Simulation numérique instationnaire de la combustion turbulente au sein de foyers aéronautiques et prédiction des émissions polluantes

Julien Savre

▶ **To cite this version:**

Julien Savre. Simulation numérique instationnaire de la combustion turbulente au sein de foyers aéronautiques et prédiction des émissions polluantes. Autre [cond-mat.other]. INSA de Rouen, 2010. Français. NNT : 2010ISAM0016 . tel-00557913

HAL Id: tel-00557913

https://theses.hal.science/tel-00557913

Submitted on 20 Jan 2011

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

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

ÉCOLE DOCTORALE
SCIENCES PHYSIQUES, MATHEMATIQUES ET INFORMATION POUR L'INGENIEUR

T H È S E

pour obtenir le titre de

Docteur en Sciences de l'INSA de Rouen
Spécialité : Energétique

Présentée et soutenue par

Julien Savre

Simulation numérique instationnaire de la combustion turbulente au sein de foyers aéronautiques et prédiction des émissions polluantes

Thèse dirigée par Yves D'Angelo

préparée à l'ONERA, Département d'Energétique Fondamentale et Appliquée (Châtillon)

soutenue le 26/01/2010

Jury :

Dr. Nicolas Bertier	-	ONERA - Châtillon	(*Examinateur*)
Dr. Pascal Bruel	-	LMA - Université de Pau	(*Examinateur*)
Pr. Yves D'Angelo	-	CORIA - INSA Rouen	(*Directeur*)
Dr. Pascale Domingo	-	CORIA - Rouen	(*Examinateur*)
Dr. Daniel Gaffié	-	ONERA - Châtillon	(*Examinateur*)
Pr. Vincent Giovangigli	-	CMAP - Ecole Polytechnique Palaiseau	(*Rapporteur*)
Pr. Philippe Guibert	-	IJLRA - Université Paris VI	(*Examinateur*)
Pr. Thierry Poinsot	-	IMFT/Cerfacs - Toulouse	(*Rapporteur*)

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier la DGA pour avoir financé ces travaux, ainsi que l'ONERA, et en particulier M. Mohamed Habiballah pour m'avoir accueilli au sein de son département d'énergétique fondamentale et appliquée (DEFA).

J'aimerais également remercier chaleureusement Messieurs Vincent Giovangigli et Thierry Poinsot pour avoir relu ce mémoire avec attention et rédigé leurs rapports. J'en profite également pour exprimer ma gratitude à Madame Pascale Domingo, et Messieurs Philippe Guibert et Pascal Bruel pour avoir accepté de venir examiner mon travail de thèse lors de la soutenance.

Je tiens pour continuer à exprimer quelques mots aux personnes que j'ai pu côtoyer au quotidien à l'ONERA durant ces années. Je pense d'abord à l'équipe des développeurs et des intégrateurs CEDRE, notamment Bernard, Denis, Philippe, Anthoine, Florian, Didier et Fred. Merci pour votre aide et vos conseils précieux. Je remercie ensuite les membres du DEFA ainsi que les autres : Pascale, François, Lionel, Angelo, Dominique, Francis, Philippe, Jean-Michel, Julien... Je pense également à tous les actuels doctorants ainsi qu'aux anciens, qu'ils aient déjà terminé ou bien qu'ils soient sur le point de le faire : Luc-Henry, Florian, Jean-Baptiste, Sébastien, Benoît, Guillaume, Jean-Michel... Bonne continuation à tous. Je terminerai ici par un petit mot pour Bruno : merci à toi (et aux femmes de ta vie, mère, grand-mère, copine) pour ta bonne humeur quotidienne et l'ambiance que tu as su entretenir. Ta "bonne" musique nous a donné le courage de travailler chaque jour. Grâce à toutes ces personnes, mes quatre années passées à l'ONERA ont été particulièrement agréables. Merci à tous pour contribuer à maintenir une atmosphère de travail aussi plaisante. Grâce à vous, ce fut un véritable plaisir que de venir à l'ONERA tous les matins.

Parmi ceux avec qui j'ai pu travailler, je souhaite tout spécialement remercier les trois personnes qui m'ont suivi au jour le jour durant la thèse : Yves, Nicolas et Daniel. Ce fut un réel plaisir et une chance que de vous avoir eu comme encadrants. Merci à Yves pour m'avoir encouragé et pour m'avoir un peu poussé lorsque cela était nécessaire. Tu as toujours fait ce qu'il fallait (administrativement et autre) pour que cette thèse se déroule dans les meilleures conditions. Merci ensuite à Nicolas pour ton extrême disponibilité et pour ta générosité. Tu as consacré une grande partie de ton temps au bon déroulement de la thèse (notamment lors de la relecture de ce mémoire) et nos nombreuses discussions scientifiques ont été particulièrement enrichissantes. Pour finir, un immense merci à Daniel qui est celui qui m'a offert l'opportunité d'effectuer cette thèse. Tu as toujours été prêt à rendre service et à consacrer ton temps pour moi (et ce depuis mon stage que j'ai effectué sous ta tutelle). Ce fut également toujours très agréable que de pouvoir décompresser un peu en ta compagnie, à parler de tout et de rien, et de pouvoir se confier. J'espère avoir l'occasion de pouvoir vous recroiser prochainement sur ma route.

Cette page de remerciements ne peut finalement pas être complète sans dire un mot sur la personne la plus experte en combustion que je connaisse. Merci du fond du coeur à toi, Guénaëlle, pour avoir su entretenir cette flamme qui continue de brûler entre nous malgré la distance. Tu as toujours été présente pour m'encourager et me soutenir. MERCI...

Table des matières

1 Rappels théoriques sur la structure des flammes **13**
1.1 Structure des flammes laminaires . . . 14
1.1.1 Les flammes laminaires de prémélange . . . 14
1.1.2 Structure des flammes non prémélangées . . . 18
1.1.3 Structure des flammes partiellement prémélangées . . . 21
1.2 Phénoménologie des interactions flamme/turbulence . . . 24
1.2.1 Flammes turbulentes prémélangées . . . 24
1.2.2 Flammes turbulentes non prémélangées . . . 27
1.3 Diagrammes pour la combustion turbulente numérique . . . 28

2 Méthode de tabulation de flammes laminaires prémélangées **31**
2.1 Contexte et orientation de l'étude . . . 32
2.2 Etat de l'art sur les méthodes de réduction des schémas cinétiques . . . 32
2.2.1 Réduction systématique des schémas réactionnels . . . 32
2.2.2 Algorithmes génétiques . . . 34
2.2.3 Méthode de réduction CSP . . . 34
2.2.4 Méthode de réduction de type ILDM . . . 35
2.2.5 Méthode ISAT . . . 38
2.2.6 Modèles FPI et FGM . . . 38
2.3 Génération de tables FPI . . . 40
2.3.1 Choix des variables du problème . . . 40
2.3.2 Code de calcul pour flammes laminaires prémélangées libres . . . 42
2.3.3 Interfaçage de PREMIX et génération d'une table . . . 45
2.4 Couplage des tables avec le code CEDRE . . . 46
2.4.1 Présentation du code CEDRE . . . 46
2.4.2 Stratégie de couplage . . . 50
2.4.3 Thermodynamique et coefficients de transport . . . 52
2.4.4 Choix des espèces transportées . . . 53
2.4.5 Cohérence des taux de réaction tabulés . . . 55
2.4.6 Correction des termes sources interpolés . . . 59
2.4.7 Résumé de la méthode de couplage CEDRE/FPI . . . 64
2.5 Validation : flammes laminaires prémélangées libres . . . 64
2.5.1 Conditions de calcul . . . 64
2.5.2 Résultats . . . 65
2.5.3 Conclusion . . . 71

3 Modélisation de la combustion turbulente **73**
3.1 Introduction . . . 74
3.2 Rappels sur la modélisation de la combustion turbulente prémélangée . . . 74
3.2.1 Filtrages RANS et LES . . . 75
3.2.2 Modèle de flamme épaissie pour la LES (TFLES) . . . 77
3.2.3 Modèles géométriques . . . 78
3.2.4 Approches statistiques . . . 81
3.2.5 Comparaison des domaines de validité de différents modèles . . . 85
3.3 Modélisation de la turbulence avec CEDRE : équations filtrées/moyennées . . . 88

3.3.1 Equations filtrées . . . 88
3.3.2 Fermeture des équations . . . 89
3.4 Modélisation des interactions combustion/turbulence dans le cadre de l'utilisation de tables FPI . . . 90
3.5 Evaluation des PDF : les fonctions β . . . 91
3.6 Moments du premier ordre : $\widetilde{z}$ et $\widetilde{c}$ . . . 92
3.7 Moments du second ordre : $\widetilde{z''^2}$ et $\widetilde{c''^2}$ . . . 93
3.7.1 Fermeture des taux de dissipation scalaires . . . 94
3.7.2 Modélisation de la corrélation $\overline{\rho c''\dot{\omega}_c}$ . . . 98
3.7.3 Equations de transport fermées . . . 100
3.7.4 Relations algébriques pour l'évaluation des moments d'ordre 2 . . . 100
3.8 Correction des termes sources interpolés par CEDRE . . . 101
3.9 Construction et utilisation de tables turbulentes . . . 102
3.9.1 Couplage de tables turbulentes avec le code CEDRE . . . 102
3.9.2 Exemple de construction d'une table FPI turbulente . . . 102
3.10 Conclusions et limitations du modèle . . . 104

4 Modélisation de la formation de NO dans le cadre du modèle FPI 107
4.1 Introduction : difficultés liées à la modélisation de la formation de NO en écoulements complexes . . . 108
4.2 Mécanismes de formation de NO . . . 110
4.2.1 Le "prompt-NO" . . . 110
4.2.2 Le "fuel-NO" . . . 110
4.2.3 Le "NO-reburning" . . . 111
4.2.4 Le "NO-thermique" . . . 111
4.2.5 Voies de formation de NO alternatives . . . 112
4.2.6 Mécanismes réactionnels détaillés et réduits . . . 113
4.3 Modèles de combustion turbulente pour la prise en compte du NO . . . 113
4.3.1 Utilisation de mécanismes réactionnels réduits . . . 113
4.3.2 Approches à flammelettes laminaires . . . 114
4.3.3 Modèles de post-traitement stationnaires . . . 114
4.3.4 Modèles basés sur une chimie tabulée . . . 115
4.4 Modélisation de la production de NO via l'utilisation de tables FPI étendues . . . 116
4.4.1 Définition d'une nouvelle variable d'avancement . . . 116
4.4.2 Construction d'une table pour NO . . . 119
4.4.3 Validation des tables FPI-NOx sur une flamme laminaire de prémélange . . . 121
4.5 Couplage avec la turbulence . . . 124
4.5.1 Difficultés . . . 124
4.5.2 Définition de la PDF de η . . . 126
4.5.3 Détermination de $\widetilde{\eta}$ et $\widetilde{Y}_{NO}$ . . . 127
4.5.4 Détermination de $\widetilde{\eta''^2}$ . . . 128
4.5.5 Exemple de tables FPI-NOx filtrées . . . 130
4.6 Modèle cinétique de formation de NO . . . 130
4.6.1 Principe de la méthode . . . 130
4.6.2 Avantages et inconvénients . . . 132
4.6.3 Influence de la turbulence . . . 133
4.6.4 Un exemple : le mécanisme de Zel'dovich à trois équations . . . 133
4.7 Conclusion : avantages et limitations des modèles proposés . . . 134

