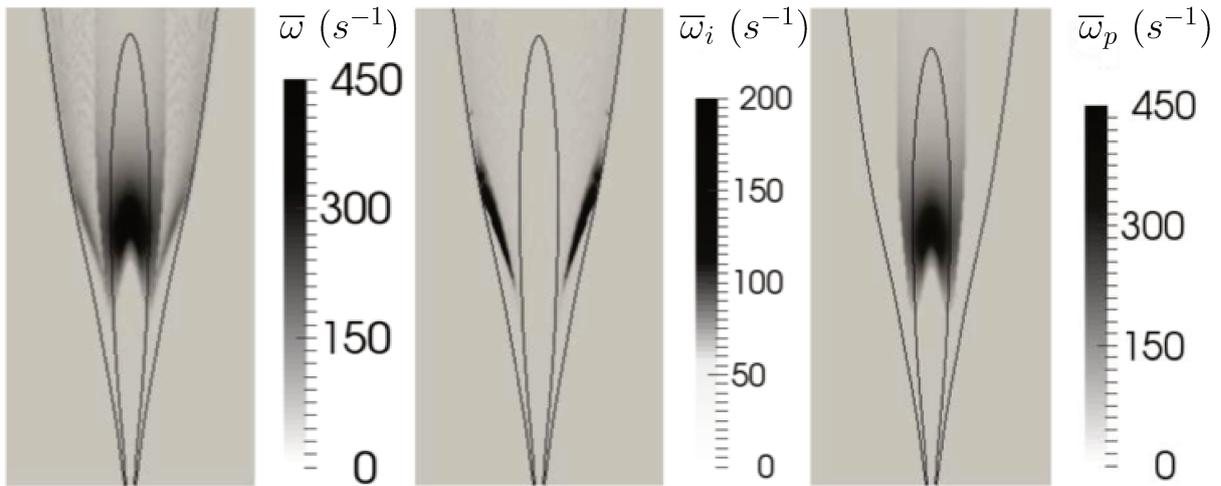


FIGURE 9.31 – Gauche : champ du taux de réaction moyen $\bar{\omega}$. Milieu : champ de la contribution $\bar{\omega}_i$ au taux de réaction moyen. Droite : champ de la contribution $\bar{\omega}_p$ au taux de réaction moyen.

La figure 9.31 (Gauche) présente le champ du taux de réaction chimique moyen lorsque $\Theta = 1$. Les lignes interne et externe représentent les lignes iso- $\tilde{\xi}$ stœchiométrique ($\tilde{\xi} = \tilde{\xi}_{st}$) et la plus réactive ($\tilde{\xi} = \tilde{\xi}_{MR}$). L'un des avantages du modèle proposé ici est de permettre d'identifier chaque contribution du taux de réaction chimique : l'auto-inflammation et la propagation, voir la figure 9.31 (Milieu et Droite) sans utilisation d'index particulier [160] : c'est directement le terme source modélisé qui permet cette identification. La contribution de la propagation est plus importante au tour de l'iso-ligne stœchiométrique, alors que les processus d'auto-inflammation sont localisés entre les deux iso-lignes $\tilde{\xi} = \tilde{\xi}_{st}$ et $\tilde{\xi} = \tilde{\xi}_{MR}$. Ces résultats montrent que ces deux contributions sont importantes à une distance de plus de 10 cm (20.0 d) de la sortie du brûleur. Le même comportement a été observé par Schulz et al. [160] par la LES tridimensionnelle de la même configuration. Ainsi, ces résultats

confirment que la stratégie de modélisation proposée permet de tenir compte à la fois des phénomènes de mélange, de propagation et d'auto-inflammation.

9.6 Études de sensibilité

Je propose ici une étude de la sensibilité des résultats numériques aux paramètres de modélisation Θ et c_{min} . c_{min} est la valeur de coupure du terme source de propagation. Cette valeur est une fonction du nombre de Karlovitz [81, 82, 128], voir Eq. (5.9). Θ est le paramètre faisant intervenir la ségrégation et qui agit directement sur la valeur du terme source. Il représente les effets du nombre de Damköhler.

9.6.1 Nombre de Karlovitz (c_{min})

Les résultats numériques sont obtenus pour différentes valeurs de Ka dans l'intervalle : $Ka \in [0, 1]$. Le paramètre Θ est fixé à 1 pour cette étude. Les résultats numériques sont comparés aux données expérimentales de la température longitudinale (selon l'axe x_1) pour la configuration de Cabra [31] et présentée sur la figure 9.32. On constate que la position de flamme est décalée (plus loin de la lèvre du brûleur) avec l'augmentation de la valeur de Ka mais le gradient de température moyenne est quasiment le même. Ce résultat confirme que c_{min} qui est le critère qui déclenche la contribution de propagation du terme source chimique contrôle la position de la flamme mais pas la structure interne de la flamme turbulente.

9.6.2 Nombre de Damköhler (Θ)

Les résultats numériques sont obtenus pour $\Theta \in [0, 10]$ et le nombre de Karlovitz est fixé : $Ka = 0, 2$. La figure 9.33 présente les comparaisons des résultats expérimentaux et numériques. Le profil obtenu pour $\Theta = 0$ correspond au cas où le mécanisme de propagation n'est pas considéré. Le profil de température obtenu dans ce cas ($\Theta = 0$) ne permet pas d'obtenir une flamme stabilisée à une position proche de celle observée expérimentalement. Ce profil est plutôt proche du cas non réactif dans cette zone. La stabilisation de la flamme a lieu dans le cas à $x_1/d = 39$. Ainsi, nous pouvons conclure

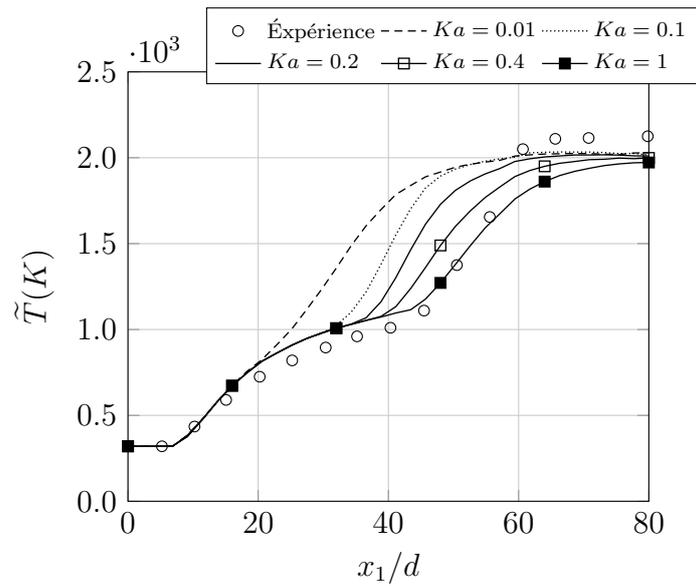


FIGURE 9.32 – Données expérimentales et profils axiaux de la température moyenne issus des calculs numériques en considérant la propagation et l’auto-inflammation en même temps ($\Theta = 1$) et pour différentes valeurs de Ka .

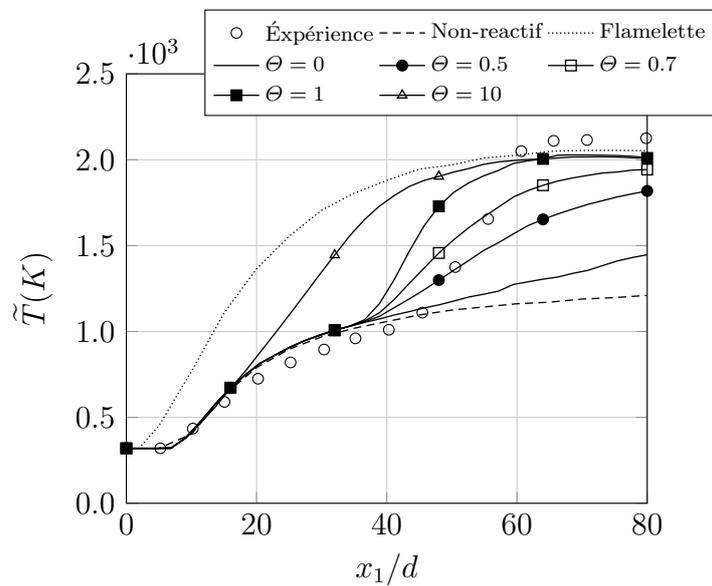


FIGURE 9.33 – Données expérimentales et profils axiaux de la température moyenne issus des calculs numériques en considérant la propagation et l’auto-inflammation en même temps ($Ka = 0,2$) et pour différentes valeurs de Θ .

que la position de la flamme est déterminée par les deux mécanismes : l'auto-inflammation qui permet l'allumage et la propagation qui stabilise la flamme à une position plus amont. Cette analyse paramétrique montre que les résultats numériques sont satisfaisants pour des valeurs de Θ autour de l'unité lorsque le nombre de Karlovitz est de l'ordre de 0,2. Un couple de valeurs de Ka et Θ permettant un ajustement encore meilleur des résultats pourrait être trouvé mais ce couple de valeurs de paramètres ($Ka = 0,2$ et $\Theta = 1$) est suffisant pour l'objectif de ce travail qui est de décrire la réponse du modèle lorsque les paramètres varient.

La hauteur de flamme adimensionnelle H/d obtenue a également été tracée pour des grandes valeurs de Θ , voir la figure 9.34. Ces résultats mettent en évidence une dépendance

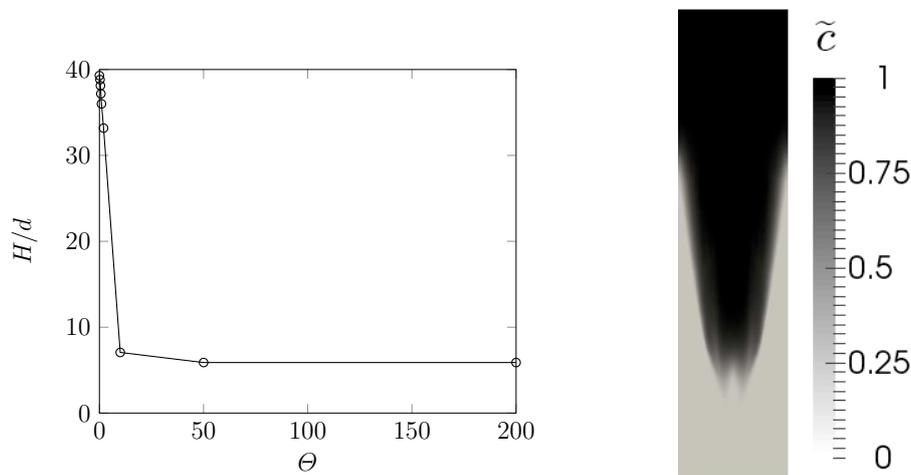


FIGURE 9.34 – Gauche : analyse de sensibilité de la hauteur de flamme adimensionnelle à la valeur du paramètre de modélisation Θ en considérant la propagation de flamme et les processus d'auto-inflammation en même temps. Droite : Champ du taux d'avancement moyen stationnaire obtenu en considérant la propagation de flamme et les processus d'auto-inflammation en même temps ($\Theta = 1$).

très non-linéaire au paramètre de modélisation Θ . La hauteur de flamme varie beaucoup lorsque la valeur de Θ est inférieure à 10. La hauteur de flamme normalisée est de l'ordre de 40 lorsque la valeur de Θ est inférieure à l'unité. Cette valeur correspond à celle mesurée expérimentalement. Pour des valeurs suffisamment grandes (entre 10 et 200) de Θ , il n'y a quasiment pas de dépendance de la hauteur de flamme au paramètre de modélisation. Dans ce cas, la flamme turbulente se stabilise juste à l'aval de la lèvre du brûleur, à

approximativement 3 cm. Le mécanisme de propagation de la flamme turbulente est alors très efficace : la valeur du nombre de Damköhler turbulent Da_T est grande.

Les profils radiaux de la fraction de mélange moyenne $\tilde{\xi}$ et de la température moyenne \tilde{T} issus des calculs numériques pour différentes valeurs du paramètre de modélisation Θ sont tracés suivant quelques distances axiales ($x_1/d = 15, 30, 40, 50$ et 70) sur la figure 9.35. Les résultats les plus satisfaisants sont obtenus lorsque $\Theta = 1$. Néanmoins, des écarts significatifs sont observés en $x_1/d = 40$. Pour mieux comprendre l'origine de ces écarts, les profils radiaux de la fraction de mélange moyenne et de la température moyenne au tour de $x_1/d = 40$ pour la valeur du paramètre de modélisation $\Theta = 1$ sont tracés sur la figure 9.36. Les profils sont sensibles à la position de la flamme stabilisée. Une petite erreur sur la position de la flamme conduit à une grande variation de température. La même conclusion a été tirée de la figure 9.32 présentant les profils axiaux de température moyenne.

Les écarts obtenus entre les résultats numériques et les données expérimentales [31] en $x_1/d = 70$ pour des grandes valeurs de r/d (loin de l'axe central) sont dues au mélange avec l'air ambiant froid qui n'est pas encore pris en compte dans les calculs. L'influence possible de ce mélange composé de trois entrées a déjà été discutée dans les travaux de Gomet et al. [69]. En effet, l'approximation de deux entrées nécessaire à la définition de la fraction de mélange n'est plus valable dans cette zone. De plus, le développement spatial du champ de fraction de mélange est sensible au modèle de turbulence ($k - \epsilon$ et loi gradient). Pour cette raison, les profils de température moyenne sont aussi tracés en fonction de la fraction de mélange moyenne sur la figure 9.37 mais les mêmes défauts sont observés à $x_1/d = 50$.

9.7 Résultats complémentaires

9.7.1 Résultats numériques pour la configuration de Cabra H_2/Air

Pour compléter la validation du modèle proposé dans ce manuscrit, j'ai aussi réalisé la simulation numérique de la flamme H_2/Air introduite dans [30, 178]. Les conditions expérimentales correspondantes sont listées dans le tableau 9.2.

Le schéma cinétique de Ó Conaire et al. [133] est utilisé pour les calculs préliminaires

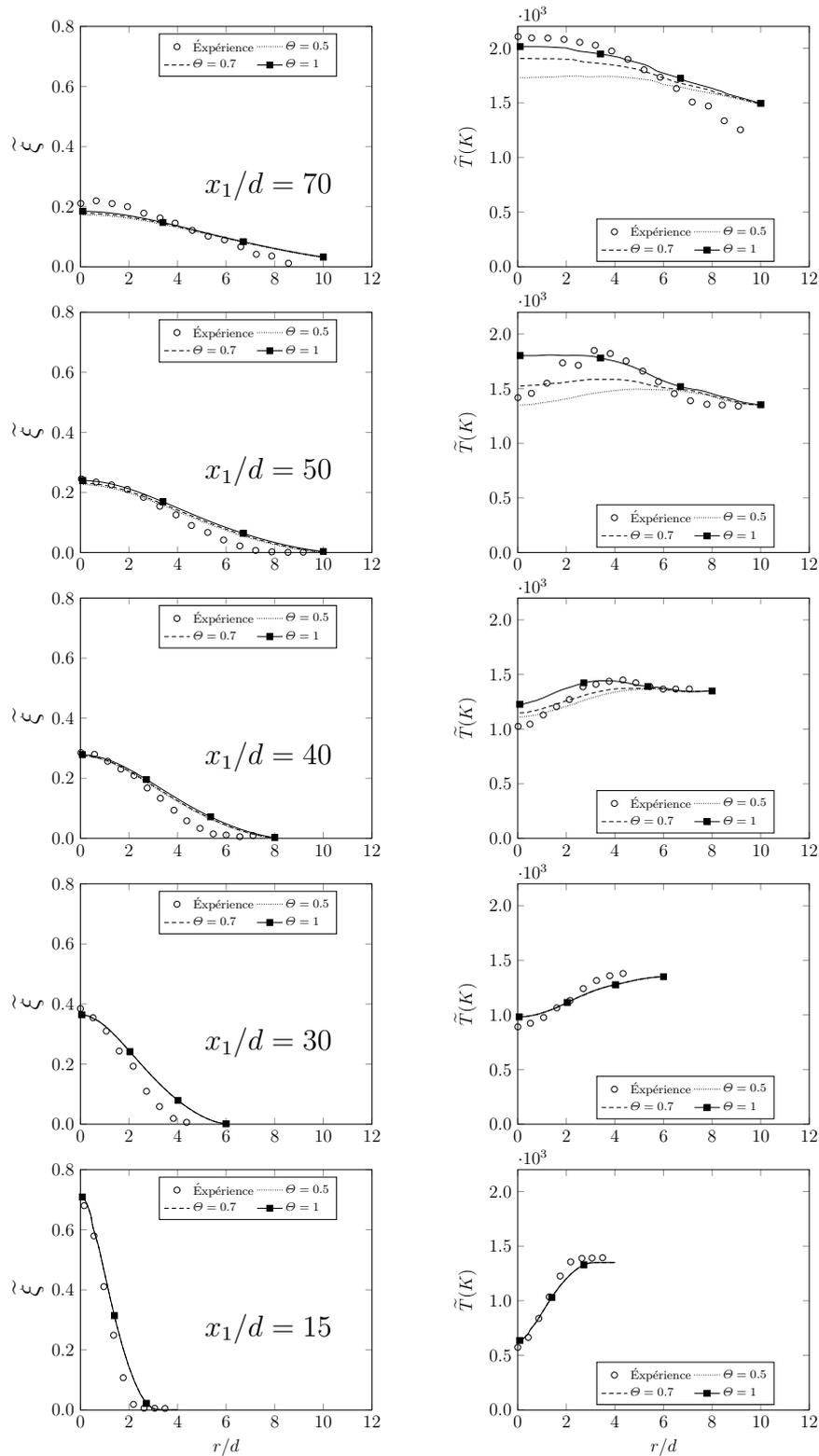


FIGURE 9.35 – Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne (gauche) et de la température moyenne (droite) obtenus à différentes distances axiales de la sortie du brûleur. Comparaison avec des données expérimentales [31] pour différentes valeurs du paramètre de modélisation θ .