5 Validation : flamme turbulente prémélangée pauvre de Nandula **137**
5.1 Introduction . . . 138
5.2 Description du banc expérimental . . . 138
5.3 Présentation des simulations RANS . . . 140
5.3.1 Domaine de calcul et conditions limites . . . 140
5.3.2 Méthodes numériques . . . 140
5.3.3 Modèles et cas de calcul . . . 141
5.4 Résultats des simulations RANS . . . 141
5.4.1 Comparaison des modèles de variance algébriques . . . 142
5.4.2 Résultats de calculs avec variance transportée . . . 145
5.4.3 Conclusion . . . 146
5.5 Présentation des simulations LES . . . 147
5.5.1 Domaine de calcul et conditions limites . . . 147
5.5.2 Méthodes numériques . . . 148
5.5.3 Modèles et cas de calcul . . . 149
5.6 Résultats des simulations LES . . . 150
5.6.1 Structure instantanée de la flamme . . . 150
5.6.2 Comparaison des profils des grandeurs thermochimiques moyennes . . . 150
5.6.3 Aérodynamique de la chambre . . . 151
5.6.4 Conclusions . . . 153
5.7 Analyse qualitative des résultats et interprétations . . . 154
5.7.1 Espèces majoritaires et température . . . 154
5.7.2 Concentrations de CO . . . 155
5.7.3 Régime de combustion . . . 156
5.8 Conclusions . . . 157

6 Simulation numérique d'un injecteur prémélangé pauvre swirlé **159**
6.1 Introduction . . . 160
6.2 Présentation de l'expérience PRECCINSTA . . . 161
6.2.1 Description du banc expérimental . . . 161
6.2.2 Base de données expérimentales . . . 162
6.3 Conditions de calcul pour le cas parfaitement prémélangé . . . 162
6.3.1 Domaine de calcul . . . 163
6.3.2 Maillages . . . 163
6.3.3 Conditions limites . . . 164
6.3.4 Modèles physiques et numériques utilisés pour les simulations FPI . . . 165
6.3.5 Modèles physiques et numériques utilisés pour les autres cas de calcul . . . 166
6.3.6 Récapitulatif . . . 168
6.4 Résultats en combustion prémélangée . . . 168
6.4.1 Performances et temps de calcul . . . 168
6.4.2 Structure de la flamme . . . 169
6.4.3 Champs instantanés de fraction massique de OH . . . 170
6.4.4 Comparaisons des profils de vitesses moyennes et fluctuantes . . . 174
6.4.5 Comparaisons des profils des grandeurs chimiques moyennes . . . 175
6.5 Simulation de la configuration partiellement prémélangée . . . 188
6.5.1 Objectifs . . . 188
6.5.2 Conditions limites et maillage pour le cas partiellement prémélangé . . . 188
6.5.3 Détails numériques sur la simulation . . . 189
6.6 Résultats de calcul sur la configuration partiellement prémélangée . . . 190
6.6.1 Comparaison des profils des grandeurs moyennes . . . 190

6.6.2 Etude du mélange instantané . . . 193
6.6.3 Etude du mélange moyen . . . 193
6.7 Simulation de la production de NO . . . 202
6.7.1 Modèlisation de la formation de NO pour PRECCINSTA . . . 202
6.7.2 Comparaison des champs de NO moyens . . . 204
6.7.3 Comparaison des profils de Y_{NO} moyens à travers la chambre . . . 206
6.7.4 Interprétations . . . 207
6.8 Conclusion . . . 211

A Mécanisme de Smooke et Giovangigli (S&G) à 16 espèces et 25 réactions 219

B Construction de tables chimiques étendues : application aux flammes non adiabatiques 221
B.1 Extension de FPI aux flammes non adiabatiques . . . 221
B.2 Validation de la méthode . . . 222
B.2.1 Présentation du cas test . . . 222
B.2.2 Résultats . . . 222

C Conservation de la masse et de l'énergie lors du couplage FPI/CEDRE 225
C.1 Problématique . . . 225
C.2 Choix des espèces transportées . . . 226
C.3 Procédure de conservation de la masse . . . 228
C.4 Procédure de conservation du dégagement de chaleur . . . 228

D Le modèle PEUL de l'ONERA 231
D.1 La méthode de Monte-Carlo . . . 231
D.2 Suivi lagrangien des particules . . . 232
D.3 Couplage entre les particules et le champ eulérien . . . 233

E Difficultés numériques d'évaluation des β-PDF 235

F Une PDF de c basée sur la densité de surface de flamme 237

G Conditions limites caractéristiques non réfléchissantes pour CEDRE 241
G.1 Formalisme . . . 241
G.2 Principes de la méthode . . . 242
G.3 Conditions limites d'entrée/sortie . . . 243
G.4 Prise en compte des gradients transversaux . . . 245
G.5 Validation . . . 246

H Optimisation du mécanisme GRI-Mech 3.0 pour la chimie de NO 249
H.1 Nécessité de modifier GRI-Mech 3.0 . . . 249
H.2 CH précurseur du prompt-NO . . . 249
H.3 CH_2 précurseur du prompt-NO . . . 251
H.4 NNH comme précurseur de NO . . . 251
H.5 Formation de NO via NO_2 et N_2O . . . 252
H.6 Validation du mécanisme modifié et discussion . . . 253
H.7 Conclusion . . . 254

I Profils supplémentaires pour les simulations de la configuration de Nandula **257**
I.1 Variance algébrique et dissipation scalaire BML 257
I.2 Variance algébrique et dissipation scalaire ITNFS 257
I.3 Variance transportée 257
I.4 Simulations LES 257

J Profils supplémentaires pour les simulations de PRECCINSTA **263**
J.1 Comparaisons des profils de vitesses 263
J.2 Comparaisons des cas FPI1 et FPI2 : influence de la constante du modèle de variance 264
J.3 Comparaisons des cas FPI1 et FPI3 : sensibilité au maillage 264
J.4 Comparaisons des cas FPI3, ARRH et TFLES : influence du modèle de combustion . 264

Bibliographie **273**

Nomenclature

Acronymes

BML : Bray-Moss-Libby ou Bi-Modal Limit
CEDRE : Calculs d'Ecoulements Diphasiques Réactifs pour l'Energétique
CFD : Computational Fluid Dynamics
CMC : Conditional Moment Closure
CSP : Computational Singular Perturbation
DNS : Direct Numerical Simulation
EBU : Eddy Break Up
FDF : Filtered Density Function
FGM : Flame Generated Manifold
FPDF : Filtered PDF
FPI : Flame Prolongation of ILDM
FSD : Flame Surface Density
IEM : Interaction by Exchange with the Mean
ILDM : Intrinsic Low Dimensional Manifold
ITNFS : Intermittent Turbulent Net Flame Stretch
ISAT : In Situ Adaptative Tabulation
LEM : Linear Eddy Model
LEPDF : Large Eddy PDF
LES : Large Eddy Simulation
MUSCL : Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws
PCM : Presumed Conditional Moments
PDF : Probability Density Function
β-PDF : PDF suivant une fonction β
PEUL : Probabiliste EUlerien-Lagrangien
PRG : Pouvoir de Réchauffement Global
PVC : Precessing Vortex Core
RANS : Reynolds Averaged Navier-Stokes
RHS : Right Hand Side
RK : Runge-Kutta
RMS : Root Mean Square
SGS : Sub-Grid Scale
SLFM : Steady Laminar Flamelet Model
TFLES : Thickened Flame for LES
THI : Turbulence Homogène Isotrope

Nombres sans dimension

CFL : Nombre de Courant-Friedrich-Levy $CFL = (|u + a|\Delta t) / \Delta x$
Da : Nombre de Damkhöler $Da = \tau_l / \tau_c$
Ka : Nombre de Karlovitz $Ka = \tau_c / \tau_\eta$
Le : Nombre de Lewis $Le = \lambda / (\rho c_p D)$
M : Nombre de Mach $M = u/a$
Ma : Nombre de Markstein
Pr : Nombre de Prandtl $Pr = \mu c_p / \lambda$
Sc : Nombre de Schmidt $Sc = \mu / (\rho D)$
Re : Nombre de Reynolds $Re = \rho u L / \mu$

Symboles latins

a : Vitesse du son
a_T, a_c : Etirement tangentiel et courbure de la flamme
A, b, Ea : Paramètres de la loi d'Arrhenius
c : Variable d'avancement chimique
c_m : Variable d'avancement BML
$c_{p,i}$, c_p : Capacité calorifique massique à pression constante de l'espèce i et de mélange
C_i / $[\![R_i]\!]$: Concentration molaire de l'espèce i
C_S : Constante du Smagorinsky $C_S = 0.1$
C_ϵ : Constante du modèle $k - \epsilon$ $C_\mu = 0.09$
C', C'' : Constantes des modèles de dissipation scalaire et variance
$\boldsymbol{D}$: Tenseur des taux de déformation
D_i : Coefficient de diffusion de l'espèce i
e, e_t : Energie interne et totale
F, E : Facteur d'épaississement et d'efficacité (modèle TFLES)
$F(x)$: Fonction quelconque de la variable x
G : Fonction level-set
G_Δ : Noyau du filtre LES
h_i, h : Enthalpie de l'espèce et de mélange
$h^0_{f,i}$: Enthalpie de formation de l'espèce i
H : Fonction de Heaviside
$\boldsymbol{I}$: Matrice indentité
$\boldsymbol{J}$: Matrice jacobienne
$\boldsymbol{J}_i$: Flux de diffusion de masse de l'espèce i
$\boldsymbol{J_t}$: Flux de diffusion thermique total

k : Energie cinétique de la turbulence

k_{fj}/k_{bj}, k_{eq} : Vitesse de réaction directe/inverse de la réaction j et constante d'équilibre

K : Taux d'étirement

l_t, l_G : Echelle intégrale de la turbulence et échelle de Gibbs

$\boldsymbol{\mathcal{L}}$: Amplitudes des ondes entrant et sortant du domaine

L : Echelle caractéristique de la turbulence intervenant dans le modèle $k - L$

M_i, M : Masse molaire de l'espèce i et de mélange

$\mathcal{M}_l$: Masse atomique de l'élément l

$\boldsymbol{n}$: Vecteur normal unitaire

N_e, N_r, N_a : Nombre d'espèces, de réactions et d'atomes

p, p_a : Pression et pression atmosphérique

$\dot{P}$, $\dot{D}$: Taux de production/disparition

$P(x)$: Fonction densité de probabilité de la variable x

$\boldsymbol{q}$: Vecteur des quantités conservatives

$\boldsymbol{Q}$: Flux de chaleur

$\mathcal{Q}_i$: Diffusion de l'espèce i à travers les iso-surfaces de c

R : Constante des gaz parfaits

r_i : Constante spécifique des gaz parfaits

s : Rapport stoechiométrique entre le fuel et l'oxydant

S_d^i, S_d^c : Vitesse de déplacement des isosurfaces de l'espèce i et de c

S_L^0 : Vitesse de flamme laminaire non étirée

S_t : Vitesse de flamme turbulente

T : Température

$\boldsymbol{u}$: Vecteur vitesse

u_l' : Fluctuation de vitesse à l'échelle l

$\boldsymbol{\mathcal{U}}$: Vecteur des quantités primitives

v_m : Volume massique

V_i, V_c : Vitesse de diffusion moléculaire de l'espèce i et vitesse de correction

$\boldsymbol{V}_d$, $\boldsymbol{V}_g$: Vecteurs propres à droite/gauche

$\mathcal{W}_i$: Terme de correction des sources chimiques interpolées de l'espèce i

X_i : Fraction molaire de l'espèce i

Y_i : Fraction massique de l'espèce i

$\mathcal{Y}_l$: Fraction atomique de l'élément l

z, $\mathcal{Z}$: Fraction de mélange et fraction de mélange renormalisée

Symboles Grecs

δ : Symbole de Kronecker, fonction de Dirac

δ_L^0 : Epaisseur de flamme laminaire non étirée

δ_ω : Epaisseur de vorticité

Δ : Taille du filtre LES (assimilée ici à la taille de maille Δx)

Δx : Taille de maille

Δt : Pas de temps

ΔS_j^0, ΔH_j^0 : Variation d'entropie et d'enthalpie due à la réaction j

χ, s_χ : Taux de dissipation scalaire et sa partie sous-maille

ϵ : Taux de dissipation de la turbulence

η : Echelle intégrale de la turbulence ou variable d'avancement NO

γ : Coefficient isentropique

Γ : Fonction ITNFS ou fonction gamma

κ : Coefficient multiplicatif pour la variable d'avancement η

λ_i, λ : Conductivité thermique de l'espèce i et de mélange

$\mathbf{\Lambda}$: Valeurs propres d'une matrice

μ_i, μ : Viscosité dynamique de l'espèce i et de mélange

ν : Viscosité cinématique

μ_l^i : Nombre d'atome l dans l'espèce i

ν_i'/ν_i'' : Coefficients stoechiométriques direct/inverse de l'espèce i

φ : Richesse

ρ : Masse volumique

σ : Facteur de ségrégation (variance réduite)

Σ : Densité de surface de flamme

$\boldsymbol{\tau}$: Tenseur des contraintes visqueuses

τ_c : Temps caractéristique chimique

τ_t, τ_l, τ_η : Temps caractéristique de la turbulence

$\dot{\omega}_i$: Taux de réaction chimique de l'espèce i

$\dot{\omega}_T$: Taux de dégagement de chaleur

ω_t, ω_p : Coefficients de dilatation et de compressibilité

Ξ : Facteur de plissement

ξ, ζ : Coordonnées du repère lié à la flamme

Indices

0 : Grandeurs liées à une référence

i : Indice des espèces

j : Autres indices

k : Indice des directions de l'espace

l : Indice des éléments

c : Grandeurs relatives à la variable d'avancement

eq : Grandeurs prises à l'équilibre

F, O : Fuel/Oxydant
imp : Grandeurs imposées (condition limite)
max : Valeur maximale de la grandeur considérée
NO, η : Grandeurs relatives à l'espèce NO ou à la variable d'avancement η
st : Grandeurs prises à la stoechiométrie
t : (en indice bas) Grandeurs turbulentes
t : (en indice haut) Flux turbulents
tab : Grandeurs tabulées
u, b : Grandeurs prises dans les gaz frais/brûlés
z : Grandeurs relatives à la fraction de mélange

Autres notations

Φ, Ψ : Grandeurs scalaires quelconques
$\mathbf{\Phi}$, $\mathbf{\Psi}$: Tenseurs quelconques
$\bar{.}$: Opérateur de moyenne ou de filtrage
$\tilde{.}$: Opérateur de moyenne ou de filtrage de Favre
$.'$: Fluctuations
$.''$: Fluctuations au sens de Favre
$\langle . \rangle$: Moyenne d'ensemble
$\langle . \rangle_S$: Moyenne le long du front de flamme
$\overline{\Psi|\phi}$: Moyenne de Ψ conditionnée à ϕ

Introduction

Contexte de l'étude

A l'heure actuelle, la pollution générée par les activités humaines devient particulièrement préoccupante. Il est donc primordial d'œuvrer à la réduction de l'émission de substances potentiellement toxiques pour l'homme et l'environnement, rejetées par les principales sources émettrices reconnues. Le secteur aéronautique, important consommateur d'énergies fossiles, est, à ce titre, concerné.

Parmi les polluants usuellement considérés, on peut citer :

- **les gaz à effet de serre (GES)** : le principal gaz à effet de serre produit par l'activité humaine est le dioxyde de carbone, CO_2 (environ 75% des émissions totales [3]). Il possède toutefois un pouvoir de réchauffement global (PRG) relativement faible comparé à d'autres substances telles que les hydrofluorocarbures (les HFC, qui ont un PRG jusqu'à 12 000 fois plus important que CO_2), ou encore le méthane. D'importants progrès technologiques doivent encore être apportés afin de limiter l'émission de cette espèce, ce qui passe par une réduction de la consommation spécifique des moteurs. A noter que le principal GES naturel reste la vapeur d'eau qui contribue à hauteur d'environ 70% à l'effet de serre global sur la planète.
- ***leCO*** : on connait déjà les intoxications graves, voire mortelles, dont est responsable le monoxyde de carbone à fortes doses. A de plus petites doses, CO peut provoquer différentes gênes neurosensorielles en diminuant la capacité d'oxygénation du sang (CO se fixe sur l'hémoglobine à la place de l'oxygène suivant un processus irréversible) ;
- ***leNOx*** : sous le terme de NOx on regroupe souvent le monoxyde et le dioxyde d'azote, ainsi que le protoxyde d'azote. Alors que N_2O est un puissant gaz à effet de serre, NO_2 a un impact direct sur l'organisme en altérant les capacités respiratoires. NO n'affecte pas directement la santé humaine, mais sa recombinaison avec l'azote et l'oxygène atmosphériques favorise la production des deux éléments précédemment cités ;
- **les suies** : ces particules, provenant de l'agrégation de grosses molécules issues de la combinaison d'hydrocarbures imbrûlés, sont responsables de troubles respiratoires. Ces atteintes sont très dépendantes de la taille des particules. On estime en effet que seules les particules dont la taille est inférieure à 10 μm peuvent pénétrer le système respiratoire.

Bien que la contribution absolue du secteur aéronautique au rejet de toutes ces substances demeure faible (de l'ordre de 2 à 4%, voir figure 1), il ne faut toutefois pas la négliger. En effet, si la prise de conscience de la situation actuelle a permis une réduction importante de la production de ces polluants dans bon nombre de secteurs, l'aéronautique reste un domaine dans lequel la restriction des émissions se révèle moins immédiate. Cette restriction passe aujourd'hui par une amélioration des foyers de combustion nécessitant certaines ruptures technologiques.

Deux facteurs laissent à penser que le contrôle des émissions polluantes induites par le transport aérien constitue une préoccupation majeure :

- d'une part, le trafic aérien s'intensifie d'année en année (voir figure 2),
- d'autre part, il est plus difficile de développer des carburants de substitution pour l'aviation tant carburant et système propulsif sont interdépendants (couple carburant - moteur).[1]

Il s'ensuit que l'on assiste, ces dernières années, à une augmentation de la contribution relative de l'aviation au rejet dans l'atmosphère de polluants tels que CO ou NO (voir figure 1).

De nombreuses normes ont vu le jour ces dernières années pour limiter l'impact environnemental du secteur aéronautique, contraignant les motoristes à développer des chambres de combustion plus

[1] En particulier, le développement de nouveaux carburants alternatifs est rendu difficile par le fait que certaines proprietés physiques (viscosité, température de gel, cokéfaction...) doivent être strictement respectées, ce qui rend délicate la qualification de ces nouveaux carburants.

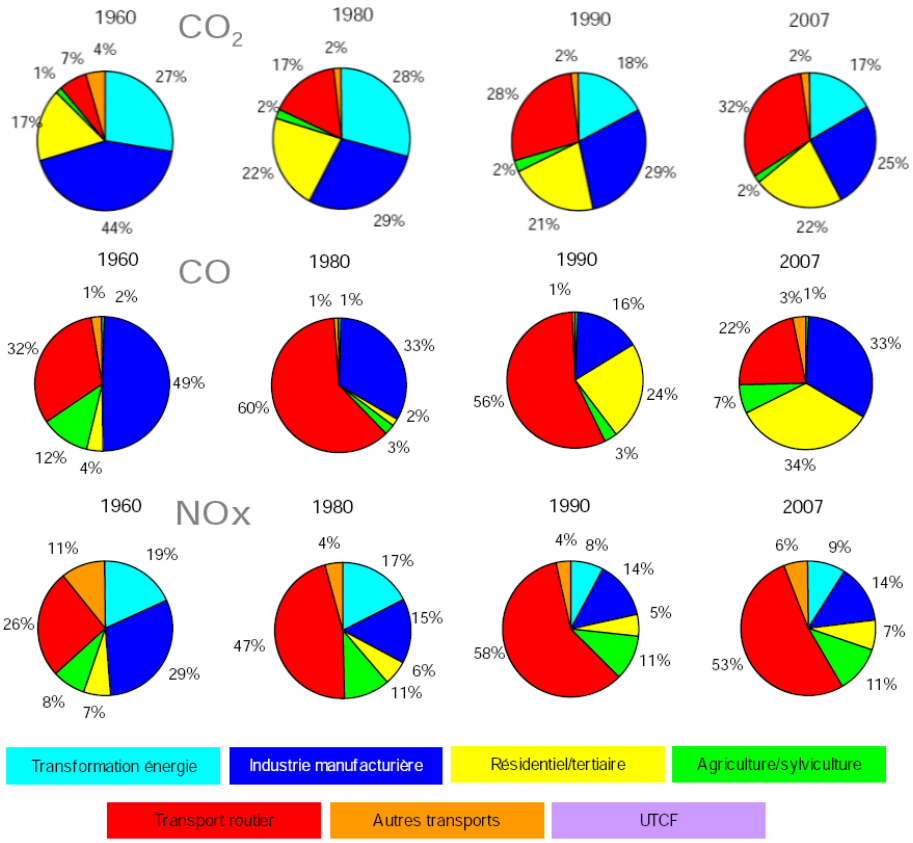

FIG. 1 – *Evolution de la contribution de différentes sources à l'éjection de CO_2, CO et NOx dans l'atmosphère [3], [2]. Le secteur aéronautique est inclu dans la section "autres transports".*

propres. En particulier, en Europe, le conseil ACARE ("Advisory Council for Aeronautics Research in Europe") propose de réduire les émissions de NOx de 80% et celles de CO de 50% à l'horizon 2020. Afin de respecter ces nouvelles contraintes, d'importants efforts ont été entrepris pour concevoir de nouveaux systèmes propulsifs.

Le développement de nouvelles technologies, matures du point de vue de l'opérabilité, est un travail de longue haleine qui demande aux motoristes de déployer beaucoup d'efforts. Parmi les outils mis à disposition pour la conception de nouveaux foyers performants, la simulation numérique apparaît comme un complément incontournable aux essais moteurs, pour un coût d'exploitation limité. Ainsi, l'objectif principal du travail de thèse présenté dans ce mémoire est de proposer et de développer une approche numérique permettant la simulation d'écoulements réactifs au sein de foyers aéronautiques, en vue de prédire la formation des principales espèces polluantes.