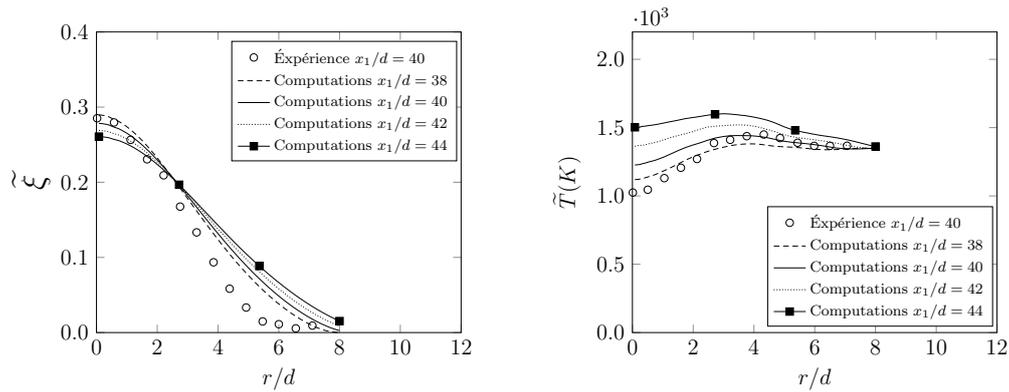


FIGURE 9.36 – Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne et de la température moyenne au tour de $x_1/d = 40$ ($\Theta = 1$).

	d (mm)	V (m/s)	T (K)	X_{O_2}	X_{N_2}	X_{H_2O}	X_{H_2}
CJ	4,57	107	305	0,0021	0,7427	0,0015	0,2537
CF	210	3,5	1045	0,1474	0,7534	0,989	0,0005

TABLE 9.2 – Conditions expérimentales de flamme de Cabra H_2/Air [30], CJ et CF représente respectivement le jet central et le co-courant, d les diamètres correspondants.

permettant de créer la table. La même procédure que celle introduite dans les paragraphes précédents est mise en œuvre. Les données tabulées et les paramètres de modélisation présentés dans la figure 7.1 sont utilisés. L'analyse de la sensibilité des paramètres de modélisation Ka et Θ sont présentées sur la figure 9.38.

D'un point de vue général, ces résultats sont semblables aux résultats des flammes de Cabra CH_4/Air présentés sur les figures 9.32 et 9.33. La figure 9.38 (Haut) montre que lorsque la coupure (c_{min}) des flammes laminaires tabulées diminue, c'est-à-dire lorsque Ka diminue, alors la flamme se stabilise plus près du brûleur en conservant sa structure moyenne.

Les profils de températures moyennes tracés sur la figure 9.38 (Bas) pour différentes valeurs du paramètre de modélisation Θ ont la même tendance que ceux tracés sur la figure 9.33. Cependant, pour une flamme H_2/Air les résultats les plus satisfaisants correspondent à la valeur $\Theta = 1,5$ au lieu de $\Theta = 1$ pour le CH_4/Air .

L'étude de la sensibilité de la hauteur de flamme adimensionnelle H/d est présentée sur

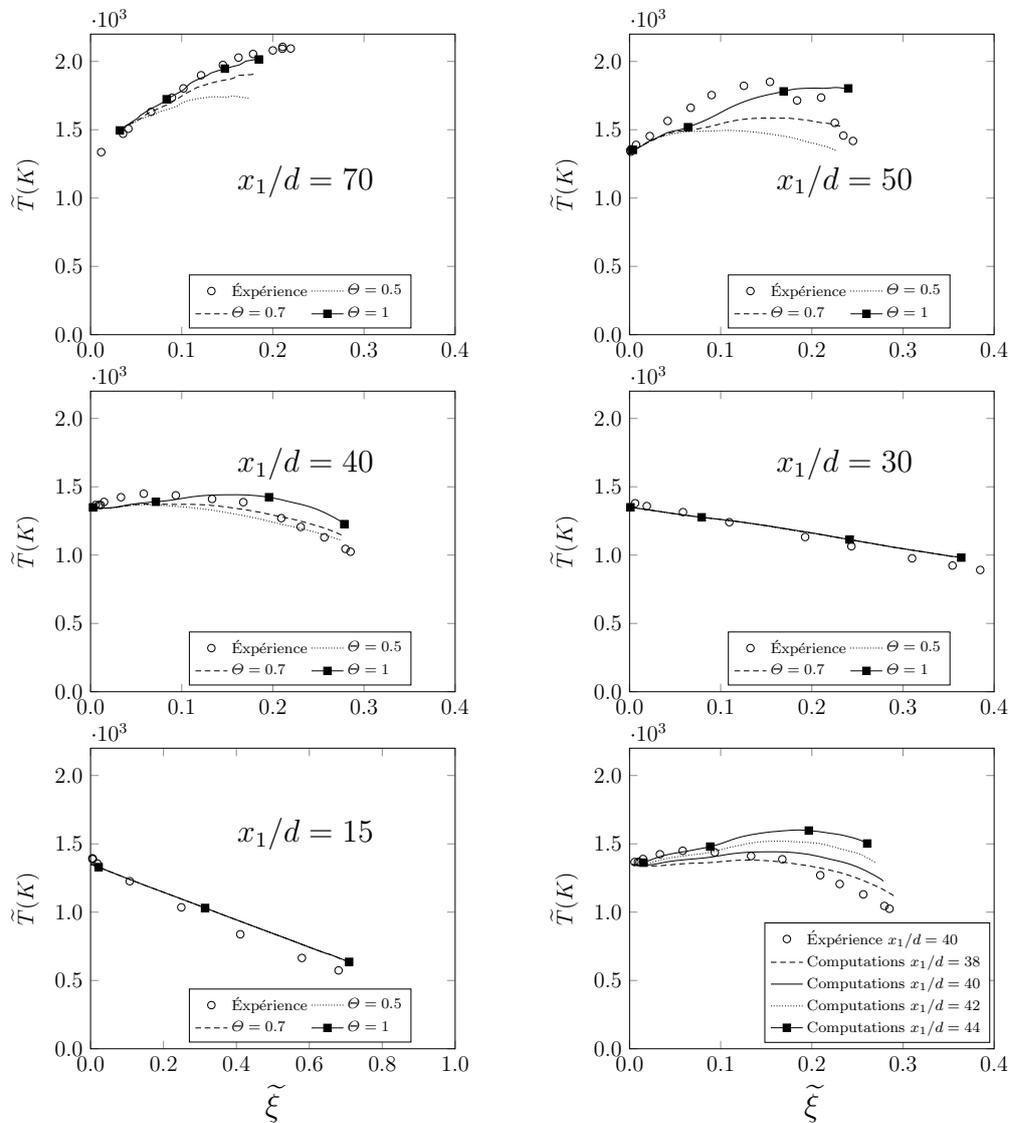


FIGURE 9.37 – Profils radiaux de la température moyenne en fonction de la fraction de mélange moyenne obtenus à différentes distances axiales de la sortie du brûleur pour différentes valeurs du paramètre de modélisation Θ . En bas en droite : résultats obtenus pour $\Theta = 1$ au tour de $x_1/d = 40$.

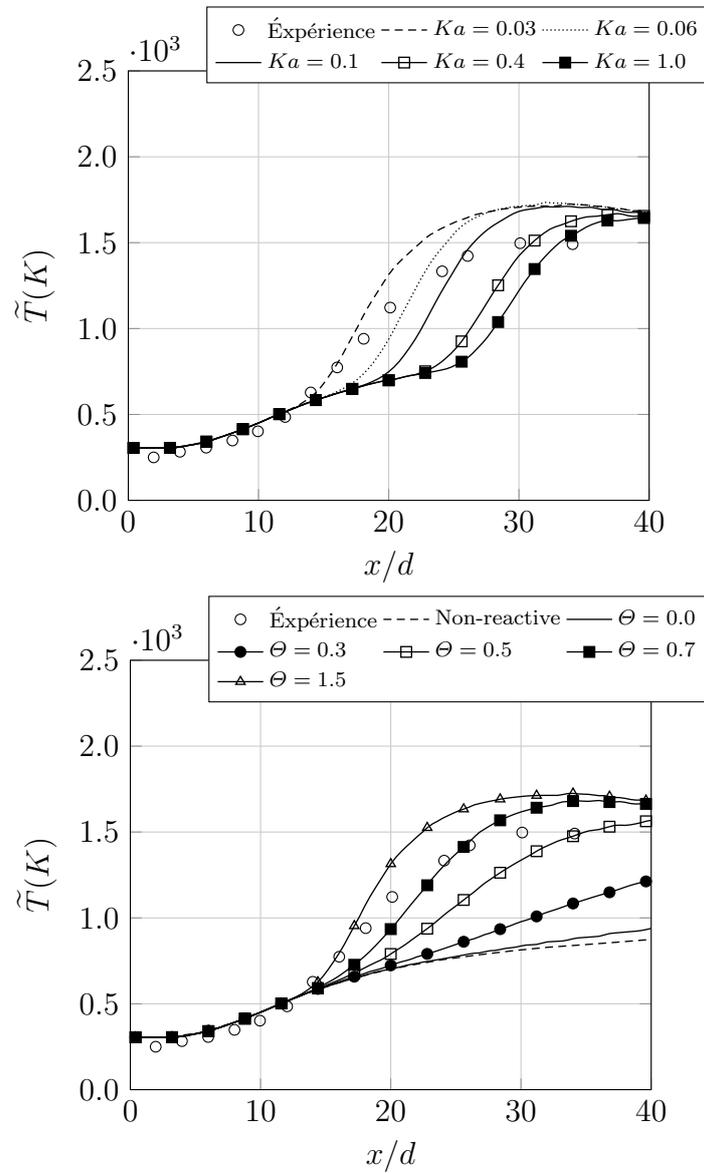


FIGURE 9.38 – Haut : Comparaison entre les profils axiaux de la température moyenne avec des données expérimentales pour différentes valeurs de Ka ($\Theta = 1$). Bas : Comparaison entre les profils axiaux de la température moyenne avec des données expérimentales pour différentes valeurs de Θ ($Ka = 0, 2$).

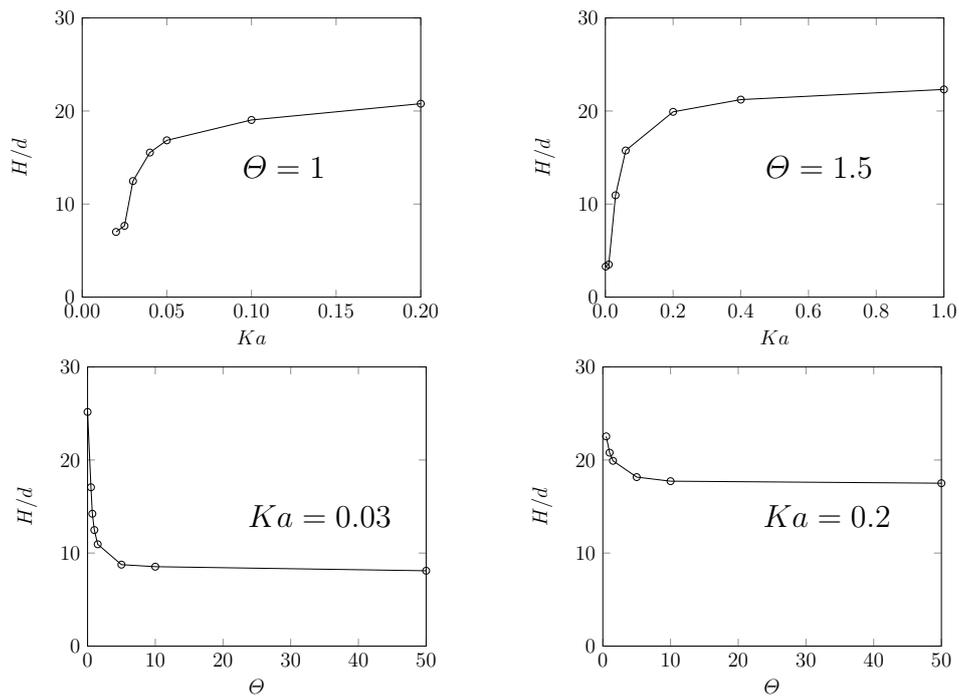


FIGURE 9.39 – Haut : Analyses de sensibilité de la hauteur de flamme adimensionnelle à la valeur du paramètre de modélisation Ka (Gauche : $\Theta = 1$, Droite : $\Theta = 1,5$). Bas : Analyses de sensibilité de la hauteur de flamme adimensionnelle à la valeur du paramètre de modélisation Θ (Gauche : $Ka = 0,03$, Droite : $Ka = 0,2$).

la figure 9.39 pour différentes valeurs des paramètres de modélisation Ka et Θ . Là encore, un comportement très non-linéaire est observé pour tous les cas présentés. Pour une valeur de Θ fixée ($\Theta = 1$ ou $\Theta = 1,5$) la hauteur de flamme augmente avec l'augmentation du nombre de Karlovitz Ka . La hauteur de flamme varie aussi beaucoup pour des petites valeurs du nombre de Karlovitz Ka . Ce résultat montre que la position de stabilisation de la flamme est principalement pilotée par le mécanisme de propagation. Plus la valeur de Ka est petite, plus la propagation contrôle la position. Lorsque la valeur de Ka est fixée ($Ka = 0,03$ ou $Ka = 0,2$), la hauteur de flamme diminue avec l'augmentation de Θ . Plus la valeur Θ est élevée, plus la contribution de la propagation de flamme est importante. Là encore le paramètre Θ ne joue plus aucun rôle dès lors que sa valeur est grande $\Theta > 10$. C'est le mélange en sortie de buse qui pilote alors la hauteur de stabilisation de la flamme dans ce cas.

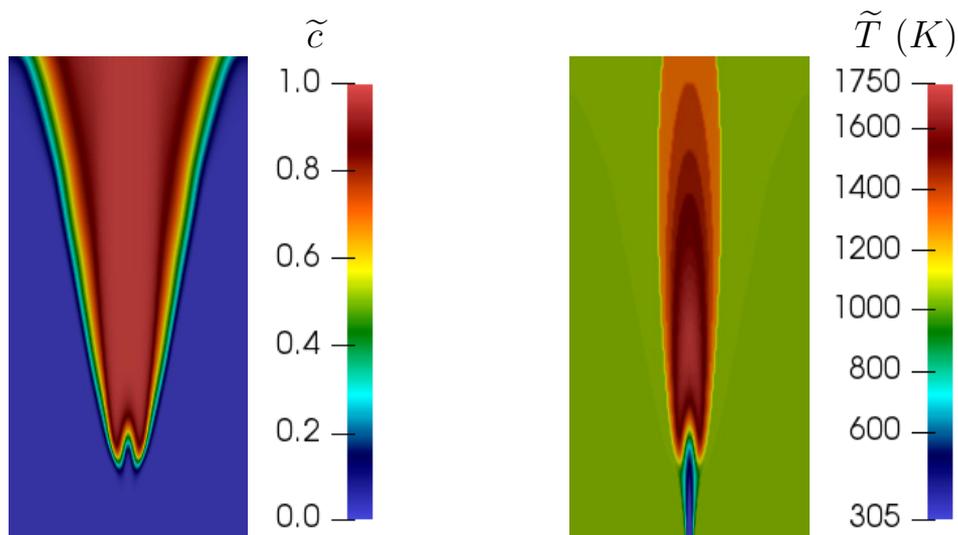


FIGURE 9.40 – Gauche : le champ du taux d'avancement moyen pour H_2/Air lorsque $Ka = 0,03$ et $\Theta = 1,5$. Droite : le champ de la température moyenne pour H_2/Air lorsque $Ka = 0,03$ et $\Theta = 1,5$.

Les champs du taux d'avancement moyen et de la température moyenne présentés sur la figure 9.40 sont obtenus pour le cas $Ka = 0,03$ et $\Theta = 1,5$ qui nous permet d'avoir une hauteur de flamme satisfaisante : $H = 5\text{ cm}$ par rapport à hauteur mesurée expérimentalement $H = 4,57\text{ cm}$.

9.7.2 Prise en compte des fluctuations du temps de résidence τ_r

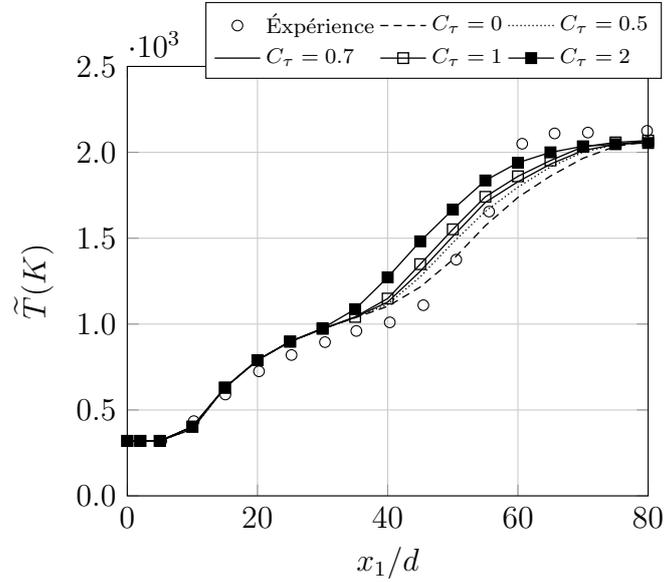


FIGURE 9.41 – Données expérimentales et profils axiaux de la température moyenne issus des calculs numériques pour différentes valeurs de C_τ ($\Theta = 0.3$).