Les méthodes et les modèles employés ont été développés en vue d'une utilisation dans le cadre d'applications réalistes. Tous les choix réalisés ont été retenus en se fondant principalement sur des critères d'applicabilité : les modèles peuvent être adaptés à des codes de CFD de type industriels, leur mise en œuvre est largement facilitée, les temps de restitution des calculs restent compatibles avec des contraintes industrielles... Ce point constitue une dimension particulièrement importante de ce mémoire qu'il est important de garder en vue lors de sa lecture.

Simulation numérique et prédiction d'émissions polluantes

La problématique traitée dans ce mémoire nous impose trois contraintes pour mener à bien l'étude :

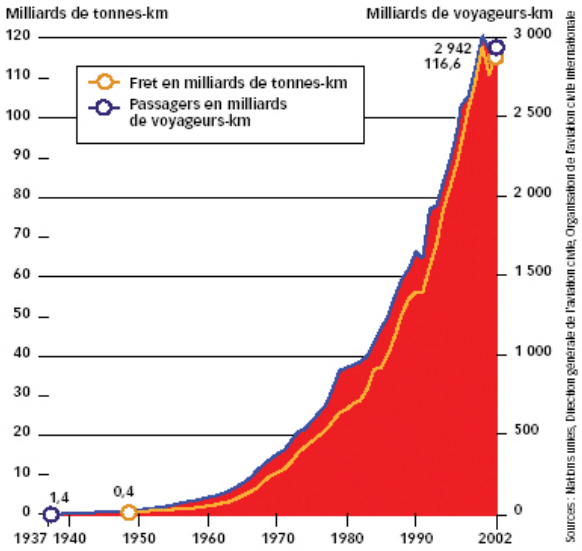

FIG. 2 – *Augmentation du trafic aérien (fret et passagers) depuis 70 ans (www.alternatives-economiques.com).*

- la simulation numérique d'écoulements réactifs au sein de chambres de combustion réelles nécessite l'emploi d'un code de calcul approprié ;
- la prise en compte de mécanismes réactionnels complexes se révèle indispensable pour une description détaillée des processus chimiques mis en jeux lors de la formation des polluants ;
- la modélisation des interactions entre les processus chimiques et la turbulence doit se fonder sur l'utilisation de modèles adaptés à la prise en compte de schémas cinétiques détaillés et demeurer compatible avec les contraintes industrielles.

Les travaux présentés dans ce mémoire ont été réalisés à l'aide du code de calcul CEDRE, développé à l'ONERA. Ce code a été conçu dans le but de simuler les écoulements multiphysiques complexes (en particulier les écoulements réactifs, diphasiques, rayonnants...) rencontrés dans l'industrie aéronautique. Les méthodes numériques utilisées par CEDRE facilitent la prise en compte de géométries complexes grâce à l'emploi de maillages complètement non structurés. Du fait de ces caractéristiques, CEDRE est un code parfaitement approprié aux types d'applications considérées dans le cadre de ce travail.

La prédiction des émissions polluantes au sein des flammes turbulentes nécessite en outre une caractérisation détaillée des processus chimiques mis en jeu. Il est donc nécessaire d'employer des mécanismes réactionnels étendus, pouvant regrouper parfois plusieurs centaines d'espèces et de réactions. Toutefois, compte tenu des moyens de calcul actuels, il n'est pour le moment pas possible d'envisager la simulation de flammes turbulentes complexes prenant en compte directement de tels schémas détaillés. De ce fait, la réduction des schémas réactionnels donnés s'avère indispensable pour mener à bien les calculs visés.

Afin de concilier la description d'une chimie complexe et les contraintes liées à la simulation numérique de configurations industrielles (occupation mémoire, temps de calcul), différentes méthodes peuvent être employées. Dans ce contexte, l'utilisation de techniques automatiques de réduction de schémas, telles que CSP ou ILDM, peut être envisagée. Ces approches sont basées sur l'existence de sous-espaces attracteurs vers lesquels chaque système chimique considéré relaxe. La détermination de ces sous-espaces peut être réalisée en tenant compte de schémas réactionnels détaillés et résulte en la construction de tables indexées par un faible nombre de degrés de liberté. Ces modèles atteignent toutefois leurs limites lorsque la chimie évolue avec des temps caractéristiques relativement grands (par exemple à basse température), ce qui rend leur utilisation impossible dans un cadre industriel.

Pour pallier les limitations de ces approches, de nouveaux modèles sont apparus récemment, tel que le modèle FPI ("Flame Prolongation of ILDM"). Ce dernier a particulièrement attiré notre attention. Il permet la réduction de schémas réactionnels détaillés sous la forme de tables à partir de calculs de flammes élémentaires de prémélange laminaires. L'utilisation du modèle FPI s'avère particulièrement pertinente dans le cadre de la simulation numérique de foyers aéronautiques car il est parfaitement adapté au régime de combustion rencontré dans ce type d'application.

Malgré les avantages apportés par le modèle FPI, La prédiction de la formation de NO nécessite un traitement particulier. Cette espèce est en effet formée hors équilibre et évolue avec des temps chimiques caractéristiques beaucoup plus grands que les autres espèces. Jusqu'à présent, sa modélisation dans un contexte industriel n'a été réalisée qu'à l'aide de modèles cinétiques simplifiés ou nécessitant l'ajustement empirique de paramètres. Ces modèles ne peuvent généralement être employés que sur une plage de fonctionnement restreinte. Dans le cadre de notre travail, deux approches spécifiques ont été proposées, exploitant les avantages apportés par l'utilisation de tables FPI.

Lorsque l'on considère la simulation de flammes turbulentes, l'influence de la turbulence sur les taux de production chimiques des espèces doit être modélisée. Dans un contexte industriel, les modèles les plus couramment utilisés se fondent sur l'hypothèse de flammelettes qui consiste à supposer que la flamme turbulente possède une structure localement similaire à une flamme laminaire[2]. Lorsque l'on s'intéresse aux flammes prémélangées, les travaux existants se basent souvent sur le modèle de flamme épaissie ou sur des approches géométriques (level-set ou densité de surface de flamme). Toutefois, dans le cas présent, il est nécessaire que le modèle retenu puisse être utilisé conjointement à une chimie tabulée, ce qui n'est pas le cas des modèles cités ci-dessus.

Les modèles à PDF présumées consistent à attribuer une forme prédéfinie aux fonctions de densité de probabilité des paramètres décrivant l'évolution du système chimique considéré. Ces approches peuvent être couplées à une chimie complexe tabulée, pour un coût d'exploitation réduit et une grande simplicité de mise en œuvre. En modélisant ces PDF à l'aide de fonctions β, on retrouve en outre l'hypothèse de flammelettes. Ces modèles sont donc parfaitement adaptés aux applications envisagées dans ce mémoire.

Plan détaillé du mémoire

Ce mémoire est composé de six chapitres. Dans le premier sont exposés les éléments théoriques concernant la structure des flammes laminaires et turbulentes, nécessaires pour appréhender les modèles développés par la suite.

Le modèle de combustion à chimie tabulée est ensuite introduit dans le second chapitre. Ce modèle, largement documenté dans la littérature, est modifié et adapté pour pouvoir être couplé au code CEDRE. En particulier, il est montré que les termes sources chimiques des espèces transportées, interpolés dans les tables FPI, doivent être corrigés pour assurer la consistance entre les données issues du calcul de CFD et celles de la table. Ce modèle est validé de façon approfondie sur le cas simple de flammes laminaires de prémélange libres.

Dans le troisième chapitre, le modèle de combustion turbulente, s'appuyant sur des fonctions de densités de probabilités de formes présumées, est introduit. Suivant cette méthode, toutes les grandeurs chimiques turbulentes issues des tables peuvent être reliées aux deux premiers moments statistiques (moyenne et variance) des paramètres du modèle. Dans ce chapitre, on se focalise donc sur les modèles nécessaires pour caractériser ces deux grandeurs statistiques.

Le point le plus original du travail de thèse présenté, concernant le développement d'approches spécifiques à la prédiction de la formation de NO, est ensuite décrit. Deux modèles sont alors proposés, exploitant les propriétés thermochimiques issues des tables FPI. La première approche est basée sur la

[2]Cette hypothèse est implicitement posée lorsque l'on utilise le modèle FPI.

construction de tables spécifiques à l'espèce NO, alors que la seconde permet l'évaluation des termes sources chimiques de NO via l'utilisation d'un sous-mécanisme réactionnel complexe dédié.

La validation des modèles présentés est réalisée dans le chapitre cinq sur un cas académique simple, consistant en une flamme de prémélange pauvre stabilisée par un accroche flamme conique. Cette étude possède deux finalités. Dans un premier temps, elle a pour but de comparer les modèles de combustion turbulente décrits, à l'aide de calculs RANS paramétriques. Dans un deuxième temps, différents calculs LES sont réalisés afin d'évaluer les capacités du modèle FPI/PDF présumées à simuler une flamme turbulente prémélangée instationnaire.

Dans le dernier chapitre, les résultats de simulations LES menées sur un cas plus représentatif des problématiques industrielles, le brûleur PRECCINSTA, sont présentés. Cette configuration a largement été étudiée par le passé, expérimentalement et numériquement, et elle autorise la réalisation de calculs dans un contexte prémélangé (géométrie simplifiée) ou partiellement prémélangé (géométrie réelle). Dans un premier temps, le modèle FPI développé dans le cadre de cette thèse est appliqué avec succès sur le cas parfaitement prémélangé. A la suite de ces calculs, les modèles de formation de NO proposés sont appliqués afin d'évaluer leurs capacités respectives. Cette comparaison est cependant rendue délicate par le fait que l'on ne dispose pas de données expérimentales pour NO sur cette chambre. Les premiers résultats obtenus sur la configuration PRECCINSTA complète (prémélange partiel) sont finalement introduits. Un seul calcul a été réalisé dans ce cadre en utilisant une table étendue pour laquelle la fraction de mélange a été ajoutée comme degré de liberté. Ces calculs n'ont malheureusement pas pu être traités intégralement, mais les premiers résultats étant particulièrement encourageant, ceux-ci devront être poursuivis à l'avenir.

Pour clore ce mémoire, un résumé des résultats marquants obtenus est réalisé et les ouvertures possibles à de futurs travaux sont discutées.

Chapitre 1

Rappels théoriques sur la structure des flammes

Sommaire

1.1 Structure des flammes laminaires 14
1.1.1 Les flammes laminaires de prémélange 14
1.1.2 Structure des flammes non prémélangées 18
1.1.3 Structure des flammes partiellement prémélangées 21
1.2 Phénoménologie des interactions flamme/turbulence 24
1.2.1 Flammes turbulentes prémélangées 24
1.2.2 Flammes turbulentes non prémélangées 27
1.3 Diagrammes pour la combustion turbulente numérique 28

1.1 Structure des flammes laminaires

Le développement de modèles adaptés aux types de combustion usuellement rencontrés en pratique nécessite de faire la distinction entre flammes prémélangées et flammes non prémélangées. Bien qu'étant pilotées à petite échelle par des phénomènes identiques (chimie, diffusion moléculaire et thermique), ces deux types de flammes possèdent des structures et des propriétés bien distinctes, ce qui rend délicat l'élaboration d'un modèle de combustion "universel".

Les descriptions faites par la suite correspondent à des flammes mettant en jeu la combustion d'hydrocarbures légers dans l'air (méthane, propane essentiellement). Certains résultats ne peuvent donc pas nécessairement être extrapolés à d'autres combustibles.

1.1.1 Les flammes laminaires de prémélange

Observations :

Dans une flamme de prémélange, les réactifs (oxydant et carburant) sont intimement mélangés au niveau moléculaire avant de réagir. Comme on peut le voir sur la figure 1.1, les flammes de prémélange se caractérisent par l'existence d'un front de flamme mince séparant les gaz frais des gaz brûlés. C'est au sein de ce front qu'ont lieu les réations chimiques permettant la transformation des réactifs en produits. Cette flamme peut être caractérisée par son épaisseur notée δ_L^0 (l'indice L se rapporte au cas laminaire, et l'exposant 0 au cas d'une flamme non étirée).

Une flamme prémélangée laminaire peut se diviser en trois zones distinctes suivant l'analyse asymptotique de Zel'dovitch/Frank-Kamenetskii (Williams [228], Peters et Williams [166]). La figure 1.2, présente les distributions spatiales calculées de CH_4 et de température obtenues pour une flamme méthane/air stœchiométrique 1D.

- La première zone peut être caractérisée par une élévation progressive de la température, alors que les termes de production/disparition chimiques restent nuls. C'est la zone de préchauffage dans laquelle, en raison de l'existence de forts gradients favorisant la diffusion thermique et moléculaire, les gaz frais voient leur température s'élever jusqu'à atteindre la température d'inflammation du mélange. L'épaisseur caractéristique δ_l de cette zone est généralement de l'ordre de $0{,}3\delta_L^0$.
- L'oxydant et le carburant réagissent ensuite au sein de la seconde zone : c'est la zone de réaction. Celle-ci est peu épaisse (son épaisseur δ_r est de l'ordre d'un dixième de l'épaisseur totale du front de flamme) et se caractérise par une élévation brutale de la température et de fortes variations des termes sources chimiques des espèces. C'est dans cette région que le carburant est consommé et que les produits majoritaires de combustion sont formés.
- Dans la troisième zone, les réactions principales sont à l'état d'équilibre partiel, et la température n'augmente que très progressivement. Les produits de combustion sont lentement oxydés, et les réactions élémentaires mises en jeu évoluent avec des temps caractéristiques relativement grands. Cette zone est appelée zone d'oxydation, et son épaisseur est notée δ_o.

Dans le cas d'une combustion pauvre à stœchiométrique, on peut s'attendre à ce que le carburant soit entièrement consommé et qu'une certaine proportion d'oxydant résiduel soit retrouvée dans les gaz brûlés. En revanche, en combustion riche, tout le carburant n'a pas réagi ce qui entraîne la présence d'hydrocarbures imbrûlés dans les gaz chauds.

Au fur et à mesure que les réactifs sont consommés, le front de flamme progresse, des gaz frais vers les gaz brûlés. On peut donc définir une vitesse de propagation du front, appelée vitesse de flamme, et notée S_L^0. Cette vitesse est directement reliée à la vitesse de consommation du carburant dans la zone de réaction. Cette grandeur, de même que l'épaisseur de la flamme, dépendent de nombreux paramètres de l'écoulement tels que la richesse, la pression, la nature du carburant, les propriétés physico-chimiques...

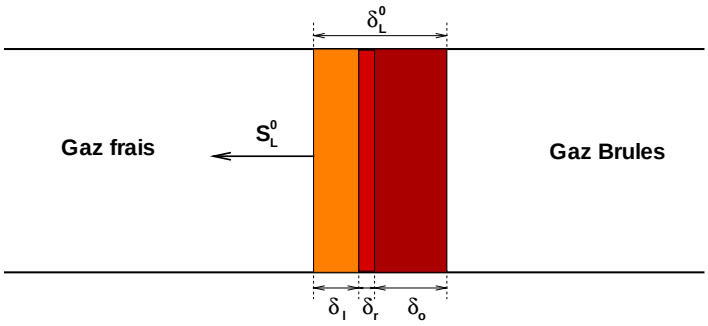

FIG. 1.1 – *Représention schématique d'une flamme laminaire de prémélange.*

Pour une étude plus approfondie de la structure des flammes de prémélange d'hydrocarbures légers, le lecteur peut se référer notamment à [166] ou [199] pour les flammes pauvres à stœchiométriques, et à [197] ou [198] pour les flammes riches.

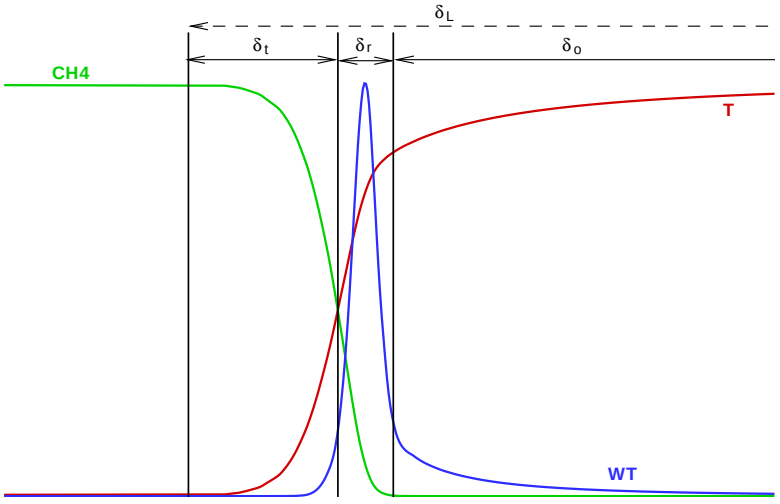

FIG. 1.2 – *Structure interne d'une flamme laminaire prémélangée stœchiométrique méthane/air.*

Equations d'évolution simplifiées et variable d'avancement :

Le problème représentatif de la combustion prémélangée le plus simple consiste en une flamme laminaire 1D librement propagative. Les équations régissant l'évolution d'une telle flamme peuvent être facilement écrites sous l'hypothèse d'écoulement adiabatique et bas Mach (flamme quasi-isobare). En supposant de plus que les propriétés thermophysiques sont indépendantes de l'espèces considérée ($D_i = D$, $c_{p,i} = c_p$...), et que tous les nombres de Lewis sont égaux à 1, l'équation de conservation de la masse se réduit à :

$$\dot{m} = \rho u = \rho_u S_L^0 = cte, \tag{1.1}$$

où ρ_u est la masse volumique des gaz frais (unburnt).

L'hypothèse d'équidiffusivité permet de réécrire les équations de conservation des espèces et de la température sous une forme unique. On choisit ici de se placer dans un réferentiel lié à la flamme, où ξ représente la coordonnée dans la direction normale au front de flamme, orientée vers les gaz frais :

$$\rho \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \rho u \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial \xi}\left(\rho D \frac{\partial \Psi}{\partial \xi}\right) + \rho \dot{\omega}_\Psi, \tag{1.2}$$

où Ψ représente indifféremment les fractions massiques des espèces ou la température et $\dot{\omega}_\Psi$ un terme de production/disparition chimique.

Cette équation met en évidence le fait que la structure interne de la flamme de prémélange peut être décrite par un unique paramètre, appelé variable d'avancement, que l'on notera par la suite c. Plusieurs définitions de cette variable peuvent être proposées [219], [174], avec toutefois la contrainte que c doit varier de façon monotone lorsque l'on progresse des gaz frais vers les gaz brûlés. On peut par exemple écrire [174] :

$$c = \frac{Y_F - Y_F^u}{Y_F^b - Y_F^u} \quad \text{ou} \quad c = \frac{T - T^u}{T^b - T^u}, \tag{1.3}$$

où T est la température et Y_F la fraction massique du carburant. Les indices u et b représentent respectivement les grandeurs prises dans les gaz frais (unburnt) et dans les gaz brûlés (burnt). La variable d'avancement peut être normalisée de telle sorte qu'elle varie entre 0 du côté des gaz frais et 1 du côté des gaz brûlés. De nombreux modèles de combustion dédiés aux flammes prémélangées sont basés sur le transport de cette grandeur.

Vitesses et épaisseurs de flamme :

Lorsque l'on se place dans le contexte de flammes planes librement propagatives, on trouve couramment deux définitions particulières de la vitesse de flamme :

- la vitesse de déplacement de la flamme représente la vitesse à laquelle se propage chaque isosurface de la variable d'avancement relativement à l'écoulement. C'est donc une grandeur locale définie par :

$$\rho S_d = \frac{1}{|\nabla_\xi c|} \frac{Dc}{Dt} = \frac{1}{|\nabla_\xi c|} \left[\rho \dot{\omega}_c + \nabla_\xi \left(\rho D \nabla_\xi c\right)\right], \tag{1.4}$$

  où ∇_ξ représente un gradient suivant la direction normale au front de flamme. Dans le cadre d'une description de la flamme avec chimie détaillée et transport complexe, chaque espèce possède sa propre vitesse de déplacement ;
- la vitesse de consommation est une grandeur globale obtenue par intégration des taux de production de c à travers le front de flamme. Elle est donc unique pour chaque flamme considérée et dépend essentiellement des conditions dans lesquelles se déroule la combustion :

$$\rho_u S_L^0 = -\frac{1}{(c^b - c^u)} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho \dot{\omega}_c d\xi. \tag{1.5}$$

  Si c est normalisée, on a $c^u = 0$ et $c^b = 1$.

La vitesse S_L^0, couramment utilisée pour caractériser chaque flamme, est une valeur propre du système d'équations décrivant l'évolution de ces flammes. De nombreux auteurs ont établi des relations analytiques permettant de la calculer en fonction des données thermophysiques liées à la flamme. On peut citer notamment les travaux de Zel'dovitch/Frank - Kamenetski (ZFK) ou Echekki et Ferziger ([174], [228]).

De façon analogue, différentes définitions peuvent être données pour caractériser l'épaisseur du front de flamme [174]. Les relations établies ici restent toutefois très approchées.

En se plaçant dans le cadre d'une chimie simplifiée, la relation la plus couramment employée est la suivante :

$$\delta_L^0 = \frac{\lambda}{\rho_u c_p S_L^0}. \tag{1.6}$$

Ici, δ_L^0 peut être apparentée à une épaisseur de diffusion. Cette relation sous-estime généralement l'épaisseur réelle de la zone de réaction.

Des relations plus précises peuvent être établies, mais contrairement à (1.6), celles-ci nécessitent la connaissance de l'état après combustion (notamment de la température des gaz brûlés). On trouve par exemple dans [174] une expression de l'épaisseur thermique de la flamme calculée à partir du gradient de température :

$$\delta_L^0 = \frac{T^b - T^u}{\max\left(|\nabla_\xi T|\right)}. \tag{1.7}$$

Cette relation approche l'épaisseur de la flamme d'un facteur proche de 10.

Etirement et courbure :

L'étirement et la courbure du front de flamme sont des notions particulièrement importantes dans le cadre de la modélisation des flammes prémélangées. Suivant Matalon et Matkowsky [137], ces phénomènes peuvent être décrits via le taux de variation d'un élément de surface de flamme noté A_S :

$$K = \frac{1}{A_S}\frac{dA_S}{dt}. \tag{1.8}$$

Par la suite, une définition plus complète a été donnée par Candel et Poinsot [40] et Matalon [136], faisant apparaître explicitement l'étirement a_t et la courbure de la flamme a_c :

$$K = a_t + a_c = \left(\delta_{ij} - n_i n_j\right)\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + S_d\frac{\partial n_i}{\partial x_i}, \tag{1.9}$$

où $\boldsymbol{n}$ représente le vecteur unitaire normal au front de flamme.