Les fluctuations du temps de résidence τ_r ont été négligées dans les résultats présentés précédemment. La PDF du temps de résidence est donc une fonction de Dirac, voir Eq. (6.2), centrée sur la valeur moyenne $\bar{\tau}_r$. En revanche, les fluctuations de temps de résidence normalisé sont bien prises en compte via les fluctuations de délai d'auto-allumage associées à la PDF de fraction de mélange. Afin de tenir compte également des fluctuations du temps de résidence τ_r , la décomposition suivante est introduite :

$$\tau_r = \bar{\tau}_r + \tau_r' \quad (9.7)$$

Ce qui nous permet de réécrire l'équation (6.9) :

$$\tilde{\tau}^* = \int_0^1 \int_0^\infty \frac{\bar{\tau}_r + \tau_r'}{\tau_i(\xi)} \tilde{P}(\tau_r, \xi) d\tau_r d\xi, \quad (9.8)$$

En gardant la même hypothèse d'indépendance statistiques du temps de résidence et de la fraction de mélange ($\tilde{P}(\tau_r, \xi) = \tilde{P}(\tau_r) * \tilde{P}(\xi)$), le temps de résidence normalisé s'écrit :

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}^* &= \bar{\tau}_r \int_0^1 \frac{1}{\tau_i(\xi)} \tilde{P}(\xi) d\xi + \int_0^1 \frac{1}{\tau_i(\xi)} \tilde{P}(\xi) d\xi \int_0^\infty \tau_r' \tilde{P}(\tau_r) d\tau_r \\ &= \frac{\bar{\tau}_r}{T_i} + \frac{\int_0^\infty \tau_r' \tilde{P}(\tau_r) d\tau_r}{T_i}, \end{aligned} \quad (9.9)$$

Afin de évaluer l'impact de cette fluctuation du temps de résidence τ_r à la stabilisation de flamme, une formule simple introduisant un paramètre est proposée :

$$\int_0^\infty \tau_r' d\tau_r = C_\tau * \frac{\tilde{k}}{\tilde{\epsilon}} \quad (9.10)$$

où C_τ est le paramètre de modélisation. En prenant $\Theta = 0,3$, les profils axiaux de la température, les profils radiaux de la fraction de mélange moyenne et de la température moyenne pour différentes valeurs de C_τ sont respectivement tracés sur les figures 9.41 et 9.42. La prise en compte des fluctuations du temps de résidence normalisé permet d'améliorer les profils de températures radiaux autour de la zone où la flamme se stabilise. Les analyses de résultats autour de $x_1/d = 40$ et $x_1/d = 50$ sont respectivement présentées sur les figures 9.43 et 9.44 pour le cas plus satisfaisant où $\Theta = 0,3$ et $C_\tau = 0,7$.

Toutefois, l'introduction d'un nouveau paramètre n'est pas encore complètement convaincante. Une distribution adaptée au temps de résidence devrait être introduite pour tenir compte de ces fluctuations. De plus, nous avons vu que les profils sont très sensibles aux paramètres impliqués dans le mécanisme de propagation de flamme.

9.8 Conclusions

Le comportement du **modèle de propagation seul** a été étudié en détail et a mis en évidence des résultats attendus :

- La flamme ne peut se stabiliser que si le domaine est initialisé correctement. Une étincelle peut suffire à allumer le mélange mais sa position et l'énergie apportée doivent être choisie avec beaucoup de précision.
- Les paramètres de modélisation ont peu d'impact sur le résultat dès lors que la flamme est accrochée à la lèvres du brûleur.

Le comportement du **modèle d'auto-inflammation seul** qui ne fait pas intervenir directement de paramètre de modélisation a mis en évidence :

- La flamme se stabilise à une hauteur fixée par l'intégration des délais d'auto-allumage dans la couche de mélange.
- La prise en compte de l'effet des fluctuations de composition sur les fluctuations de temps de résidence normalisé a un impact significatif sur le terme source chimique.

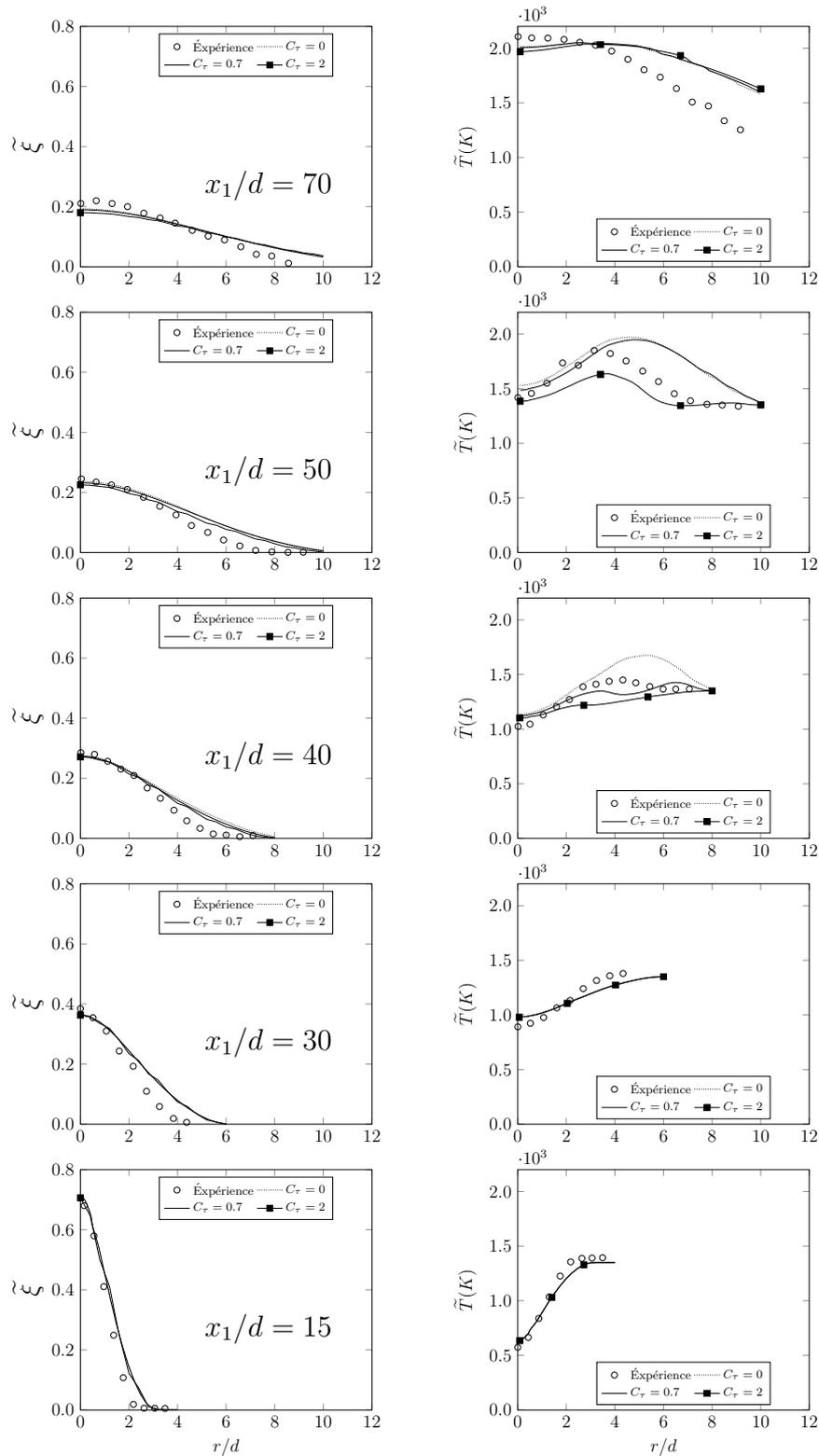


FIGURE 9.42 – Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne (gauche) et de la température moyenne (droite) obtenus à différentes distances axiales de la sortie du brûleur. Comparaison avec des données expérimentales [31] pour différentes valeurs du paramètre de modélisation C_τ ($\Theta = 0, 3$).

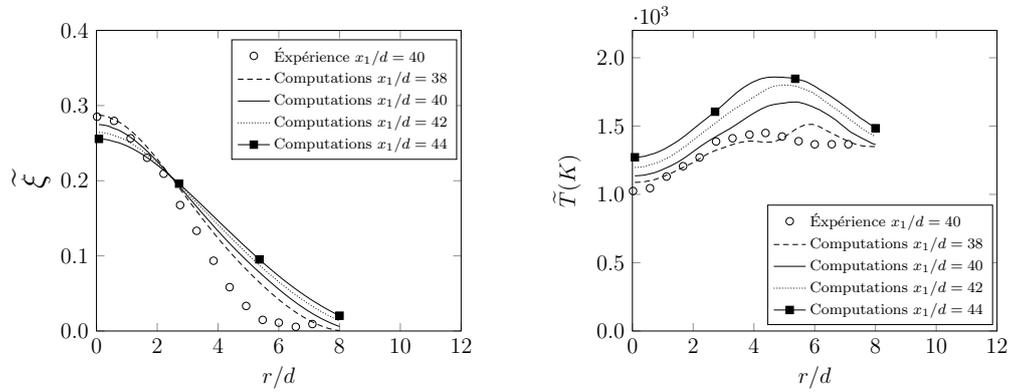


FIGURE 9.43 – Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne et de la température moyenne au tour de $x_1/d = 40$ ($\Theta = 0,3$ et $C_\tau = 0,7$).

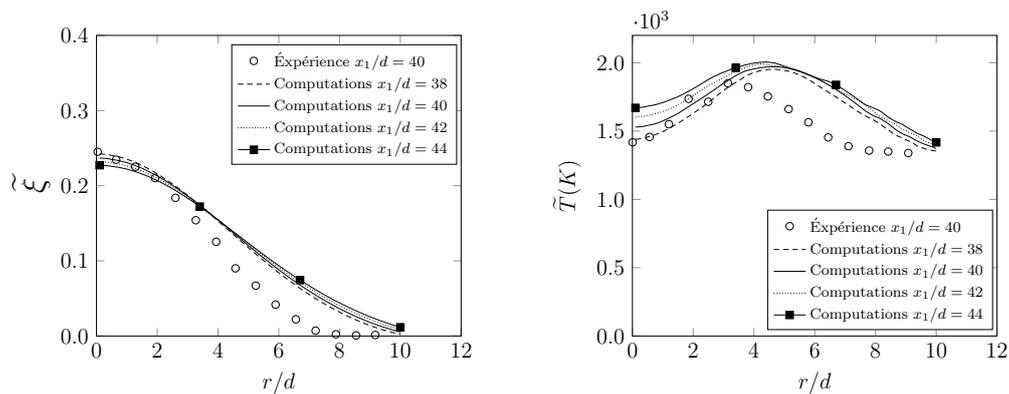


FIGURE 9.44 – Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne et de la température moyenne au tour de $x_1/d = 50$ ($\Theta = 0,3$ et $C_\tau = 0,7$).

- Les limites de la table de données chimiques ont peu d'impact sur les résultats.
- La composition des mélanges utilisés pour construire la table doit être déterminée avec beaucoup de soin car elle peut avoir une influence forte sur les délais d'auto-allumage pour des compositions proches de la composition la plus réactive (très faible valeur de ξ dans ce cas).

Le comportement du **modèle lorsque l'auto-inflammation et la propagation interagissent** a mis en évidence :

- Les limites de coupure de la table de données chimiques d'auto-inflammation ont un impact significatif.
- Les contributions au terme source moyen de l'auto-inflammation et de la propagation sont localisées dans des zones très différentes de l'écoulement.
- Le mécanisme de propagation contrôle la hauteur de stabilisation de la flamme.
- Les paramètres du modèle de propagation ont un impact significatif sur la hauteur de stabilisation de la flamme.

Enfin, le processus de stabilisation est le suivant : (i) le mélange entre deux courants produit des zones où le délai d'auto-allumage est suffisamment faible, (ii) les particules vieillissent sous l'action du terme source de temps de résidence normalisé, (iii) la contribution d'auto-inflammation du terme source chimique fait augmenter très légèrement la variable d'avancement, (iv) l'augmentation de \tilde{c} suffit pour déclencher la contribution de la propagation.

Ainsi, nous pouvons conclure que dans un cas laminaire l'auto-inflammation modifie la vitesse de propagation S_L en modifiant légèrement les compositions du mélange alors que dans un cas turbulent l'auto-inflammation modifie la vitesse de propagation S_T en modifiant légèrement les caractéristiques au bord d'attaque de la flamme.

Chapitre 10

Application à une chambre de combustion à volume constant (LES)

Le modèle introduit dans ce travail a été validé sur des configurations très simplifiées au chapitre 8 puis appliqué à la simulation de la flamme de Cabra [30, 31] au chapitre 9. Ces dernières simulations ont permis d'étudier le comportement du modèle et de montrer sa capacité à reproduire quantitativement les mesures. La répartition dans l'écoulement des contributions de l'auto-allumage et de la propagation ont pu être analysée en détail. Les simulations ont aussi mis en évidence une sensibilité importante des résultats aux valeurs des paramètres du modèle de propagation. Cette sensibilité qui est inévitable pour des simulations RANS devrait être moins importante pour des simulations LES où une plus grande partie des échelles caractéristiques sont résolues. C'est du moins ce qui est attendu. Toutefois, lorsqu'il s'agit de simulations LES d'écoulements pratiques comme celui que je vais présenter dans ce chapitre, atteindre une résolution suffisante pour que les valeurs des paramètres numériques ou de modélisation n'aient plus d'impact sur les résultats est très difficile. En effet, il faudrait une résolution proche de celle attendue en DNS pour que les paramètres des modèles utilisés en combustion turbulente qui représentent les mécanismes chimiques très non-linéaires n'est plus d'impact sur le résultat [112]. De plus, même dans un cas très résolu, les paramètres numériques, la spécification des conditions aux limites, le niveau de détail du mécanisme réactionnel et sa validité sur les larges plages de conditions rencontrées en pratique conduiraient inévitablement à des incertitudes importantes sur les résultats. Ainsi, le choix qui est fait dans ce chapitre est d'utiliser le modèle d'interaction

propagation/auto-inflammation tel qu'il a été développé dans les chapitres précédents, sans adaptation particulière pour la LES (le modèle est tout de même légèrement modifié pour tenir compte de la compressibilité et de la dilution), et d'assumer la présence de paramètres en les utilisant pour obtenir les résultats numériques les plus proches possibles des observations expérimentales et des mesures. La simulation n'a donc pas pour objectif d'être prédictive mais les résultats serviront à compléter les mesures pour permettre des analyses plus précises de l'écoulement.

Les résultats présentés dans ce chapitre sont des résultats préliminaires issus d'un travail en cours dont l'objectif est d'analyser l'écoulement d'une configuration expérimentale récemment développée au laboratoire par Michalski [113]. Cette installation qui est présentée dans le paragraphe suivant, est une chambre de combustion à volume constant fonctionnant de manière cyclique dans des conditions expérimentales réalistes (du point de vue de la vitesse d'écoulement, de la pression et des températures) dont la géométrie et les technologies sont simplifiées. Les conditions opératoires permettent d'obtenir différents régimes de combustion, certains où l'allumage est commandé (étincelle) et la combustion a lieu uniquement par propagation de flammes [113] et d'autres où l'auto-inflammation a lieu avant l'étincelle et perturbe ainsi les cycles obtenus [114]. Le premier cas qui a été étudié numériquement par Kha [113] a permis de valider le modèle de propagation et la procédure d'ajustement des paramètres de simulation. Ce travail est présenté dans le second paragraphe de ce chapitre. Mon travail consiste maintenant à finaliser l'implantation du modèle complet pour étudier les cas où le mélange s'auto-allume. Les premiers résultats qualitatifs sont présentés dans le dernier chapitre.

10.1 Description de la configuration CV2

Les dimensions de cette chambre de combustion rectangulaire présentée sur la figure figure 10.1 sont $50\text{ mm} * 50\text{ mm} * 100\text{ mm}$. Le diamètre intérieur des tubes cylindriques d'alimentation en air et d'échappement mesure 12 mm . L'injection directe de propane est réalisée par quatre injecteurs annulaires. Les vannes rapides d'entrée d'air et d'échappement, l'allumeur et les injecteurs ont été choisis pour limiter au maximum les difficultés techniques rencontrées dans les chambres de combustion de type CVC qui

sont plus proches de configurations industrielles. Ces technologies sont décrites de manière précise dans les travaux de Michalski [116]. Le volume de la chambre utilisé pour les simulations numériques est présentée sur la figure 10.2 (Gauche) et le maillage associé est présenté sur la figure 10.2 (Droite). Ce maillage est composé d'environ 34 millions de cellules de $0,2\text{ mm}$ à $0,5\text{ mm}$ dont la majorité sont hexaédriques.