Plus récemment, Echekki [65] et De Goey et ten Thije Boonkkamp [101], [102], ont développé une formulation compressible de l'étirement et de la courbure de la flamme. Ces relations ont permis d'établir les équations de conservation 1D décrivant l'évolution de flammes laminaire de prémélange étirées [102].

Généralement, l'étude théorique ou numérique des flammes de prémélange étirées repose sur deux configurations canoniques que sont la flamme à contre courant prémélange/gaz brûlés et la flamme à contre courant prémélange/prémélange. Dans le premier cas, un jet de prémélange froid est opposé à un jet de gaz brûlés chaud, alors que dans le second cas, deux jets d'un même prémélange froid sont opposés. Ces deux configurations ont été utilisées pour caractériser numériquement l'influence de l'étirement sur la structure des flammes (Rogg *et al.* [184], [185], Sung *et al.* [205]).

La figure 1.3, tirée de [184], présente une comparaison des profils du radical H à travers des flammes prémélangées étirées stœchiométriques, pour les deux expériences identifiées précédemment. Sur la configuration prémélange/gaz brûlés, un seul front de flamme se développe et se stabilise au niveau du jet de prémélange. Lorsque le taux d'étirement augmente, le pic de fraction massique de H diminue alors que la valeur de Y_H à l'équilibre reste inchangée. Dans la configuration prémélange/prémélange, deux flammes à contre courant se forment. Lorsque l'on augmente les débits des deux jets, les deux fronts de flamme se rapprochent l'un de l'autre jusqu'à ce qu'ils interagissent. La concentration de H dans les gaz brûlés devient alors hors équilibre.

De nombreux auteurs se sont attachés à décrire l'influence de l'étirement sur la vitesse de propagation de la flamme. Une première approximation, dans la limite des faibles taux d'étirement, conduit à une relation linéaire entre les vitesses de flammes étirées et non étirées (Matalon et Matkowsky [137], Clavin et Williams [46] en utilisant des développements asymptotiques, ou Chung et Law [44] suivant une analyse intégrale) :

$$\frac{S_L}{S_L^0} = 1 - MaKa, \tag{1.10}$$

ou bien :

$$\frac{S_L}{S_L^0} = 1 - \tau_c MaK. \tag{1.11}$$

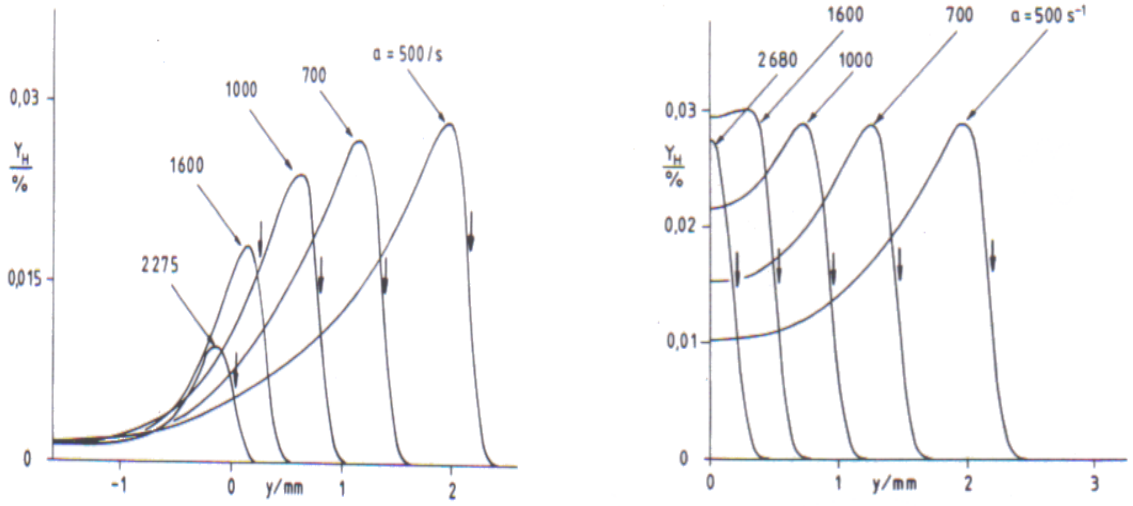

FIG. 1.3 – *Flammes méthane/air stœchiométriques étirées correspondant à différents taux d'étirement. A gauche, configuration prémélange/gaz brûlés, à droite, configuration prémélange/prémélange (Rogg [184]).*

Les nombres sans dimension Ma et Ka représentent respectivement le nombre de Markstein et un nombre de Karlovitz basé sur l'étirement, $Ka = \frac{K\delta_L^0}{S_L^0}$. τ_c est un temps caractéristique chimique de la flamme. Le nombre Ma dépend de nombreux paramètres, notamment du carburant, de la richesse et des conditions thermophysiques (pression, température...).

Différentes théories mathématiques (Clavin et Joulin [45], Bradley *et al.* [25]) ont été élaborées dans le but d'établir les lois de comportement de Ma. D'autres travaux ont également été menés sur le plan expérimental, notamment par Law *et al.* [127].

1.1.2 Structure des flammes non prémélangées

Observations :

Pour une flamme de diffusion, l'oxydant et le carburant sont séparés en des zones parfaitement distinctes avant de réagir. La figure 1.4 représente une vue simplifiée d'une flamme non prémélangée type. Dans ce régime, la combustion est essentiellement pilotée par la diffusion des réactifs l'un dans l'autre. La flamme va se développer à l'interface entre les deux réactifs, à la stœchiométrie. les produits de combustion sont ensuite évacués par diffusion moléculaire de part et d'autre de la zone de réaction. Pour ces raisons, les flammes non prémélangées sont souvent appelées flammes de diffusion.

La flamme de diffusion type, schématisée figures 1.4 et 1.5, met en évidence l'existence de trois zones :

- la première zone, localisée au centre de la flamme, est la zone de réaction. Elle se caractérise par un pic des termes sources chimiques et du dégagement de chaleur : c'est là que se déroulent les réactions chimiques mettant en jeu les réactifs et les produits de combustion principaux. Dans cette zone, le carburant et l'oxydant alimentant la flamme sont mélangés à l'échelle moléculaire avant de réagir ;
- la seconde région, entourant la zone de réaction, est la zone de diffusion des espèces : là, les réactifs présents de chaque coté de la flamme sont mélangés aux produits de combustion évacués par diffusion moléculaire. Dans cette zone, on note une élévation progressive de la température des gaz, provoquée par la diffusion thermique et la dilution des réactants par les gaz brûlés. Sous l'hypothèse d'equidiffusion, la zone de diffusion des espèces et celle de la température sont

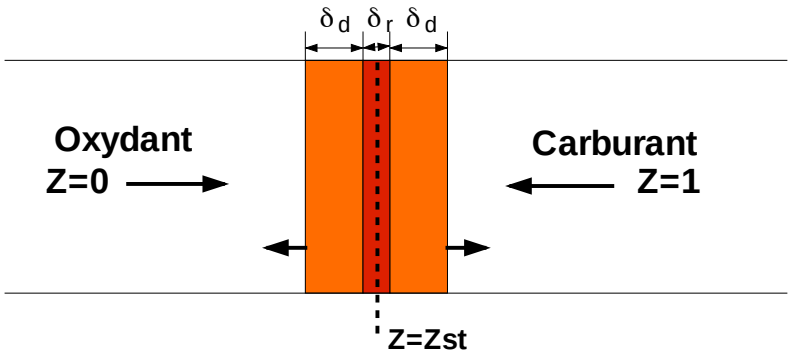

FIG. 1.4 – *Représentation schématique d'une flamme de diffusion laminaire.*

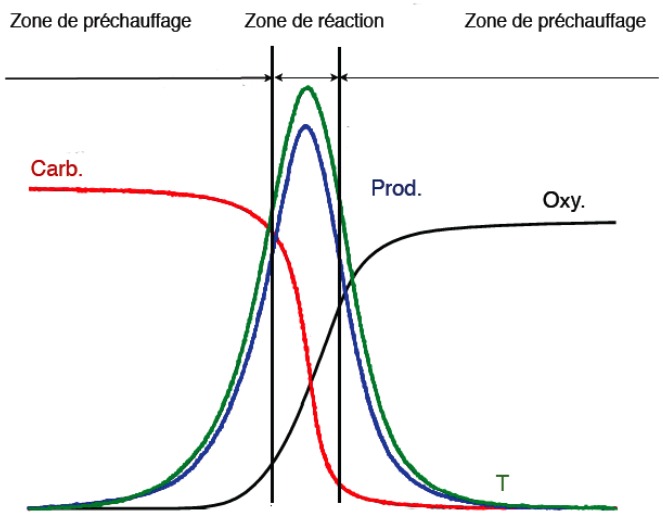

FIG. 1.5 – *Représentation de profils à travers une flamme de diffusion classique.*

superposées et symétriques ;

- pour finir, on trouve de part et d'autre des zones de diffusion les deux écoulements de gaz frais alimentant la flamme en carburant et en oxydant.

Ces observations montrent que les flammes de diffusion résultent de la compétition entre les processus chimiques et la diffusion moléculaire des espèces. La structure de cette flamme est donc contrôlée uniquement par le rapport entre les temps caractéristiques de la chimie et de la diffusion.

Contrairement aux flammes de prémélange, le front de la flamme de diffusion ne se propage pas au sein de l'écoulement mais reste fixé autour de l'iso-surface de mélange stœchiométrique. De plus, ces flammes ne sont généralement pas auto-entretenues comme peuvent l'être les flammes de prémélange : pour entretenir la combustion, il faut que soit assuré l'apport continu en oxydant et en carburant.

Paramètres décrivant la structure de la flamme :

Les flammes de diffusion sont généralement décrites par l'intermédiaire d'un traceur de mélange noté z. Dans le cas d'une chimie simple, typiquement décrite par une réaction chimique unique et irréversible, la fraction de mélange peut être construite simplement comme [228] :

$$s_\varphi = Y_F - \frac{Y_O}{s} = Y_F + \frac{Y_P}{1+s}. \tag{1.12}$$

L'indice O correspond à l'oxydant, F au carburant et P aux produits de combustion. s est le rapport stœchiométrique défini par $s = \frac{\nu_O M_O}{\nu_F M_F}$. La variable de Schwab-Zel'dovitch, s_φ, est généralement réduite

de manière à ce que z varie entre 0 et 1 [219] :

$$z = \frac{\varphi \frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{1 + \varphi}, \tag{1.13}$$

où φ est une richesse globale définie à partir des fractions massiques de l'oxydant et du carburant pris dans les zones d'alimentation : $\varphi = \frac{sY_{F,0}}{Y_{O,0}}$.

Plus généralement, z peut être défini comme une combinaison linéaire des fractions massiques des réactifs et des produits. Dans le cas d'une chimie complexe, on utilise les fractions atomiques des éléments impliqués, soit, en général, H, O, C et N (voir par exemple Bilger *et al.* [14]).