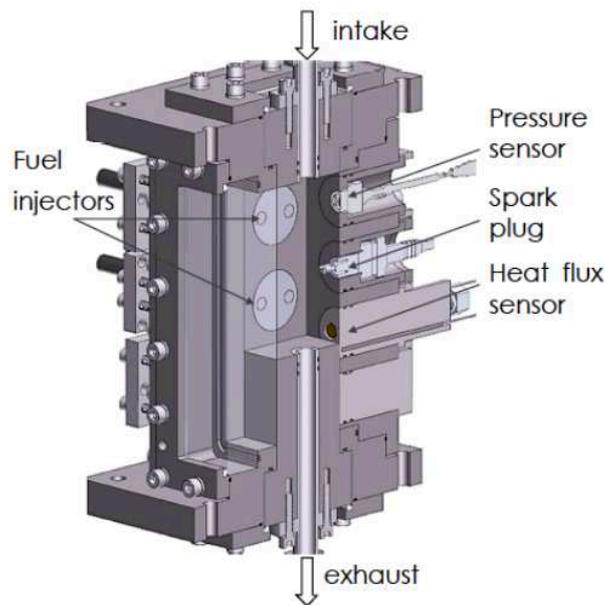


FIGURE 10.1 – Schéma représentatif de CV2 [113, 116]

Les accès optiques qui permettent de visualiser l'intérieur de la chambre vont permettre de valider qualitativement et quantitativement les simulations numériques sur la base de différents diagnostics (PIV, Chimiluminescence) [113]. Le signal de pression mesuré est utilisé pour déterminer les différents paramètres de modélisation des différentes phases de fonctionnement, voir figure 10.3. Les différentes phases qui constituent un cycle de fonctionnement de 125 ms sont :

Phase I : L'admission d'air et l'injection de combustible (point 1 à 2 de la figure 10.3)

Phase II : L'homogénéisation des réactifs (point 2 à 3 de la figure 10.3)

Phase III : L'allumage suivi de la combustion (point 3 à 4 de la figure 10.3)

Phase IV : L'homogénéisation des gaz brûlés (point 4 à 4' de la figure 10.3)

Phase V : L'échappement (point 4' à 5 de la figure 10.3)

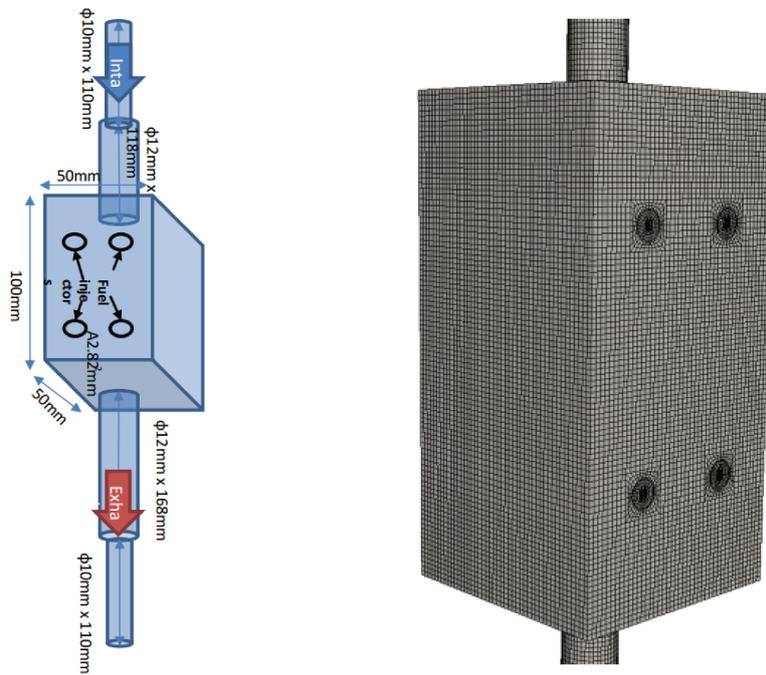


FIGURE 10.2 – Gauche : configuration numérique simplifiée, Droite : un maillage utilisé.

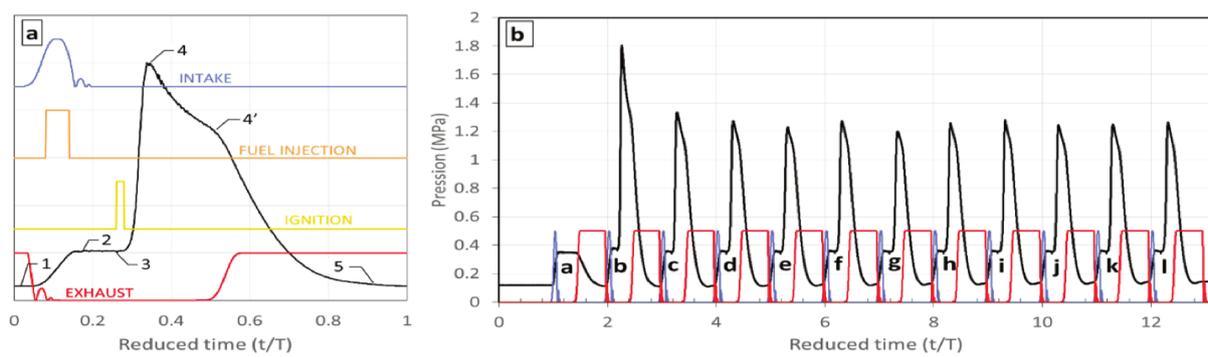


FIGURE 10.3 – Signal de pression temporel mesuré [113].

La pression augmente d'abord lors de l'injection des réactifs (Phase I) puis est stable pendant la phase II qui correspond au temps entre la fin de l'injection et l'allumage qui a lieu $32,5\text{ ms}$ après le début de l'admission d'air. La pression augmente ensuite brutalement pendant la combustion (phase III) puis diminue par les pertes thermiques aux parois (phase IV). Enfin, la pression diminue plus fortement pendant la phase V d'échappement. Chaque expérience correspond à une succession de 12 cycles, voir figure 10.3. Les cycles sont quasiment statistiquement stables à partir quatrième, voir figure 10.3. Les simulations numériques effectuées correspondent donc à ces quatre premiers cycles [113], voir 10.4. Le signal de pression expérimentale correspondant à la phase I a permis de déterminer

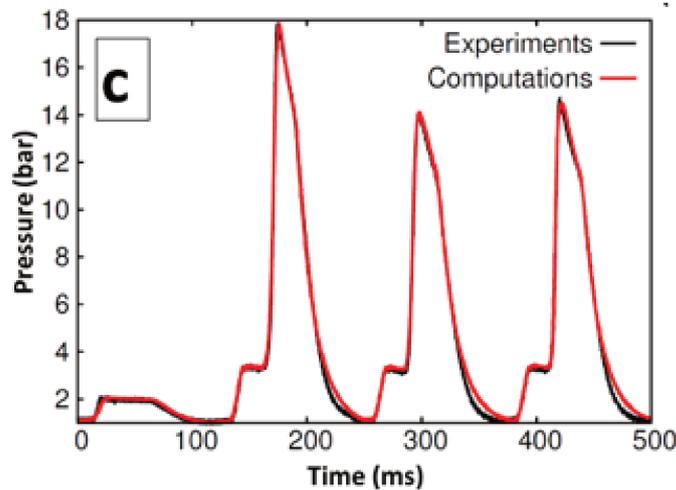


FIGURE 10.4 – Comparaison de signal de pression temporel issu des simulations numériques avec celui mesuré expérimentalement pour les quatre premiers cycles [113].

précisément la condition limite d'entrée du domaine de calcul. Le signal correspondant à la phase III a permis de déterminer les paramètres du modèle de propagation (c_{min} , Θ). Le signal correspondant à la phase IV a permis de déterminer les paramètres du modèle de pertes thermiques aux parois. Le signal correspondant à la phase V a permis de déterminer les paramètres de la condition limite de sortie du domaine de calcul.

Deux conditions opératoires ont été étudiées numériquement. La première correspond aux conditions basse pression présentées sur les figures 10.3 et 10.4 et dans la référence [113] où l'injection d'air conduit à une augmentation de pression de un à trois bar et où l'allumage est commandé par l'étincelle. Cette étude a permis de valider la procédure numérique d'ajustement des paramètres. La seconde [114] est celle utilisée pour

évaluer le modèle présenté dans ce travail, et qui correspond à une augmentation de pression de trois à cinq bar pendant la phase d'admission, voir figure 10.5. On peut voir dans

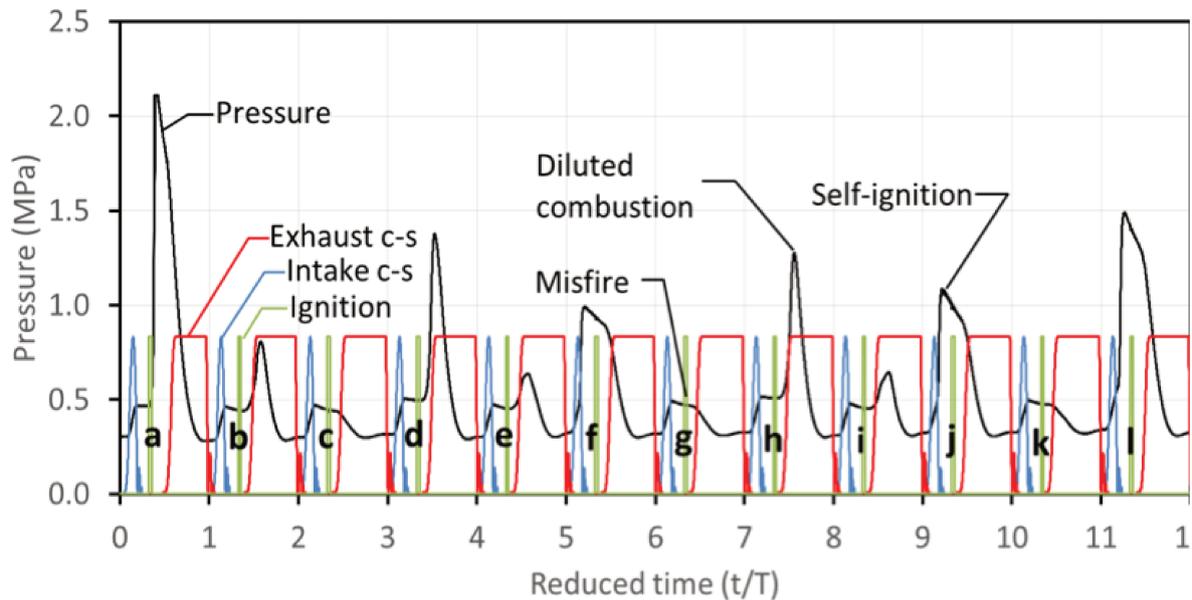


FIGURE 10.5 – Signal de pression temporel pendant la phase d'admission [114].

ce cas que les cycles sont très instables : certains ne s'allument pas malgré l'étincelle, d'autres brûlent partiellement et enfin certains s'auto-allument avant l'étincelle.

10.2 Cas basse pression : propagation seul

Les résultats numériques présentés ci-dessous ont été obtenus par Kha [83, 113]. Le solveur utilisé est OpenFOAM, voir annexe. La qualité du maillage qui a été évaluée par l'indice IQ et par le rapport des viscosités turbulentes et moléculaires est satisfaisante [113]. Les équations de Navier-Stokes filtrées spatialement présentées dans le chapitre 1 sont utilisées avec le modèle WALE. Le modèle de pertes thermiques aux parois est celui proposé par Rivère et al. [150]. L'étincelle est modélisée par un volume parfaitement catalytique. Le modèle de propagation est le même que celui présenté dans cette thèse bien qu'il utilise la fraction massique de combustible à la place de la variable d'avancement. En plus de la fraction de mélange qui décrit le mélange entre l'entrée d'air et l'entrée de combustible, des variables supplémentaires sont nécessaires pour décrire l'état thermo-chimique local : la température ou l'enthalpie sensible car le milieu est compressible et aussi soumis à des

perdes thermiques aux parois, une variable non réactive représentative de la fraction de gaz brûlés résiduels du cycle précédent. La fraction massique de combustible (variable d'avancement), la fraction de mélange et la fraction de gaz brûlés résiduels sont réinitialisées à chaque cycle mais pas la température. Une difficulté importante pour l'utilisation de ce modèle est la création de la table des données des caractéristiques propagatives des flammelettes. Une table simplifiée, ne dépendant que de la fraction de mélange et de la fraction de gaz brûlés résiduels, a été utilisée dans cette première étude. Les erreurs engendrées par ces approximations sont atténuées par l'utilisation des paramètres du modèle de propagation pour reproduire une montée en pression dans la chambre pendant la phase de combustion en accord avec les données expérimentales. La condition à la limite d'entrée a été déterminée de manière suffisamment précise [116] pour retrouver une montée en pression pendant la phase d'injection en accord avec les données expérimentales, voir figure 10.5. La comparaison qualitative du champ de vitesse pendant la phase d'injection

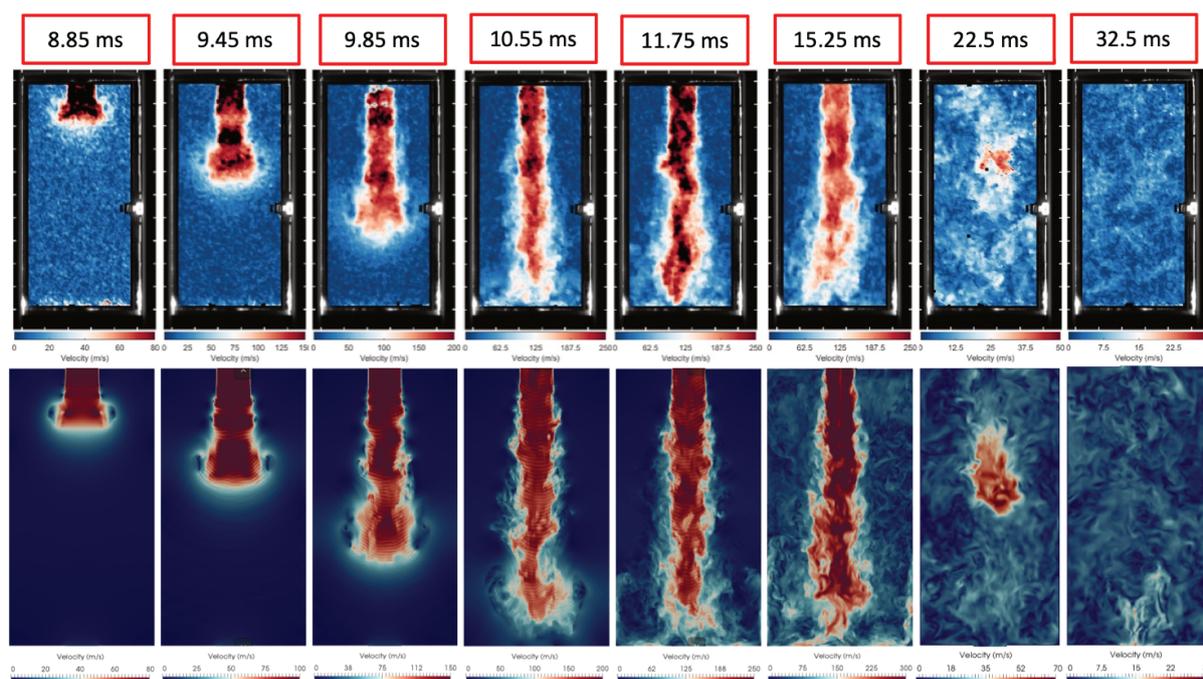


FIGURE 10.6 – Champs de la vitesse obtenus des mesures par PIV (haut) et issus des simulations numériques (bas) pendant la phase d'admission.

avec les données PIV est tout à fait satisfaisante, voir la figure 10.6. Des validations quantitatives sont aussi présentées dans Michalski et al. [113]. Le champ de température pendant la phase de combustion est comparé à la visualisation rapide par chimilumines-

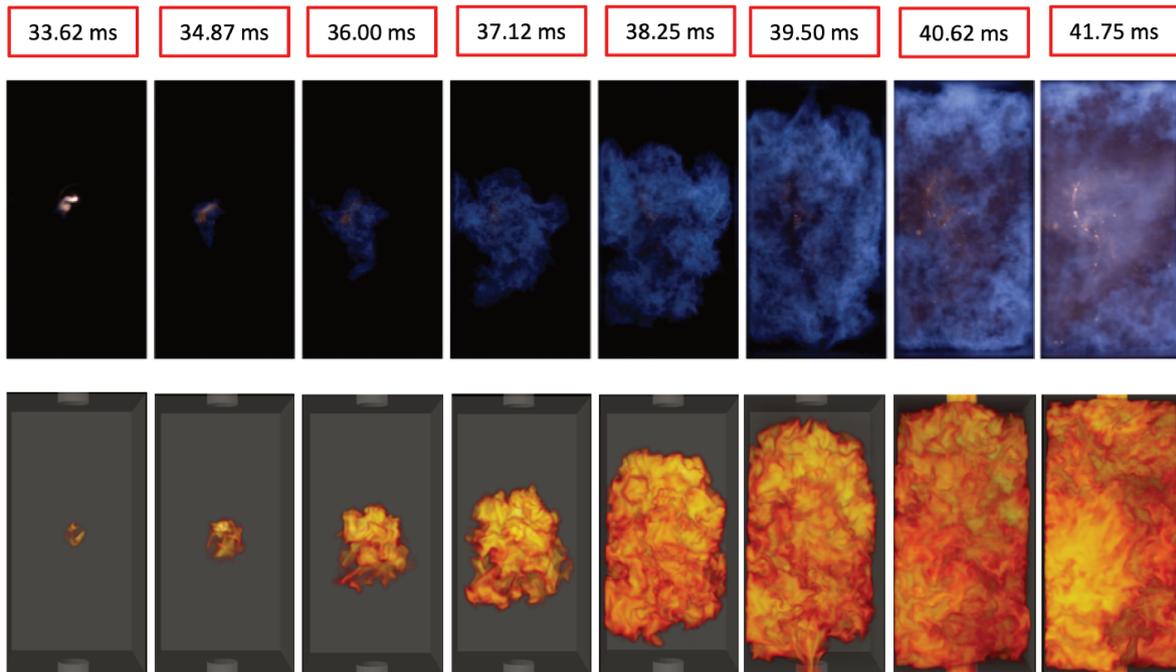


FIGURE 10.7 – Champs de la température issue des simulations numériques (haut) et observés expérimentalement (bas) à mêmes instants.

cence de la flamme, voir figure 10.7. La croissance de la flamme obtenue par le modèle de propagation depuis l’allumage par étincelle jusqu’à la fin de la phase de combustion est tout à fait représentative des observations expérimentales.

10.3 Cas haute pression : auto-inflammation et propagation

Le cas expérimental où l’auto-inflammation a lieu est plus délicat à simuler car les cycles se comportent très différemment les uns des autres, voir figure 10.4. Dans ce premier cas test, le cycle simulé correspond à un cycle suivant un cycle réactif de telle sorte que l’injection des réactifs a lieu dans un milieu chaud : les gaz brûlés résiduels. Ainsi, l’auto-inflammation peut donc être déclenchée sous l’effet de l’augmentation de température par compression lors de l’injection ou sous l’effet de l’augmentation de température par le mélange avec les gaz brûlés résiduels. Une première étude des délais d’auto-allumage (réacteurs *0D Cantera*) pour différentes valeurs de fraction de mélange, de fraction de

gaz résiduels et de température des gaz frais a montré que l'auto-allumage ne pouvait avoir lieu sous l'effet de la compression seulement mais qu'il était dû à la fois à l'augmentation de température due à la compression et au mélange avec les gaz brûlés résiduels. Dans ces premières simulations tests, des tables réduites des propriétés d'auto-allumage basées sur l'auto-similarité du terme source et qui ne dépendent que de la fraction de mélange et de la température des gaz frais ont été créées. Il faut donc pour pouvoir utiliser ces tables, introduire une variable représentative de la température des gaz frais. Une équation de transport supplémentaire est donc nécessaire mais, dans un premier temps, cette température de gaz frais est estimée par la formule suivante :

$$\tilde{T}_u = \tilde{T} - \frac{\tilde{Y}_{max} - \tilde{Y}}{\tilde{Y}_{max} - \tilde{Y}_{min}} \frac{\tilde{\Delta h}}{C_p} \quad (10.1)$$

avec C_p la capacité thermique isobare, Δh l'enthalpie de la réaction et Y la fraction massique de combustible. Les valeurs extrêmes Y_{max} et Y_{min} ainsi que Δh sont des quantités tabulées en fonction de la fraction de mélange.

Les champs de température et de temps de résidence normalisés à différents instants dans la chambre sont présentés sur les figures 10.8, 10.9 et 10.10.

On peut voir que la température initiale est élevée (gaz résiduels) puis diminue lors de l'injection de l'air et du combustible. La température reste néanmoins élevée dans les zones de recirculation près du tube d'alimentation en air où les gaz brûlés résiduels sont piégés. L'air, le combustible et les gaz résiduels se mélangent suffisamment pour qu'un prémélange chaud apparaisse. Le temps de résidence normalisé augmente (les particules vieillissent) donc dans ces zones puis diminue légèrement sous l'effet de la diffusion mais il reste suffisamment élevé pour déclencher le mécanisme de propagation de flamme. Une comparaison qualitative avec les résultats expérimentaux (chimiluminescence et signal de pression) est présentée sur la figure 10.11.

10.4 Conclusions et perspectives

Les résultats numériques présentés ici sont des résultats préliminaires qui confirment l'efficacité du modèle d'auto-inflammation et montrent la capacité du modèle à reproduire les observations expérimentales. Toutefois, ces simulations nécessitent encore beaucoup

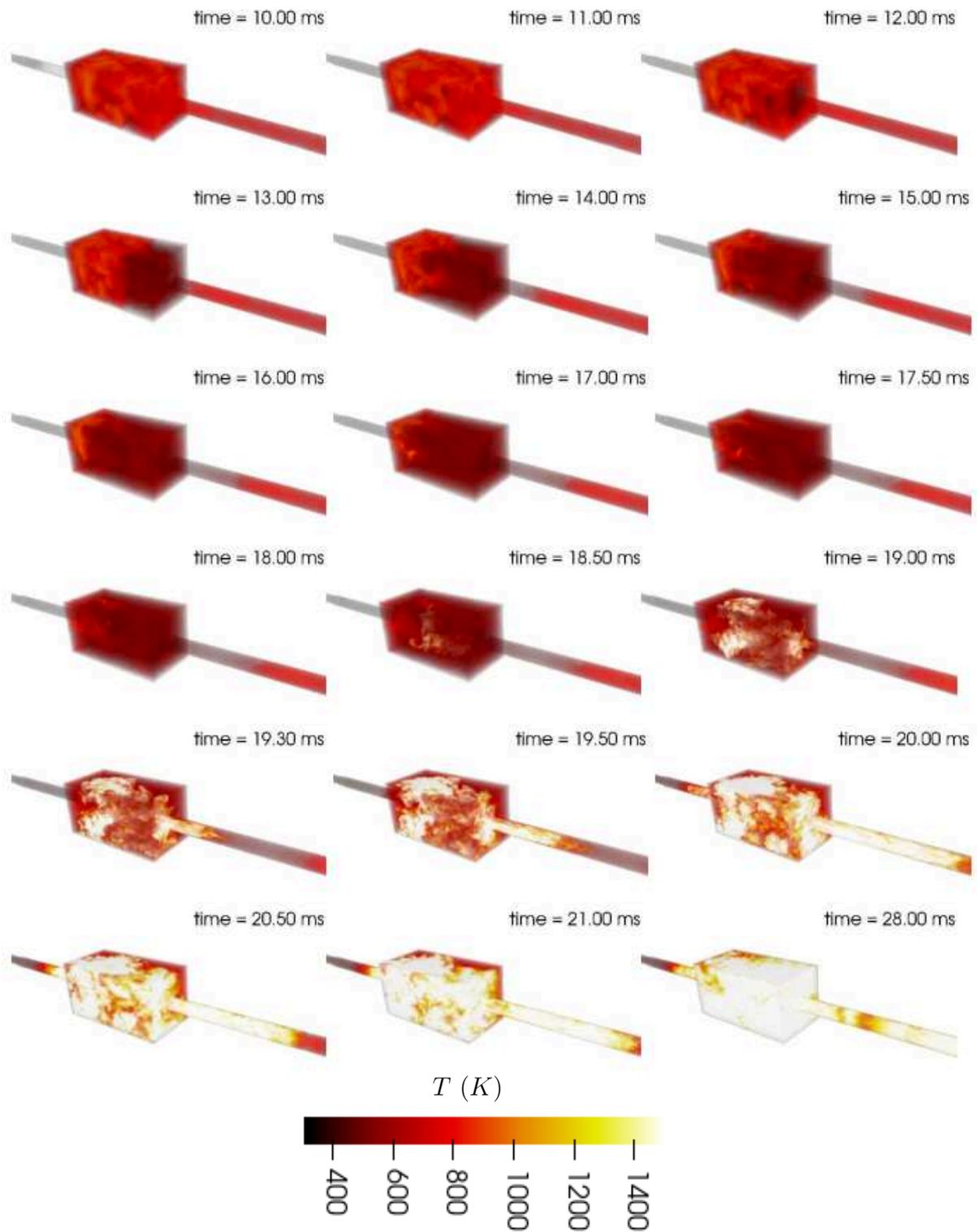


FIGURE 10.8 – Champs de la température à différents instants dans la chambre.

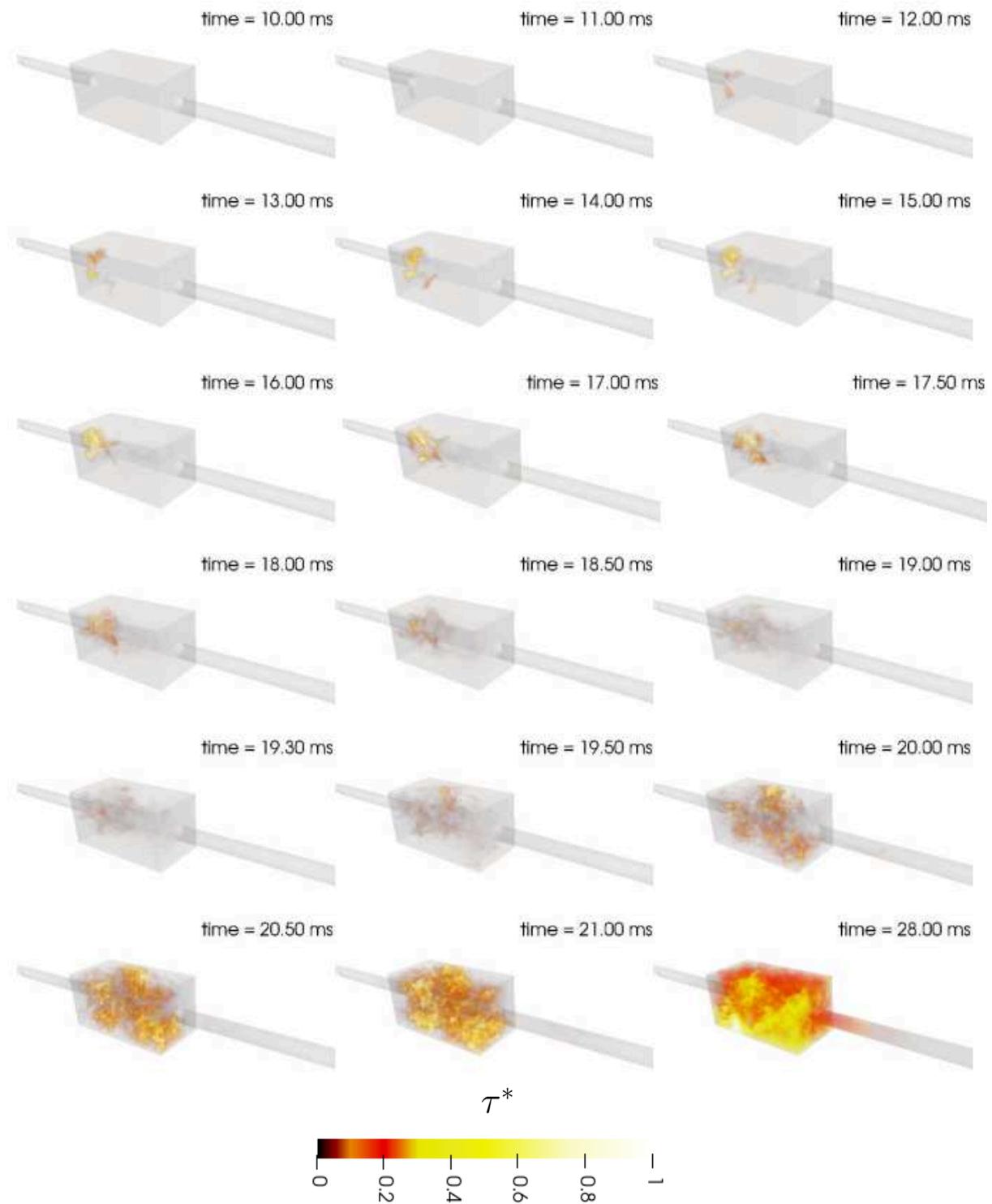


FIGURE 10.9 – Champs du temps de résidence normalisé à différents instants dans la chambre.

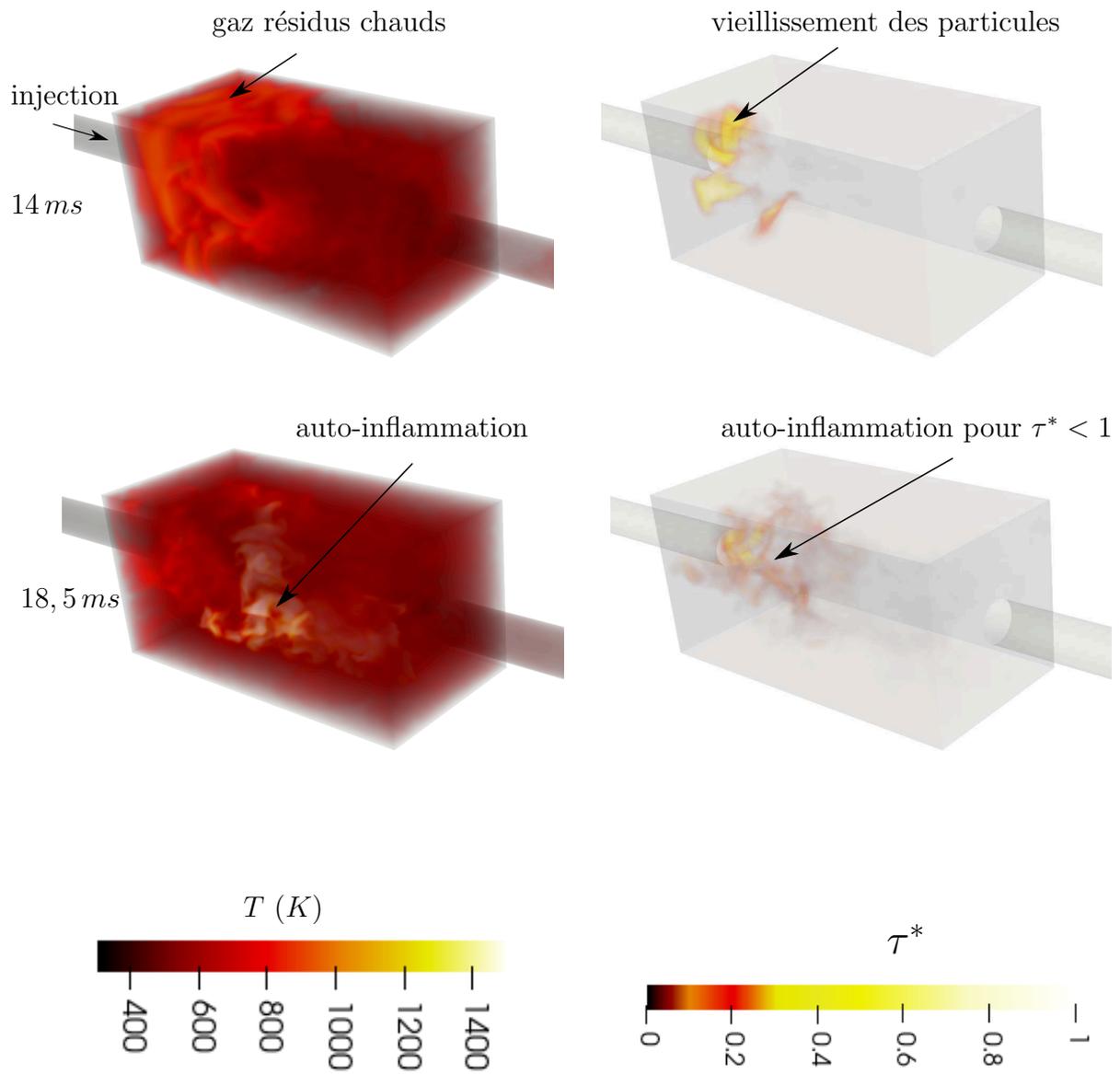


FIGURE 10.10 – Champs de la température et du temps de résidence normalisé à 14 ms (haut) et 18,5 ms (bas) dans la chambre.

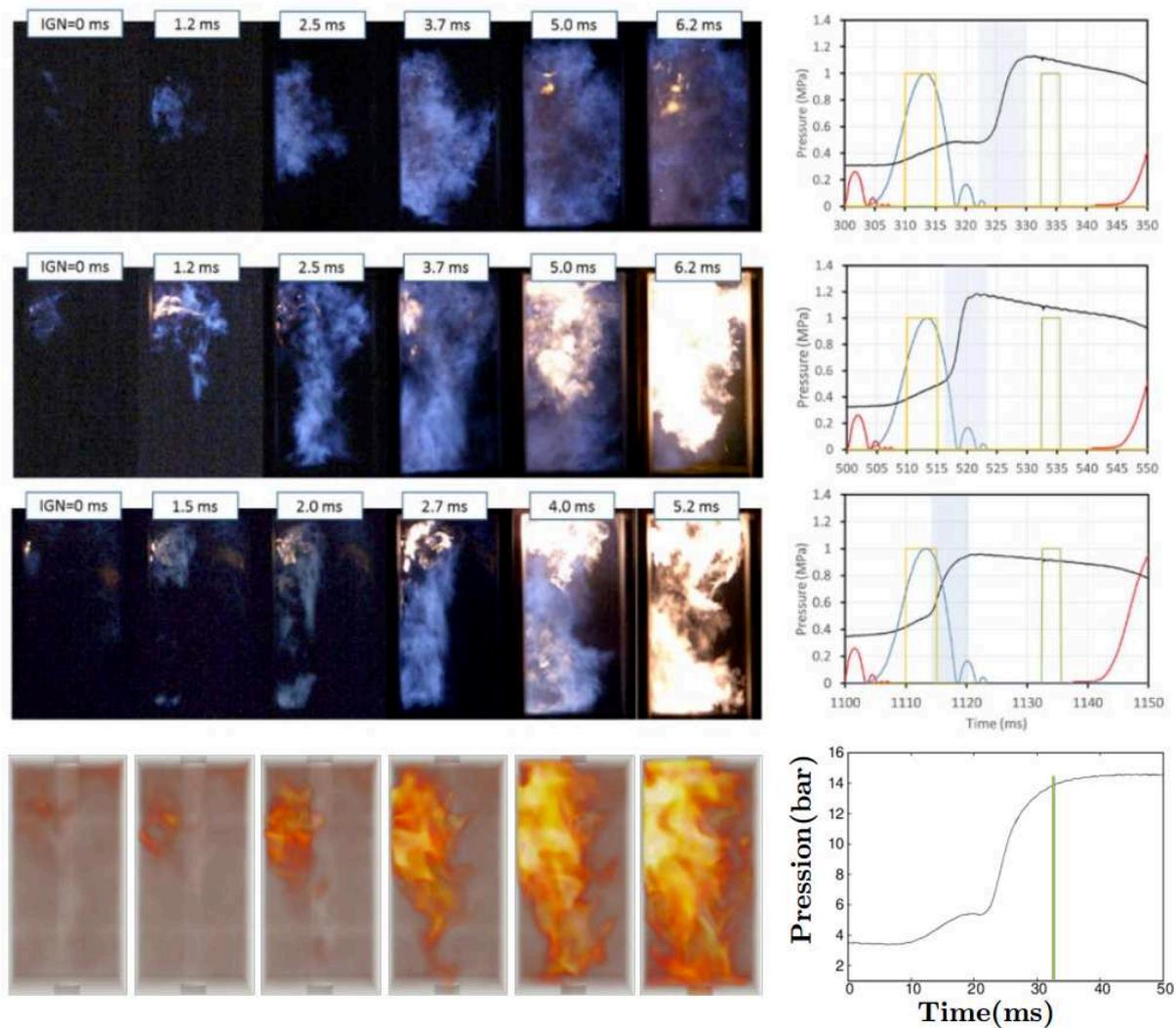


FIGURE 10.11 – Différents types de cycle de la chambre CVC avec auto-inflammation prise par chemiluminescence haute fréquence. De haut à bas : auto-inflammation tardive, auto-inflammation prématurée, auto-inflammation durant la phase d'injection et champ de température par simulation.

d'amélioration aussi bien concernant les modèles et les variables utilisées pour ce cas complexe que pour la création des tables de données chimiques pour pouvoir réellement reproduire de manière fiable ces cycles instables. Il faudra ensuite analyser en détail les résultats obtenus pour compléter les résultats expérimentaux et comprendre les mécanismes essentiels d'interactions entre l'auto-inflammation et la propagation de flammes.