Le scalaire z se révèle être un bon traceur pour localiser la flamme de diffusion sachant que la zone de réaction se développe à la stœchiométrie, c'est-à-dire autour de l'iso-surface $z = z_{st}$.

La flamme à contre courant, représentée figure 1.6, permet de mettre en valeur le rôle joué par l'étirement dans la détermination de la structure de la flamme de diffusion. Le fait de modifier le débit des réactifs, et donc la vitesse des jets, permet de contrôler l'étirement que subit la flamme. La position de l'iso-surface de fraction de mélange stœchiométrique varie en fonction du taux d'étirement. La structure globale de la flamme de diffusion est donc étroitement liée à l'étirement induit par l'aérodynamique des écoulements de gaz frais initiaux.

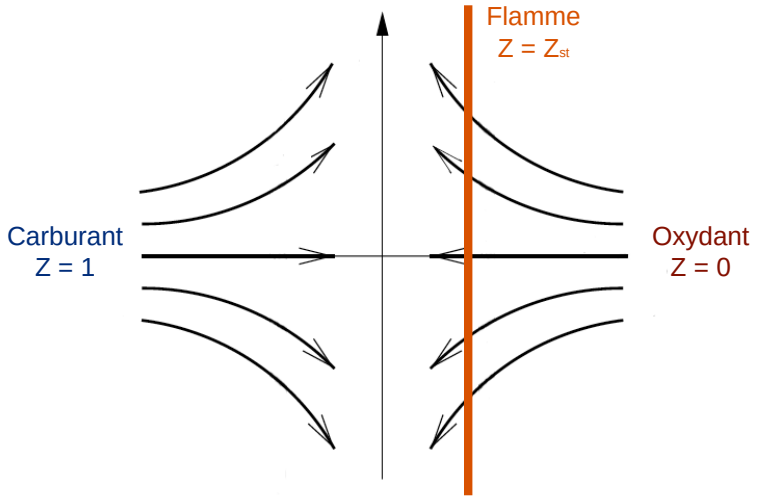

FIG. 1.6 – *Représentation schématique d'une flamme de diffusion à contre courant.*

En général, à la place de l'étirement, on utilise le taux de dissipation scalaire de z, noté χ, pour caractériser la structure de la flamme (on peut montrer que l'étirement moyen et le taux de dissipation de z sont reliés via une relation linéaire faisant intervenir une fonction de la fraction de mélange [188]). χ est défini par :

$$\chi = D \left| \frac{\partial z}{\partial x} \right|^2. \tag{1.14}$$

Cette grandeur permet de quantifier les flux de diffusion de masse à travers les iso-surfaces de z.

Il résulte de ces observations que la structure d'une flamme de diffusion peut être caractérisée par seulement deux grandeurs indépendantes : la fraction de mélange et son taux de dissipation.

Equations des flammes de diffusion laminaires élémentaires :

L'équation de transport monodimensionnelle du traceur de mélange z peut s'écrire :

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u z}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x}\right). \tag{1.15}$$

Aucun terme source n'apparaît dans cette équation, c'est la raison pour laquelle z est parfois appelé scalaire passif. Pour obtenir cette relation, on fait l'hypothèse que les coefficients de diffusion sont indépendants de l'espèce considérée ($D_i = D$).

Le taux de dissipation de z est par ailleurs couramment évalué suivant une relation algébrique [164].

Ces deux grandeurs peuvent être reliées à la structure interne de la flamme de diffusion en réécrivant les équations de conservation des espèces dans un nouveau repère orthonormé (Williams [228]) définit par z et $z_\perp$; $z_\perp$ est la coordonnée perpendiculaire aux iso-surfaces de z. On obtient alors (voir Peters [164] ou Williams [228]) :

$$\rho\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho u_{z_\perp}\frac{\partial Y_i}{\partial z_\perp} = \rho\chi\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial z_\perp}\left(\rho D\frac{\partial Y_i}{\partial z_\perp}\right) - \rho D\frac{\partial}{\partial z_\perp}\left(\log\left|\frac{\partial z}{\partial x}\right|\right)\frac{\partial Y_i}{\partial z_\perp} + \dot{\omega}_i. \tag{1.16}$$

On se place maintenant dans le cadre de flammes peu plissées, ce qui revient à supposer que les iso-surfaces de z restent parallèles. Les gradients dans la direction perpendiculaire aux iso-z deviennent donc négligeables devant les gradients suivant z, soit :

$$\rho\frac{\partial Y_i}{\partial t} = \rho\chi\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} + \dot{\omega}_i. \tag{1.17}$$

Pour un écoulement stationnaire, la relation précédente se réduit à :

$$\dot{\omega}_i = -\rho\chi\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2}. \tag{1.18}$$

Cette relation est un résultat bien connu des flammes laminaires de diffusion. Elle traduit de façon formelle le fait que la structure de la flamme peut être décrite à partir de seulement deux paramètres : z et χ. Le modèle de combustion turbulente SLFM ("Steady Laminar Flamelet Model", [160]) est basé sur la construction de tables chimiques à partir de la résolution de cette équation, pour différentes valeurs de z et de χ.

Sous les hypothèses introduites classiquement pour une chimie simplifiée, il est possible de caracteriser la structure d'une flamme de diffusion à l'aide uniquement de z et de χ, en résolvant analytiquement les équations des flammelettes de diffusion. Burke et Schuman proposent par exemple une solution simple donnant accès à la structure complète de la flamme à partir d'une distribution de fraction de mélange imposée [228]. Ces résultats restent cependant très approchés, et l'utilisation de codes dédiés est nécessaire pour une modélisation précise de ces flammes.

1.1.3 Structure des flammes partiellement prémélangées

La structure des flammes laminaires parfaitement prémélangées et non prémélangées est bien connue. Cependant, il est très rare que ces régimes interviennent directement et de façon indépendante dans les configurations industrielles. En général, les réactifs ne sont jamais injectés sous la forme d'un prémélange parfait. Le mélange s'établit ainsi de façon progressive et conduit à la présence d'inhomogénéités au sein de l'écoulement.

Il est donc inapproprié de vouloir reproduire ce type de combustion (qui plus est dans des configurations industrielles) à l'aide de modèles dédiés au prémélange ou à la diffusion. Des méthodes spécifiques doivent être employées, combinant les propriétés requises par ces deux principaux régimes.

La modélisation des flammes partiellement prémélangées reste un enjeu essentiel pour la simulation de configurations industrielles. Pour cette raison, de nombreux auteurs se sont intéressés ces dernières années à la caractérisation de la structure des flammes partiellement prémélangées et au développement de modèles de combustion dédiés.

Description et définition d'une flamme partiellement prémélangée :

Deux types de flammes partiellement prémélangées peuvent être rencontrés (Rullaud [188]) :

- les flammes où les réactifs sont progressivement mélangés aux gaz brûlés avant de réagir (flammes stabilisées par recirculation, flammes riches),
- les flammes où les réactifs sont mélangés avant de réagir, mais avec des variations locales de richesse (flammes stratifiées).

Les figures 1.7 à 1.9 présentent différentes configurations pour lesquelles des flammes partiellement prémélangées sont observées. Dans le cas de la flamme de prémélange riche stabilisée sur un brûleur, les d'hydrocarbures imbrûlés présents dans les gaz chauds peuvent réagir avec l'air ambiant. Une flamme de diffusion peut alors être observée derrière la flamme principale, comme le montre la figure 1.7.

La figure 1.8 correspond au cas d'une flamme se développant au sein d'une couche de mélange. On peut identifier ainsi trois zones distinctes : un écoulement homogène riche (au dessus), un écoulement homogène pauvre (au dessous) et la zone centrale au sein de laquelle le mélange s'effectue. Dans cette région, une flamme triple est observée, possédant une branche prémélangée pauvre et une branche prémélangée riche entourant une flamme de diffusion.

Le dernier cas, figure 1.9, présente l'allumage d'un mélange hydrogène/air hétérogène. Les noyaux de combustion se développent préférentiellement autour des régions à la stœchiométrie. La qualité du mélange et la distribution de richesse dans le domaine a donc un impact important sur l'allumage et sur la propagation des portions de flammes allumées.

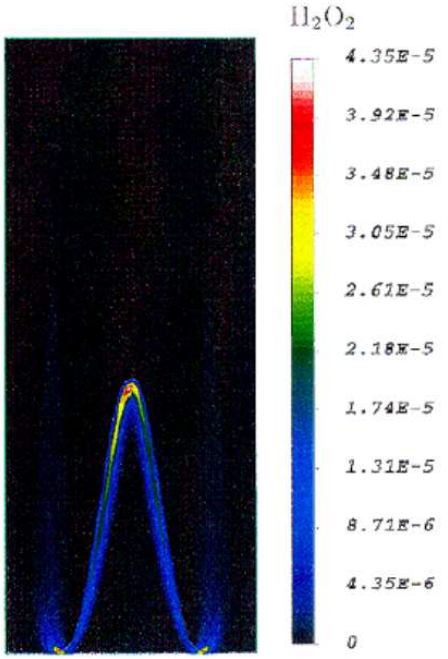

FIG. 1.7 – *Flamme laminaire prémélangée riche stabilisée sur un brûleur [70].*

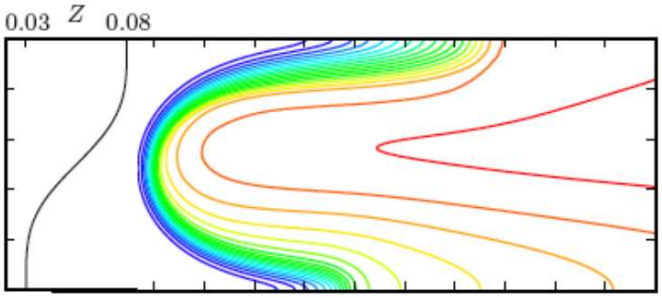

FIG. 1.8 – *Simulation numérique d'une flamme triple formée par une écoulement initial présentant un gradient de fraction de mélange [155].*

Les flammes partiellement prémélangées sont généralement décrites à l'aide des mêmes outils que les deux régimes de combustion principaux. Dans ce type de flamme, on note l'existence de variations locales de richesse, ce qui nous pousse à utiliser une fraction de mélange z comme pour les flammes de diffusion (dans les flammes parfaitement prémélangées, on peut supposer que z reste constant à la traversée du front de flamme). On peut définir également, et de façon analogue aux flammes de prémélange, une variable notée c permettant de repérer l'état d'avancement des réactions chimiques dans la flamme. Rullaud [188] montre que le rôle de cette variable d'avancement sur la structure du

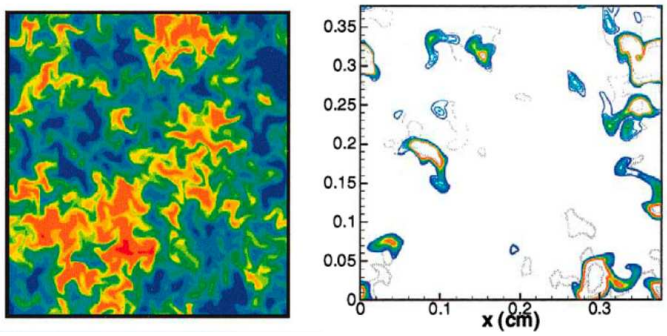

FIG. 1.9 – *Allumage d'un mélange hydrogène/air hétérogène (à gauche, distribution de fraction de mélange au sein du domaine, à droite, iso-contours de fractions massiques de H).*

front de flamme est aussi important pour les flammes partiellement prémélangées que pour les flammes parfaitement prémélangées.