Conclusions et Perspectives

Les travaux présentés dans ce manuscrit de thèse sont consacrés à la modélisation des écoulements turbulents réactifs non-prémélangés en présence d'interactions flammes/auto-inflammation. La procédure de simulation numérique proposée permet de traiter séparément les différents mécanismes physiques : mélange, propagation de flamme et auto-inflammation. Une description détaillée du transport et de la cinétique chimique est prise en compte via des données tabulées issues de calculs préliminaires de différentes configurations simplifiées : couche de mélange, flammes de diffusion, flammes de prémélange, réacteurs. La compétition entre les trois mécanismes physiques est prise en compte via l'utilisation de trois variables scalaires :

- La fraction de mélange moyenne $\tilde{\xi}$ et sa variance \tilde{V}_ξ pour décrire le mélange. Une PDF dont la forme est présumée par une fonction β permet de déterminer la distribution de fraction de mélange.
- Le taux d'avancement moyen \tilde{c} de la réaction chimique. Le terme source ($\overline{\omega}$) de l'équation correspondante est séparé en deux contributions qui tiennent compte de la propagation ($\overline{\omega}_p$) de flamme d'une part et de l'auto-inflammation ($\overline{\omega}_i$) d'autre part. Cette décomposition est réalisée grâce à une généralisation de la PDF bimodale représentative du régime des flammelettes sans introduction de coupure ad-hoc de type fonction de Heaviside.
- Le temps de résidence normalisé par le délai d'auto-allumage local $\tilde{\tau}^*$ où le délai d'autoallumage τ_i qui est issu des tables de données créées, est une fonction de la composition et de la température des gaz frais. Cette variable permet d'intégrer les effets des variations de composition et de température des gaz frais sur le mécanisme d'auto-allumage du mélange sans utiliser de lois d'Arrhénius. C'est une façon de tenir compte de l'histoire des particules, au sens de la composition et

de la température, au cours de leur trajectoire.

Les valeurs moyennes de ces variables sont les entrées des tables de données créées qui vont permettre de déterminer la composition et la température moyenne des gaz. La contribution de la propagation de flamme est déterminée par un modèle récent qui tient compte de l'épaisseur finie des flammes et de leurs propriétés propagatives mais qui introduit deux paramètres de modélisation : un représentatif des effets de Karlovitz c_{min} et l'autre représentatif des effets de Damköhler (Θ). Il n'y a pas d'équation supplémentaire pour décrire la propagation, c'est la forme du terme source (et donc des paramètres) qui impose la vitesse de propagation. La contribution de l'auto-allumage quant à elle est reliée au temps de résidence normalisé introduit par une fonction issue des tables de données chimiques.

Par rapport au temps de résidence, la variable normalisée présente aussi l'avantage d'éviter les difficultés associées à la définition des conditions aux limites et des conditions initiales. L'équation correspondante a été validée par des simulations de configurations simplifiées : un réacteur homogène soumis à une rampe de compression et une couche de diffusion. Les résultats ont montré que le délai d'auto-allumage obtenu correspondait à celui obtenu par l'utilisation de lois d'Arrhénius dans les deux cas : réaction globale ou schéma cinétique détaillé. De plus, une justification physique à l'utilisation de cette équation a été introduite en dérivant la même équation par analogie avec l'équation G : Le temps de résidence n'est rien d'autre qu'une fonction Level-set décrivant le temps restant avant l'auto-inflammation au lieu de la distance au front. Néanmoins, cette équation fait aussi apparaître des termes croisés qui ont été négligés dans cette étude uniquement pour des raisons de simplicité mais dont l'impact peut être significatif dans certains cas.

Le modèle complet a été validé par des simulations numériques RANS de la configuration de Cabra pour les cas CH_4/Air et H_2/Air . Le comportement de chaque sous modèle : mélange, propagation, auto-inflammation, a été étudié séparément pour ensuite mettre en évidence les effets associés à leur utilisation jointe. Ces résultats ont montré que la contribution d'auto-allumage permet, comme attendu, d'allumer le mélange et que, même si cette contribution est faible, elle déclenche la contribution de propagation qui détermine la position de stabilisation de la flamme. Les comparaisons quantitatives des résultats numériques et expérimentaux sont tout à fait satisfaisantes. Ces résultats sont

complétés par une analyse paramétrique détaillée qui montre l'impact des nombres de Damkhöler et de Karlovitz sur les résultats numériques.

Enfin, le modèle a été appliqué à des simulations numériques LES d'une configuration récente disponible au laboratoire. Les résultats préliminaires obtenus montrent qu'il est possible d'utiliser des données expérimentales facilement accessibles comme le signal de pression dans la chambre pour ajuster les paramètres numériques et ainsi obtenir des résultats numériques 3D tout à fait réaliste qui permettent de compléter les données expérimentales et facilitent les analyses de l'écoulement dans la chambre de combustion.

Les résultats présentés ont aussi mis en évidence la nécessité d'améliorer certains aspects du modèle :

- Les validations DNS 3D complètes du modèle d'auto-inflammation doivent être réalisées. Ces validations doivent aussi être étendu au modèle complet dans des cas où des interactions propagation/auto-inflammation sont présentes.
 - Une PDF du temps de résidence doit être introduite pour décrire plus précisément la distribution de temps de résidence de sous maille et ainsi obtenir une contribution d'auto-allumage du terme source plus réaliste.
 - L'extension du modèle à la LES doit être réalisée de manière plus rigoureuse pour permettre une analyse plus approfondie de l'écoulement dans la chambre de combustion. En particulier, des tables de données des propriétés chimiques dépendant de plusieurs variables doivent être créés.
-

Bibliographie

- [1] AN, Y., M. JAASIM, V. RAMAN, F.E.HERNANDEZ PEREZ, J. SIM, J. CHANG, H.G. IM, B. JOHANSSON (2018), “Homogeneous charge compression ignition (HCCI) and partially premixed combustion (PPC) in compression ignition engine with low octane gasoline”, *Energy*, 158 :181-191
- [2] BALO, J.N., P.L. CLOIREC (2000), “Validating a prediction method of mean residence time spatial distributions”, *AIChE Journal*, 46 :675-683
- [3] BARRÈRE, M. (1974), “Modèles de combustion”, *Revue générale de thermique*, 148 :295-308
- [4] BENDU, H., S. MURUGAN (2014), “Homogeneous charge compression ignition (HCCI) combustion : Mixture preparation and control strategies in diesel engines”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 38 :732-746
- [5] BERGLUND, M., E. FEDINA, C. FUREBY, J. TEGNER, V. SABELNIKOV (2010), “Finite rate chemistry Large-Eddy Simulation of self-ignition in supersonic combustion ramjet”, *AIAA Journal*, 48(3) :540-550
- [6] BERNARD, G., R. LEBAS, F.X. DEMOULIN (2011), “A 0D phenomenological model using detailed tabulated chemistry methods to predict diesel combustion heat release and pollutant emissions”, *SAE Technical Paper*, 2011-01-0847
- [7] BHAGATWALA, A., J.H. CHEN, T. LU (2014), “Direct numerical simulations of HCCI/SACI with ethanol”, *Combustion and Flame*, 1826-1841
- [8] BILGER, R.W. (1976), “Turbulent jet diffusion flames”, *Progress in Energy and Combustion Science*, 1 :87-109
- [9] BORGHI, R., D. DUTOYA (1978), “On the scale of the fluctuations in turbulent combustion”, 17th *Symposium (International) on Combustion*, 235-244

-
- [10] BORGHI, R., D. Escudié (1984), “Assessment of a theoretical model of turbulent combustion by comparison with a simple experiment”, *Combustion and Flame*, 56(2) :149-164
- [11] BORGHI, R. (1985), “On the structure and morphology of turbulent premixed flames”, *Recent Advances in Aerospace Sci.*, C. Casci, Ed., Plenum Publishing Corporation
- [12] BORGHI, R., M. GONZALEZ (1986), “Applications of lagrangian models to turbulent combustion”, *Combustion and Flame*, 63 :239-250
- [13] BORGHI, R. (1988), “Turbulent combustion modelling”, *Progress in Energy and Combustion Sciences*, 14 :245-292
- [14] BORGHI, R., M. DESTRIAU (1998), “Combustion and flames, chemical and physical principles”, *Editions TECHNIP*
- [15] BORGHI, R., M. CHAMPION (2000), “Modélisation et théorie des flammes”, *Editions TECHNIP*
- [16] BOUALI, Z., C. PERA, J. REVEILLON (2012), “Numerical analysis of the influence of two-phase flow mass and heat transfer on n-heptane autoignition”, *Combustion and Flame*, 159 :2056-2068
- [17] BOUHERAOUA, L., P. DOMINGO, G. RIBERT (2017), “Large-Eddy Simulation of a supersonic lifted jet flame : Analysis of the turbulent flame base”, *Combustion and Flame*, 179 :199-218
- [18] BOURGEOIS, N., S.S. GOLDSBOROUGH, G. VANHOVE, M. DUPONCHEEL, H. JEANMART, F. CONTINO (2018), “CFD simulations of Rapid Compression Machines using detailed chemistry : Impact of multi-dimensional effects on the auto-ignition of the iso-octane”, *Combustion and Flame*, 36(1) :383-391
- [19] BOURGEOIS, N., S.S. GOLDSBOROUGH, H. JEANMART, F. CONTINO (2018), “CFD simulations of Rapid Compression Machines using detailed chemistry : Evaluation of the ‘crevice containment’ concept”, *Combustion and Flame*, 189 :225-239
- [20] BOUSSINESQ, J. (1877), “Essai sur la théorie des eaux courantes”, *Mémoire, Académie des Sciences, Paris*, 23(1) :252-260
-

-
- [21] BRADLEY, D. (1992), "How fast can we burn?", *Proceedings of the Combustion Institute*, 24 :247-62
- [22] BRADLEY, D., M. LAWES, M.J. SCOTTE, C.G.W. SHEPPARD, D A. GREENHALGH, F.M., PORTER (1992), "Measurement of temperature PDFS in turbulent flames by the CARS technique", *24th Symposium (International) on Combustion*, 24 :527-535, The Combustion Institute, Pittsburgh
- [23] BRAY, K.N.C., J.B. MOSS (1977), "A unified statistical model of the premixed turbulent flames", *Acta Astronautica*, 4 :291-319
- [24] BRAY, K.N.C (1995), "Turbulent Reactive Flows", 2^e éd. (P.A. Libby et F.A. Williams, Eds) Academic Press
- [25] BRAY, K., P. DOMINGO, L. VERVISCH (2005), "Role of the progress variable in models for partially premixed turbulent combustion", *Combustion and Flame*, 141(4) :431-437
- [26] BRAY, K.N.C., M. CHAMPION, P.A. LIBBY, N. SWAMINATHAN (2006), "Finite rate chemistry and presumed PDF models for premixed turbulent combustion", *Combustion and Flame*, 146 :665-673
- [27] BRUCE NAUMAN, E. (2008), "Residence time theory", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 47(10) :3752-3766
- [28] BURKE, S.P., T.E. SCHUMANN (1928), "Diffusion flames", *Industrial And Engineering Chemistry*, 20 :998-1004
- [29] BYKOV, V., U. MASS (2007), "The extension of ILDM concept to reaction-diffusion manifolds", *Combustion Theory and Modelling*, 11(6) :839-862
- [30] CABRA, R., T. MYHRVOLD, J.Y. CHEN, R.W. DIBBLE (2002), "Simultaneous laser Raman-Rayleigh-LIF measurements and numerical modeling results of a lifted turbulent H₂/N₂ jet flame in a vitiated coflow", *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :1881-1888
- [31] CABRA, R., J.Y. CHEN, R.W. DIBBLE, A.N. KARPETIS, R.S. BARLOW (2005), "Lifted methane air jet flames in a vitiated coflow", *Combustion and Flame*, 143 :491-506
-

-
- [32] CANDEL, S., T. POINSOT (1990), "Flame stretch and the balance equation for the flame area", *Combustion, Science and Technology*, 70 :1-15
- [33] CANT, R., S. POPE, K. BRAY (1990), "Modelling of flamelet surface to volume ratio in turbulent premixed combustion", *23th Symposium (International) on Combustion*, 809-815, The Combustion Institute, Orleans
- [34] CARRIER, G.F., F.E. FENDELL, F.E. Marble (1975), "The effect of strain rate on diffusion flames", *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 28 :463-500
- [35] CHEN, J.Y. (1997), "Stochastic modeling of partially stirred reactors", *Combustion Science and Technology*, 122 :63-94
- [36] CHENG, W., J. DIRINGER (1991), "Numerical modelling of si engine combustion with a flame sheet model", *910268, S.(Ed.) International Congress and Exposition*, Detroit
- [37] CHOI, C.R., K. HUH (1998), "Development of a coherent flamelet model for spark ignited turbulent premixed flame in a close vessel", *Combustion and Flame*, 114 :336-348
- [38] CHOMIAK, J. (1970), "A possible propagation mechanism of turbulent flames at high Reynolds numbers", *Combustion and Flame*, 15 :319-321
- [39] *Code_Saturne User Guides* (2016), "<http://code-saturne.org/cms/documentation/guides>", *Version 3.2.1*
- [40] COLIN, O., F. DUCROS, D. VEYNANTE, T. POINSOT (2000), "A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion", *Physics of Fluids*, 12(7) :1843-1863
- [41] COLIN, O., A. PIRES DA CRUZ, S. JAY (2005), "Detailed chemistry-based auto-ignition model including low temperature phenomena applied to 3-D engine calculations", *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :2649-2656
- [42] CORREA, S.M. (1993), "Turbulence-chemistry interactions in the intermediate regime of premixed combustion", *Combustion and Flame*, 93 :41-60
- [43] CORREA, S.M., M.E. BRAATEN (1993), "Parallel simulations of partially stirred methane combustion", *Combustion and Flame*, 93 :469-486
-

-
- [44] CONTINO, F., H. JEANMART, T. LUCCHINI, G. D'ERRICO (2011), "Coupling of in situ adaptive tabulation and dynamic adaptive chemistry : An effective method for solving combustion in engine simulations", *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2) :3057-3064
- [45] CONTINO, F., T. LUCCHINI, G. D'ERRICO, C. DUYNLAEGHER, V. DIAS, H. JEANMART (2012), "Simulations of advanced combustion modes using detailed chemistry combined with tabulation and mechanism reduction techniques", *SAE International Journal of Engines*, 5(2) :185-196
- [46] DALLY, B.B., A.N. KARPETIS, R.S. BARLOW (2002), "Structure of turbulent non-premixed flames in a diluted hot coflow", *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :1147-1154
- [47] DAMKÖHLER, G. (1940), "Influence of turbulence on flame velocity in gaseous mixtures", *ZH Elektrochemie*, 46 :601
- [48] DIXON-LEWIS, G., T. DAVID, P. GASKELL, S. FUKUTANI, H. JINNO, J. MILLER, R. KEE, M. SMOOKE, N. PETERS, E. EFFELSBERG (1985), "Calculation of the structure and extinction limit of a methane-air counterflow diffusion flame in the forward stagnation region of a porous cylinder", *Symposium (International) on Combustion*, 20 :1893-1904
- [49] DOLD, J.W. (1989), "Analysis of a slowly varying triple flame", *Combustion and Flame*, 76 :71-88
- [50] DOMINGO, P., L. VERVISCH (1996), "Triple flames and partially premixed combustion in autoignition of nonpremixed mixture", *Proceedings of the Combustion Institute*, 26 :233-240
- [51] DOMINGO, P., K.N.C. BRAY (2000), "Laminar flamelet expressions for pressure fluctuation terms in second moment models of premixed turbulent combustion", *Combustion and Flame*, 121 :555-574
- [52] DOMINGO, P., L. VERVISCH, K.N.C. BRAY (2002), "Partially premixed flamelets in LES of nonpremixed turbulent combustion", *Combustion Theory and Modelling*, 6(4) :529-551
-

-
- [53] DOMINGO, P., L. VERVISCH, D. VEYNANTE (2008), “Large-Eddy Simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow”, *Combustion and Flame*, 152(3) :415-432
- [54] DOPAZO, C., E.E. O'BRIEN (1974), “An approach to the autoignition of a turbulent mixture”, *Acta Astronautica*, 1(9) :1239-1266
- [55] ENJALBERT, N., P. DOMINGO, L. VERVISCH (2012), “Mixing time-history effects in Large Eddy Simulation of non-premixed turbulent flames : Flow-Controlled Chemistry Tabulation”, *Combustion and Flame*, 159 :336-352
- [56] ERTESVAG, I., B. MAGNUSSEN (2000), “The eddy dissipation turbulence energy cascade model”, *Combustion Science and Technology*, 159 :213-235
- [57] ETTNER, F., K.G. VOLLMER, T. SATTELMAYER (2014), “Numerical simulation of the Deflagration-to-Detonation Transition in inhomogeneous mixtures”, *Journal of Combustion*, 2014(1-6) :1-15
- [58] FAVRE, A., L.S.G. KOVASZNAY, R. DUMAS, M. COANTIC (1976), “La turbulence en mécanique des fluides”, *Gauthier-Villars*
- [59] FICHET, V. (2008), “Modélisation de la combustion du gaz naturel par réseaux de réacteurs avec cinétique chimique détaillée”, *Thèse de Doctorat*, Ecole Centrale Paris
- [60] FICHET, V., M. KANNICHE, P. PLION, O. GICQUEL (2010), “A reactor network model for predicting NOx emissions in gas turbines”, *Fuel*, 89 :2202-2210
- [61] FIORINA, B., R. BARON, O. GICQUEL, D. THEVENIN, S. CARPENTIER, N. DARABIHA (2003), “Modelling non-adiabatic partially premixed flames using flame-prolongation of ILDM”, *Combustion Theory and Modelling*, 7 :449-470
- [62] FIORINA, B., O. GICQUEL, L. VERVISCH, S. CARPENTIER, N. DARABIHA (2005), “Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using FPI flamelet tabulation”, *Combustion and Flame*, 140 :147-160
- [63] FIORINA, B., O. GICQUEL, L. VERVISCH, S. CARPENTIER, N. DARABIHA (2005), “Premixed turbulent combustion modeling using tabulated detailed chemistry and PDF”, *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :867-874
-

- [64] GERMANO, M., U. PIOMELLI, P. MOIN, W.H. CABOT (1991), “A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model”, *Physics of Fluids*, 3(7) :1760-1765
- [65] GHIRELLI, F., B. LECKNER (2004), “Transport equation for the local residence time of a fluid”, *Chemical Engineering Science*, 59 :513-523
- [66] GICQUEL, O., N. DARABIHA, D. THEVENIN (1999), “Développement d’une nouvelle méthode de réduction des schémas cinétiques : Application au méthane”, *Thèse de Doctorat*, Ecole Centrale Paris
- [67] GICQUEL, O., N. DARABIHA, D. THEVENIN (2000), “Laminar premixed hydrogen / air counterflow flame simulation using flame prolongation of ILDM with differential diffusion”, *Proceedings of Combustion Institute*, 28 :1901-1908
- [68] GHOSAL, S., L. VERVISCH (2000), “Theoretical and numerical investigation of a symmetrical triple flame using a parabolic flame tip approximation”, *Journal of Fluid Mechanics*, 415 :227-260
- [69] GOMET, L., V. ROBIN, M. MURA (2012), “Influence of residence and scalar mixing time scales in non-premixed combustion in supersonic turbulent flows”, *Combustion, Science and Technology*, 184 :1471-1501
- [70] GOODWIN, D.G., H.K. MOFFAT, R.L. SPETH (2017), “Cantera : An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes”, <http://www.cantera.org>, Version 2.3.0
- [71] CLIFFORD, L.J., A.M. MILNE, B.A. MURRAY (1996), “Numerical modeling of chemistry and gas dynamics during shock-induced ethylene combustion”, *Combustion and Flame*, 104 :311-327
- [72] CLIFFORD, L.J., A.M. MILNE, T. TURÁNYI, D. BOULTON (1998), “An Introduction Parameter Model for shock-induced hydrogen combustion simulations”, *Combustion and Flame*, 113 :106-118
- [73] GOULDIN, F.C., K.N.C. BRAY, J.Y. CHEN (1989), “Chemical closure model for fractal flamelets”, *Combustion and Flame*, 77 :241-259
- [74] HALLBACK, M., A.V. JOHANSSON, A.D. BURDEN (1996), “The basic of turbulence modelling”, *Turbulence and Transition Modelling*, Kluwer Academic Publishers 81-154
-

-
- [75] HASSLBERGER, J., L.R. BOECK, T. SATTELMAYER (2015), “Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition in large confined volumes”, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 36 :371-379
- [76] HOTTEL, H.C., W.R. Hawthorne (1949), “Diffusion in laminar flame jets”, *Symposium (International) on Combustion*, 254-266
- [77] JANICKA, J., W. KOLBE, W. KOLLMANN (1979), “Closure of the transport equation for the probability density function of turbulent scalar fields”, *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 4 :47-66
- [78] JIANG, T.L., W.S. CHEN, M.J. Tsai, H.H. Chiu (1995), “A numerical investigation of multiple flame configurations in convective droplet gasification”, *Combustion and Flame*, 103(3) :221-238
- [79] KANNICHE, M. (1990), “Modèles de turbulence au second ordre : écoulements complexes ou stratifiés”, *Thèse de Doctorat*, Laboratoire National d’Hydraulique EDF R&D
- [80] KARANAM, A., P.K. SHARMA, S. GANJU (2018), “Numerical simulation and validation of flame acceleration and DDT in hydrogen air mixtures”, *International Journal of Hydrogen Energy*, 43 :17492-17504
- [81] KHA, K.Q.N., C. LOSIER, V. ROBIN, A. MURA, M. CHAMPION (2016), “Relevance of two basic turbulent premixed combustion models for the numerical simulations of V-shaped flames”, *Combustion, Science and Technology*, 188 :1878-1903
- [82] KHA, K.Q.N., V. ROBIN, A. MURA, M. CHAMPION (2016), “Implications of laminar flame finite thickness on the structure of turbulent premixed flames”, *Journal of Fluid Mechanics*, 787 : 116-147
- [83] KHA, K.Q.N. (2018), “Rapport post-doc CAPA”, *Technical report CAPA*
- [84] KIONI, P.N., B. ROGG, K.N.C. BRAY, A. LINAN (1993), “Flame spread in laminar mixing layers : the triple flame”, *Combustion and Flame*, 95(3) :277-290
- [85] KIONI, P.N., K.N.C. BRAY, D.A. GREENHALGH, B. ROGG (1998), “Experimental and numerical studies of a triple flame”, *Combustion and Flame*, 116 :192-206
- [86] KNOPF, F.C. (2011), “Modeling, Analysis and Optimization of Process and Energy Systems”, *WILEY*
-

-
- [87] KOLMOGOROV, A.N. (1941), "Dissipation of energy in a locally isotropic turbulence", *Doklady Akad. Nauk SSSR*, 32, 141 (Traduction anglaise dans : *Am. Math. Soc. Translations* 1958, Series 2, Vol 8, p. 87, Providence R.I)
- [88] KUHL, A.L., J.B. BELL, V.E. BECKNER (2010), "Heterogeneous continuum model of aluminum particle combustion in explosions", *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 46(4) :433-448
- [89] KUO, K. (1986), "Principles of combustion", *John Wiley*
- [90] KUZNETSOV, V.R. (1977), "Mixing up to a molecular level and the development of a chemical reaction in a turbulent flow", *Fluid Dynamics*, 12(3) :369-377
- [91] LAUNDER, B.E., D.B. SPALDING (1974), "The numerical computation of turbulent flows", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3 :269-289
- [92] LAUNDER, B.E. (1996), "Advanced turbulence models for industrial applications", *Turbulence and Transition Modelling*, Kluwer Academic Publishers 193-231
- [93] LELE S.K. (1992), "Compact finite difference schemes with spectral-like resolution", *Journal of computational physics*, 103 :16-42
- [94] LEVENSPIEL, O. (1993), "Chemical Reactor Omnibook", *Oregon St Univ Bookstores*
- [95] LIEW, S.K., K.N.C. BRAY, J.B. MOSS (1981), "A flamelet model of turbulent non-premixed combustion", *Combustion, Science and Technology*, 27 :69-73
- [96] LIEW, S.K., K.N.C. BRAY, J.B. MOSS (1984), "A stretched laminar flamelet model of turbulent non-premixed combustion", *Combustion and Flame*, 56 :199-213
- [97] LOCKWOOD, F.C., A.S. NAGUIB (1975), "The prediction of the fluctuations in the properties of free, round-jet, turbulent, diffusion flames", *Combustion and Flame*, 24 :109-124
- [98] LODATO, G., P. DOMINGO, L. VERVISCH (2008), "Three-dimensional boundary conditions for direct and large-eddy simulation of compressible viscous flows", *Journal of Computational Physics*, 227(10) :5105-5143
- [99] MAAS, U., S. POPE (1992), "Implementation of simplified chemical kinetics based on low-dimensional manifolds", *Proceedings of the Combustion Institute*, 24 :719-729
-

-
- [100] MAAS, U., S. POPE (1992), "Simplifying chemical kinetics : Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space", *Combustion and Flame*, 88 :239-264
- [101] MAGNUSSEN, B., B. HJERTAGER (1976), "On the mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion", *16th Symposium (International) on Combustion*, 719-729, The Combustion Institute, Pittsburgh
- [102] MAGNUSSEN, B. (1981), "On the structure of turbulence and a generalised eddy dissipation concept for chemical reactions in turbulent flow", *19th AIAA Aerospace Sciences Meeting*
- [103] MAGNUSSEN, B. (2005), "The eddy dissipation concept", *ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion*
- [104] MÁNDITY, I.M., S.B. ÖtvösÖtvös, F. Fülöp (2015), "Strategic application of residence-time control in continuous-flow reactors", *ChemistryOpen*, 4(3) :2191-1363
- [105] MANTEL, T., R. BORGHI (1994), "A new model of premixed wrinkled flame based on a scalar dissipation equation", *Combustion and Flame*, 96 :443-457
- [106] MARKIDES, C.N., E. MASTORAKOS (2005), "An experimental study of hydrogen autoignition in a turbulent co-flow of heated air", *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :883-891
- [107] MASTORAKOS, E. (1997), "Numerical simulations of autoignition in turbulent mixing flows", *Combustion and Flame*, 109 :198-223
- [108] MASTORAKOS, E. (2009), "Ignition of turbulent non-premixed flames", *Progress in Energy and Combustion Science*, 35 :57-97
- [109] MAUVIOT, G. (2007), "Développement d'une modélisation phénoménologique des chambres de combustion à moteur piston, réduction de modèle physique 3d dans la perspective d'une intégration dans un outil de simulation système", *PhD thesis*, Ecole Centrale Paris/Institut Français du Pétrole, IFP Rueil Malmaison (92)
- [110] MENEVEAU, C., T. POINSOT (1991), "Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion", *Combustion and Flame*, 86 :311-332
- [111] MENON, S., C. FUREBY (2010), "Computational combustion", *Encyclopedia of Aerospace Engineering*
-

-
- [112] MERCIER, R. and T. SCHMITT, D. VEYNANTE, B. FIORINA (2015), “The influence of combustion SGS sub-models on the resolved flame propagation. Application to the LES of the Cambridge stratified flames”, *Proceedings of the Combustion Institute*, 35 :1259-1267
- [113] MICHALSKI, Q., K.Q.N. Kha, B. BOUST, V. ROBIN, M. BELLENOUE, A. MURA (2018), “Joint numerical and experimental characterization of the turbulent reactive flow within a constant volume vessel”, *54th AIAA/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*, Cincinnati (OHIO USA)
- [114] MICHALSKI, Q., B. BOUST, M. BELLENOUE (2018), “Toward a cyclic self-ignited Constant-Volume Combustion for airbreathing propulsion applications”, *54th AIAA/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*, Cincinnati (OHIO USA)
- [115] MICHALSKI, Q., B. BOUST, M. BELLENOUE (2019), “Experimental investigation of ignition stability in a cyclic constant-volume combustion chamber featuring relevant conditions for air-breathing propulsion”, *Flow, Turbulent and Combustion*, 102 :279-298
- [116] MICHALSKI, Q. (2019), “Étude expérimentale de la combustion à volume constant pour la propulsion aérobie : influence de l’aérodynamique et de la dilution sur l’allumage et de combustion”, *Thèse de Doctorat*, Laboratoire PPRIME, ENSMA
- [117] MICHEL, J.B., O. COLIN, C. ANGELBERGER (2010), “On the formulation of species reaction rates in the context of multi-species CFD codes using complex chemistry tabulation techniques”, *Combustion and Flame*, 157 :701-714
- [118] MIZOBUCHI, Y., S. TACHIBANA, J. SHINIO, S. OGAWA, T. TAKENO (2002), “A numerical analysis of the structure of a turbulent hydrogen jet lifted flame”, *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :2009-2015
- [119] MOIN, P., K. SQUIRES, W. CABOT, S. LEE (1991), “A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport”, *Physics of Fluids*, 3(11) :2746-2757
- [120] MOUANGUE, R., M. OBOUNOU, L. GOMET, A. MURA (2014), “Lagrangian intermittent modelling of a turbulent lifted methane-air jet flame stabilized in a vitiated air co-flow”, *Flow, Turbulence and Combustion*, 92 :731-765
-

-
- [121] MOULE, Y., V. SABELNIKOV, A. MURA (2014), “Highly resolved numerical simulation of combustion in supersonic hydrogen–air coflowing jets”, *Combustion and Flame*, 161 :2647-2668
- [122] MUNIZ, L., M.G. MUNGAL (1997), “Instantaneous flame-stabilization velocities in lifted-jet diffusion flames”, *Combustion and Flame*, 111 :16-31
- [123] MURA, A., R. BORGHI (2003), “Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion”, *Combustion and Flame*, 133 :193-196
- [124] MURA, A., R. BORGHI (2004), “Introducing a new partial pdf approach for turbulent combustion modeling”, *Combustion and Flame*, 136(3) :377-382
- [125] MURA, A., V. ROBIN, M. CHAMPION (2007), “Modeling of scalar dissipation in partially premixed turbulent flames”, *Combustion and Flame*, 149(1) :217-224
- [126] MURA, A., F.X. DEMOULIN (2007), “Lagrangian intermittent modelling of turbulent lifted flames”, *Combustion Theory and Modelling*, 11(2) :227-257
- [127] MURA, A., K. TSUBOI, T. HASEGAWA (2008), “Modelling of the correlation between velocity and reactive scalar gradients in turbulent premixed flames based on DNS data”, *Combustion Theory and Modelling*, 12 :4, 671-698
- [128] MURA, A., V. ROBIN, K.Q.N. KHA, M. CHAMPION (2016), “A layered description of a premixed flame stabilized in stagnating turbulence”, *Combustion Science and Technology*, 188(9) :1592-1618
- [129] NICOUD, F., F. DUCROS (2010), “Subgrid-scale modelling based on the square of the velocity gradient tensor”, *Combustion and Flame*, 157 :465-475
- [130] NICOUD, F., H.B. TODA, O. CABRIT, S. BOSE, J. LEE (2011), “Using singular values to build a subgrid-scale model for large eddy simulations”, *Physics of Fluids*, 23(8) :85-106
- [131] OBOUNOU, M., M. GONZALEZ, R. BORGHI (1994), “A Lagrangian model for predicting turbulent diffusion flames with chemical kinetic effects”, *25th Symposium (International) on Combustion*, 1107-1113, The Combustion Institute, Pittsburgh
- [132] OIJEN, J., F. LAMMERS, L. DE GOEY (2000), “Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds”, *Combustion and Flame*, 127(3) :2124-2134
-

-
- [133] Ó CONAIRE, M., H.J. CURRAN, J.M. SIMMIE, W.J. PITZ, C.K. WESTBROOK (2004), "A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation", *International Journal of Chemical Kinetics*, 36(11) :603-622
- [134] ORAN, E.S., J.P. BORIS, T.R. YOUNG, JR., M. FLANIGAN, T. BURKS, M. PICONE (1980), "Simulations of gas phase detonations : introduction of an induction parameter model", *NRL Memorandum Report*, 4255
- [135] PETERS, N. (1984), "Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion", *Progress in Energy and Combustion Science*, 10 :319-339
- [136] PETERS, N. (1986), "Laminar flamelet concepts in turbulent combustion", 21st *Symposium (International) on Combustion*, 1231-1250, The Combustion Institute, Pittsburgh
- [137] PETERS, N., R. KEE (1987), "The computation of stretched laminar methane-air diffusion flames using a reduced four-step mechanism", *Combustion and Flame*, 68(1) :17-29
- [138] PETERS, N. (1999), "The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence", *Journal of Fluid Mechanics*, 384 :107-132
- [139] PETERS, N. (2000), "Turbulent combustion", *Cambridge University Press*
- [140] PIRES DA CRUZ, A. (2004), "Three-dimensional modeling of self-ignition in HCCI and conventional diesel engines", *Combustion Science and Technology*, 176 :867-887
- [141] PETERS, N. (2005), "A consistent level set formulation for large-eddy simulation of premixed turbulent combustion", *Combustion and Flame*, 143(4) :587-598
- [142] POINSOT, T., T. ECHEKKI, M.G. MUNGAL (1992), "A study of the laminar flame tip and implications for premixed turbulent combustion", *Combustion, Science and Technology*, 81(1-3) :45-73
- [143] POMRANING, E. (2000), "Development of Large Eddy Simulation turbulence models", *Thesis*, University of Wisconsin
- [144] POMRANING, E., C.J. RUTLAND (2002), "Dynamic one-equation non viscosity large-eddy simulation model", *AIAA Journal*, 40(4) :689-701
- [145] POPE, S. (1988), "The evolution of surface in turbulence", *International Journal of Engineering Sciences*, 26(5) :445-469
-

-
- [146] PRANDTL, L. (1925), “Investigations on turbulent flow”, *Zeitschrift fur angewandte Mathematik und Mechanik*, 5 :136
- [147] REN, Z., S.B. POPE (2004), “An investigation of the performance of turbulent mixing models”, *Combustion and Flame*, 136 :208-216
- [148] REN, Z., S.B. POPE (2006), “The use of slow manifolds in reactive flows”, *Combustion and Flame*, 147 :243-261
- [149] RIBERT, G., K. WANG, L. VERVISCH (2012), “A multi-zone self similar chemistry tabulation with application to auto-ignition including cool-flames effects”, *Fuel*, 91 :87-92
- [150] RIVIERE, J.P., M. MECHKOR (2005), “Modélisation des échanges thermiques sur la paroi de la chambre de combustion”, *Technical report RENAULT*
- [151] ROBIN, V. (2007), “Contribution à la modélisation des écoulements turbulents réactifs partiellement prémélangés”, *Thèse de Doctorat*, Université de Poitiers, ENSMA
- [152] ROBIN, V., A. MURA, M. CHAMPION (2011), “Direct and indirect thermal expansion effects in turbulent premixed flames”, *Journal of Fluid Mechanics*, 689 :149-182
- [153] ROBIN, V., A. MURA, M. CHAMPION (2012), “Algebraic models for turbulent transports in premixed flames”, *Combustion Science and Technology*, 184 :1718-1742
- [154] RUTLAND, C.J. (2011), “Large-eddy simulations for internal combustion engines – a review”, *International Journal of Engine Research*, 12(5) :421-451
- [155] SABELNIKOV, V.A., C. CORVELLEC, P. BRUEL (1998), “Analysis of the influence of cold front quenching on the turbulent burning velocity associated with an Eddy-Break-Up model”, *Combustion and Flame*, 113 :492-497
- [156] SABELNIKOV, V.A., C. FUREBY (2013), “LES combustion modeling for high Re flames using a multi-phase analogy”, *Combustion and Flame*, 160(1) :83-96
- [157] SANDBERG, M. (1981), “What is ventilation efficiency?”, *Building and Environment*, 16 :123-135
- [158] SANDBERG, M., M. SJOBERG (1983), “The use of moments for assessing air quality in ventilated rooms”, *Building and Environment*, 18 :181-197
-

-
- [159] SAGAUT, P. (2000), “Large Eddy Simulation for incompressible flows : an introduction”, *Springer*
- [160] SCHULZ, O., T. JARAVEL, T. POINSOT, B. CUENOT, N. NOIRAY (2017), “A criterion to distinguish autoignition and propagation applied to a lifted methane-air jet flame”, *Proceedings of the Combustion Institute*, 36 :1637-1644
- [161] SCHWER, D.A. (2019), “Multi-dimensional simulations of liquid-fueled JP-10/oxygen detonations”, *AIAA Propulsion and Energy Forum*, Indianapolis, IN
- [162] SERRA, S., V. ROBIN, M. MURA, M. CHAMPION (2014), “Density variations effects in turbulent diffusion flames : modeling of unresolved fluxes”, *Combustion, Science and Technology*, 186 :1370-1391
- [163] SHIN, D., R.D. SANDBERG, E.S. RICHARDSON (2017), “Self-similarity of fluid residence time statistics in a turbulent round jet”, *Proceedings of the Combustion Institute*, 37 :2215-2222
- [164] SMAGORINSKY, J. (1963), “General circulation experiments with the primitive equations”, *Monthly Weather Review*, 91(3) :99-164
- [165] SMITH, G.P., D.M. GOLDEN, M. FRENKLACH, N.W. MORIARTY, B. EITENEER, M. GOLDENBERG, C.T. BOWMAN, R.K. HANSON, S. SONG, W.C. GARDINER, V.V. LISSIANSKI, Z. QIN, “<http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/>”
- [166] SOM, S., P.K. SENEAL, E. POMRANING (2002), “Comparison of RANS and LES turbulence models against constant volume diesel Experiments”, *AIAA Journal*, 40(4) :689-701
- [167] SPALDING, D.B. (1971), “Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames”, 13th *Symposium (International) on Combustion*, 649-657, The Combustion Institute, Pittsburgh
- [168] STANKOVIC, I., B. MERCI (2011), “Analysis of auto-ignition of heated hydrogen-air mixtures with different detailed reaction mechanisms”, *Combustion Theory and Modelling*, 15(3) :409-436
- [169] STROZZI, C., J. SOTTON, A. MURA, M. BELLENOUE (2008), “Experimental and numerical study of the influence of temperature heterogeneities on self-ignition
-

- process of methane-air mixtures in a rapid compression machine”, *Combustion, Science and Technology*, 180 :1829-1857
- [170] STROZZI, C., A. MURA, J. SOTTON, M. BELLENOUE (2012), “Experimental analysis of propagation regimes during the autoignition of a fully premixed methane-air mixture in the presence of temperature inhomogeneities”, *Combustion and Flame*, 159 :3323-3341
- [171] THRING, R.H. (1989), “Homogeneous-Charge Compression-Ignition (HCCI) engines”, *SAE Technical Paper*
- [172] VAN OIJEN, J.A., L. DE GEOY (2000), “Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds”, *Combustion Science and Technology*, 161 :113-137
- [173] VERVISCH, L. (1991), “Modélisation de flammes de diffusion turbulente avec prise en compte de l’interaction entre les effets thermo-chimiques et turbulentes”, *PhD thesis*, Ecole Centrale Paris, Laboratoire National d’Hydraulique EDF R&D
- [174] VERVISCH, L., E. BIDAUX, K. BRAY, W. KOLLMANN (1995), “Surface density function in premixed turbulent combustion modeling, similarities between probability density function and flame surface approaches”, *Physics of Fluids*, 7(10) :2496-2503
- [175] VEYNANTE, D., T. POINSOT (1997), “Effects of pressure gradients on turbulent premixed flame”, *Journal of Fluid Mechanics*, 353 :83-114
- [176] VEYNANTE, D., A. TROUVÉ, K.N.C. BRAY, T. MANTEL (1997), “Gradient and counter-gradient scalar transport in turbulent premixed flames”, *Journal of Fluid Mechanics*, 332 :263-293
- [177] VEYNANTE, D., L. VERVISCH (2002), “Turbulent combustion modeling”, *Progress in Energy and Combustion Science*, 28 :193-266
- [178] VICQUELIN, R. (2010), “Tabulation de la cinétique chimique pour la modélisation et la simulation de la combustion turbulente”, *Thèse de Doctorat*, Ecole Centrale Paris
- [179] VILLERMAUX, J., J. DEVILLON (1972), “Représentation de la coalescence et de la redispersion des domaines de ségrégation dans un fluide par un modèle
-

- d'interaction phénoménologique”, *Proceedings of the 2nd International Symposium on Chemical Reaction Engineering*, 1-13
- [180] VULIS, L. (1961), “Thermal Regimes of Combustion”, *McGraw-Hill*
- [181] WANG, X., C. LOSIER, V. ROBIN, A. MURA (2017), “Interactions between mixing, flame propagation, and ignition in non-premixed turbulent flames”, *Proceedings of the 26th International Colloquium on Detonations, Explosions and Reactive Systems*, p.6
- [182] WANG, X., V. ROBIN, A. MURA (2017), “Interactions between mixing, flame propagation, and ignition in non-premixed turbulent flames”, *Proceedings of the 10th Mediterranean Combustion Symposium*
- [183] WANG, X., V. ROBIN, A. MURA (2019), “A normalised residence time transport equation for the numerical simulation of combustion with high-temperature air”, *Combustion Theory and Modelling*, 23(5) :821-853
- [184] WILLIAMS, F.A. (1975), “Recent advances in theoretical descriptions of turbulent diffusion flames”, *Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows*, ed. S.N.B. Murthy, 189-208, New York : Plenum
- [185] WILLIAMS, F.A. (1985), “Combustion Theory (2nd ed.)”, *Benjamin Cummings*
- [186] XIAO, J., W. BREITUNG, M. KUZNETSOV, H. ZHANG, J.R. TRAVIS, R. REDLINGER, T. JORDAN (2017), “GASFLOW-MPI : A new 3-D parallel all-speed CFD code for turbulent dispersion and combustion simulations Part I : Models, verification and validation”, *International Journal of Hydrogen Energy*, 42 :8346-8368
- [187] YAMASHITA, H., M. SHIMADA, T. TAKENO (1996), “A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames”, *26th Symposium (International) on Combustion*, 27-34
- [188] YOSHIKAWA, A. (1986), “Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling”, *Physics of Fluids*, 29(2152)
- [189] ZELDOVICH, Y. (1980), “Regime classification of an exothermic reaction with nonuniform initial conditions”, *Combustion and Flame*, 39 :211-214
-

- [190] ZELDOVICH, Y., G.I. BARENBLATT, V.B. LIBROVICH, G.M. MAKHVI-LADZE (1985), "Mathematical theory of combustion and explosions", *Plenum Publishing Corporation*
-

Annexe

Description des outils numériques

(1) *Cantera*

Le code de calcul *Cantera* est un logiciel open-source qui a un principe de fonctionnement similaire du logiciel *CHEMKIN*. Cette boîte à outils permet de résoudre les problèmes où les représentations cinétiques chimiques détaillées, les thermodynamiques ou les processus de transport de différentes espèces chimiques ont lieu. Il est utilisé pour les simulations numériques de problèmes réalistes complexes dans les domaines de combustion, de détonations, conservation ou stockage de l'énergie électrochimique, etc.. *Cantera* est programmé en Python, Matlab, C++ ou Fortran 90. La méthode de Newton-Raphson est utilisée.

(2) *Code_Saturne*

Créé à EDF R&D en 1998 et depuis janvier 2007, *Code_Saturne* est un logiciel généraliste de mécanique des fluides numériques disponible sous licence GPL et téléchargeable gratuitement sur internet. Sa structure modulaire est constituée d'un noyau central auquel peuvent être rajoutés divers modules traitant de physiques particulières (combustion, rayonnement, diphasique lagrangien, etc.).

Code_Saturne permet la résolution des équations de Navier-Stokes pour les écoulements de fluide incompressible (à faible nombre de Mach) basé sur une approche de discrétisation de type volume fini. Il permet aussi l'utilisation d'une large gamme de maillages, structurés ou non, avec n'importe quel type de maille (tétraèdre, hexaèdre, prisme, pyramide, etc.).

Ce logiciel est capable de traiter des écoulements complexes à deux ou trois dimensions, stationnaires ou instationnaires, qu'ils soient laminaires ou turbulents. De nombreux modèles de turbulence sont disponibles : longueur de mélange, deux équations ($k-\epsilon$, etc.), v2f, tensions de Reynolds ($R_{ij} - \epsilon$, etc.) et LES. Le transport de scalaires et de leurs fluc-

tuations peuvent être également pris en compte. Des modules adaptés à des phénomènes physiques particuliers tels que le rayonnement, la combustion, les arcs électriques, sont disponibles. *Code_Saturne* peut aussi être couplé à d'autres logiciels comme le code de thermique Syrthes ou le Code-Aster pour la mécanique des structures.

La discrétisation temporelle est basée sur un schéma prédictor-correcteur pour de faible nombre de Mach faible : une étape de prédiction de vitesse suivie d'une étape de correction (projection) pour les équations de Navier-Stokes. Les équations du modèle de turbulence et des scalaires sont ensuite résolues séparément. Toutes les variables sont résolues sur un maillage non-décalé et au centre des cellules.

Code_Saturne est parallélisé et peut être exécuté sur des architectures à mémoire distribuée. La technique employée pour la parallélisation consiste à diviser le domaine global en sous-domaines, chaque CPU exécute le code sur un sous-domaine.

Plus de détails concernant les possibilités, les différents modules et les méthodes numériques, sont disponibles dans la documentation de *Code_Saturne* [39].

(3) *ASPHODELE*

Le code *ASPHODELE* développé initialement par le laboratoire CORIA et complété conjointement par les laboratoires CORIA, PPRIME, EM2C et CMAP est un code de DNS type low-Mach à maillage structuré. Le code est apte à simuler des cas $1D$, $2D$ ou $3D$ avec chimie simple/complexe ainsi que des cas avec suivi lagrangien de particules. La discrétisation spatiale dans le code de simulation numérique directe utilise un schéma implicite aux différences finies. Ce schéma appartient à l'une des familles de schémas compacts d'ordre élevé proposé par Lele [93]. Un schéma de type Runge Kutta d'ordre 3 avec une méthode de stockage minimal [89] est utilisé pour l'intégration en temps.

(4) *OpenFOAM*

OpenFOAM est une boîte à outils de simulation multi-physiques principalement axée sur la résolution des équations de la mécanique des fluides. Il est distribué depuis 2004 sous licence libre et open source GNU GPL par la société britannique OpenCFD Ltd (acquise par SGI le 8 août 2011, puis par ESI Group le 11 septembre 2012). *OpenFOAM* est un code de calcul de type OpenSource basé sur le méthode des volumes finis. La discrétisation du temps et de l'espace en second ordre est utilisée. Ce logiciel est compatible de résolution l'équation de Navier-Stokes pour l'écoulement compressible à bas/haut nombre de Mach.

Il est principalement constitué d'une bibliothèque logicielle en langage C++ libre, et de différents outils, sous forme de bibliothèques et applications, permettant d'effectuer des résolutions. Il est livré avec de nombreux solveurs couvrant une large gamme de domaines tels que la combustion, les écoulements compressibles, incompressibles, multiphasiques, avec réactions chimiques, les transferts thermiques, etc.. Le solveur *sonicFoam* qui est un solveur en transition de sonique/supersonique d'un écoulement turbulent du gaz compressible est utilisé. Différents modèles de turbulence (RANS ou LES) sont également présents. *OpenFOAM* est distribué avec *ParaView*, un logiciel de post-traitement open-source.

Modélisation et simulation numérique de la combustion en présence d'interactions flammes/auto-inflammation

Cette thèse de doctorat est consacrée à la modélisation des écoulements turbulents réactifs dans des cas où les niveaux de température peuvent conduire à l'auto-allumage du mélange. La stratégie de modélisation proposée consiste à traiter séparément les différents mécanismes physiques les plus importants : mélange des espèces chimiques, propagation de fronts de flammes et auto-inflammation. Ainsi, des méthodes simples, dérivées de modèles connus en combustion turbulente non-prémélangée et prémélangée (méthodes de tabulation, PDF présumée) sont utilisées pour représenter les mécanismes de mélange des espèces et de propagation des fronts. Le développement le plus important de ce travail concerne la méthode basée sur l'utilisation d'un temps de résidence pour modéliser l'auto-allumage du mélange. Comme la comparaison directe du temps de résidence au délai d'auto-allumage n'a plus de signification physique dès lors que la composition et la température évoluent avant l'auto-inflammation, un temps de résidence normalisé est introduit. Cette quantité peut aussi être présentée comme l'âge relatif des particules qui vieillissent différemment selon les caractéristiques du mélange local. L'utilisation de ce temps normalisé permet aussi de traiter la difficulté liée aux conditions limites de temps de résidence. Le modèle proposé est d'abord utilisé pour simuler une flamme turbulente non-prémélangée de type JHC (Jet-in-Hot-Coflow) en RANS avec le logiciel de calcul numérique *Code-Saturne* (Bas Mach). Le modèle est ensuite validé par des calculs DNS de couche de mélange 1D soumise à l'auto-inflammation. Enfin, des simulations numériques préliminaires d'une configuration expérimentale récente disponible au laboratoire (Constant Volume Vessel) sont réalisées pour évaluer la faisabilité de l'extension du modèle en LES compressible avec *OpenFOAM*.

Mots clés : Combustion turbulente/ Simulation numérique/ Flammes non-prémélangées/ Modélisation/ Auto-inflammation/ Temps de résidence

Modelling and numerical simulation of combustion in the presence of the interactions between flame and self-ignition

The present study is devoted to the modelling of turbulent reactive flows in cases where the temperature levels can lead to the self-ignition of the mixture. The proposed modelling strategy consists of treating separately the most important physical mechanisms : scalar mixing, flame propagation and self-ignition. Thus, simple methods derived from known models in non-premixed and premixed turbulent combustion (tabulation methods, presumed PDF) are used to represent the mixing mechanism of species and flame propagation. The most important development of this work concerns the method based on the use of a residence time to model the self-ignition of the mixture. Since the direct comparison of the residence time with the self-ignition delay has no physical meaning as long as the composition and the temperature change before the self-ignition, a normalised residence time is introduced. This quantity can also be presented as the relative age of particles that age differently depending on the characteristics of the local mixture. The use of this normalised time also makes it possible to deal with the difficulty related to the boundary conditions of residence time. The proposed model is first used to simulate a non-premixed JHC (Jet-in-Hot-Coflow) turbulent flame in RANS with numerical computation software *Code-Saturne* (low Mach). This model is then validated by DNS calculations of 1D mixing layer subjected to self-ignition. Finally, preliminary numerical simulations of a recent experimental configuration available in the laboratory (Constant Volume Vessel) are carried out to evaluate the feasibility of extending the compressible LES model by using *OpenFOAM*.

Key words : Turbulent combustion/ Numerical simulation/ Non-premixed flames/ Modelling/ Self-ignition/ Residence time