On peut donc conclure que l'utilisation de deux paramètres est nécessaire pour une représentation appropriée de la structure de ces flammes : une fraction de mélange et une variable d'avancement.

Les flammes triples :

Pour appréhender les phénomènes impliqués lors de la combustion partiellement prémélangée, il est courant d'étudier le cas canonique de la flamme triple. Ce type de flamme a déjà fait l'objet de nombreuses recherches expérimentales (Kioni *et al.* [118], Muniz et Mungal [147]) et numériques (Ghosal et Vervisch [88], Dold [55]). Mis à part leur rôle dans la compréhension des flammes partiellement prémélangées, les flammes triples tiennent également une place prépondérante dans certains mécanismes tels que l'allumage de mélanges non uniformes (Réveillon *et al.* [189]) ou la stabilisation de flammes jets.

Les flammes triples se forment en présence d'un gradient de concentration de carburant. Expérimentalement, ces flammes sont créées à l'intérieur de couches de mélange. La figure 1.10 permet de visualiser l'allure de flammes triples obtenues expérimentalement pour différents gradients de concentration de carburant par Kim *et al.* [117].

Le schéma 1.11 représente schématiquement la structure caractéristique à trois branches d'une flamme triple. Dans la zone pauvre en carburant, $z < z_{st}$, une flamme de prémélange pauvre se développe, caractérisée par un excès en comburant. Lorsque z devient inférieur à la limite pauvre d'inflammabilité, la flamme s'éteint. A l'inverse, dans la zone riche $z > z_{st}$, une flamme de prémélange riche se développe, caractérisée par un excès en carburant et donc par la présence, dans les gaz chauds, d'imbrûlés en quantités importantes. Au delà de la limite riche d'inflammabilité, la flamme s'éteint également. Pour finir, une flamme de diffusion se développe le long de l'iso-surface stœchiométrique $z = z_{st}$. Cette flamme permet la consommation des imbrûlés issus de la branche riche et de l'oxydant issu de la branche pauvre. Le point de concours des trois branches est appelé point triple.

Etant donné que les réactants sont dans un premier temps consommés dans des conditions prémélangées, la flamme triple se propage en direction des gaz frais, comme le ferait une flamme de prémélange plane. Sachant que la vitesse caractéristique d'une flamme laminaire est maximale au voisinage de la stœchiométrie, la flamme triple se propage donc préférentiellement le long de l'iso-surface $z = z_{st}$, alors que les deux branches prémélangées se propagent à des vitesses inférieures. Cette propriété confère à la flamme sa forme caractéristique.

L'élaboration de théories mathématiques permettant notamment de déterminer la vitesse de propagation de la flamme, est particulièrement difficile [88]. En général, ces flammes sont caractérisées par la vitesse de propagation au niveau du point triple. Différentes études expérimentales ont contribué

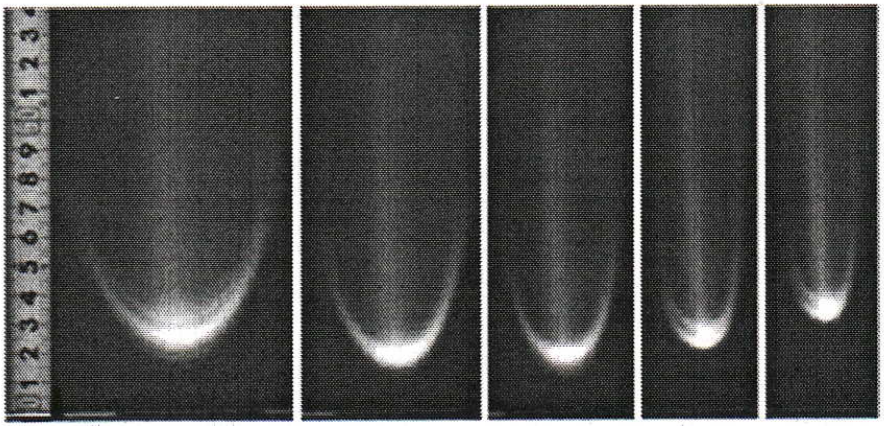

FIG. 1.10 – *Visualisation de flammes triples obtenues expérimentalement pour différents gradients de concentration de carburant [117].*

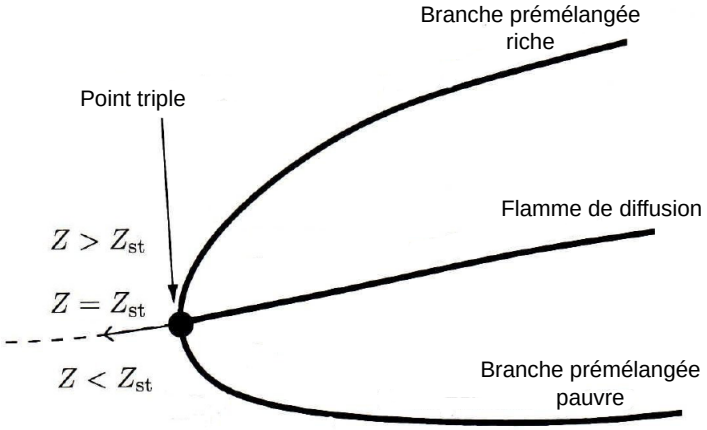

FIG. 1.11 – *Représentation schématique de la structure d'une flamme triple 2D.*

à relier celle-ci à différents paramètres, notamment au gradient de concentration (Muniz et Mungal [147]).

1.2 Phénoménologie des interactions flamme/turbulence

1.2.1 Flammes turbulentes prémélangées

Le but de la section qui suit est de discuter de l'influence de la turbulence sur la structure des flammes de prémélange. De nombreux auteurs se sont intéressés au sujet, notamment Borghi [19], Borghi et Destriau [20] ou Peters [162]. Les travaux les plus récents utilisent la DNS pour étudier en détail ces interactions (Poinsot *et al.* [175], Poinsot et Veynante [174]).

L'influence de la turbulence sur la chimie (et réciproquement) est contrôlée par les temps caractéristiques de ces deux phénomènes. Un temps caractéristique chimique est défini généralement en fonction de la vitesse et de l'épaisseur de flamme laminaire :

$$\tau_c = \frac{\delta_L^0}{S_L^0}. \tag{1.19}$$

Un temps turbulent caractéristique peut être défini comme le rapport entre une échelle de longueur de la turbulence et la fluctuation de vitesse associée. Cette dernière est souvent reliée à la dissipation

turbulente ϵ dans la zone inertielle de la cascade de Kolmogorov suivant. Ainsi, pour une échelle r donnée, on a :

$$\epsilon = \frac{u'(r)^3}{r}. \tag{1.20}$$

Différents temps caractéristiques de la turbulence peuvent ainsi être obtenus en fonction de l'échelle des tourbillons considérée. Par exemple, suivant l'échelle de Kolmogorov η représentant la taille des plus petits tourbillons, il vient :

$$\tau_{t,\eta} = \frac{\eta}{u'_\eta}. \tag{1.21}$$

Si l'on considère maintenant les plus grandes structures de l'écoulements décrites par l'échelle intégrale l_t, on trouve :

$$\tau_{t,l} = \frac{l_t}{u'_l}. \tag{1.22}$$

Les rapports entre ces différents temps définissent des nombres sans dimension permettant de caractériser les différents régimes de combustion turbulente. Le nombre de Damköhler est défini comme le rapport entre le temps lié à l'échelle intégrale de la turbulence et le temps chimique, alors que le nombre de Karlovitz est égal au rapport entre le temps chimique et le temps lié à l'échelle de Kolmogorov.

$$Da = \frac{\tau_{t,l}}{\tau_c}, \tag{1.23}$$

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_{t,\eta}}. \tag{1.24}$$

Le nombre de Reynolds turbulent $Re_t = \frac{u' l_t}{\nu}$ peut alors être réécrit en fonction de ces deux nombres adimensionnels :

$$Re_t = Da^2 Ka^2. \tag{1.25}$$

Suivant les valeurs prises par Da et Ka, il est possible d'identifier différents régimes de combustion. Ces régimes peuvent ensuite être classés au sein d'un diagramme en fonction des rapports des échelles de longueur et de vitesse, ou en fonction des nombres de Damkhöler et de Karlovitz (Borghi [19], Peters [162]). La figure 1.12 présente par exemple un diagramme de combustion turbulente proposé par Peters [163]. On retrouve en abscisse le rapport des longueurs l_t/δ_L^0, et en ordonnée le rapport des vitesses u'_l/S_L^0.

La figure 1.12 permet de distinguer quatre principaux régimes pour la combustion prémélangée :

- le premier régime correspond à un nombre de Karlovitz inférieur à 1 et à un nombre de Damköhler supérieur à 1. C'est le régime des flammelettes ou régime des flammes minces. Les plus petites structures de la turbulence sont ici trop grandes pour pouvoir pénétrer le front de flamme et sont donc incapables de modifier sa structure interne. Suivant la valeur du rapport des vitesses u'/S_L, deux régions peuvent être distinguées :
  - pour $u'/S_L^0 < 1$, la turbulence n'a d'effet que sur la structure externe de la flamme en la plissant (c'est le régime des flammelettes plissées),
  - pour $u'/S_L^0 > 1$, l'intensité de la turbulence plisse très fortement le front de flamme, ce qui peut conduire à la formation de poches (c'est le régime des flammelettes avec poches) ;
- le second régime est défini par un Karlovitz supérieur à 1, et un Damköhler lui aussi supérieur à 1 (ou faiblement inférieur à 1). On se situe alors dans le domaine des flammes épaissies. Dans cette région, les plus petits tourbillons possèdent une taille caractéristique inférieure à l'épaisseur de flamme, ce qui leur permet de pénétrer la zone de préchauffage (mais pas la zone de réaction). La structure interne de la flamme est modifiée car les petits tourbillons épaississent la flamme en accroissant la diffusion thermique et moléculaire. A noter que pour des nombres de Karlovitz supérieurs à 1, des zones d'extinction locales peuvent également être observées.

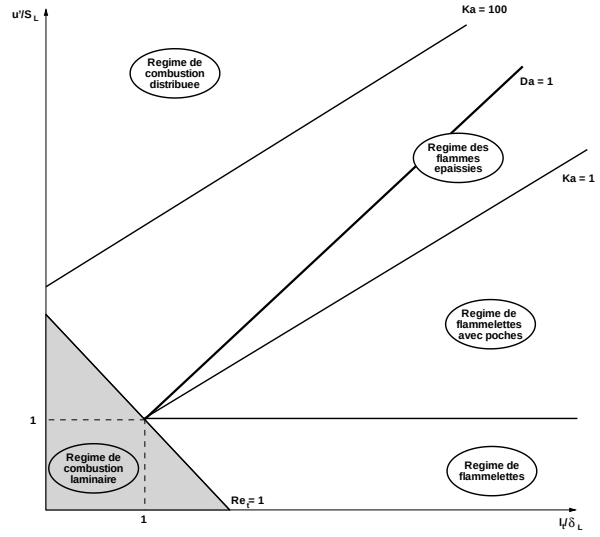

FIG. 1.12 – *Diagramme de combustion turbulente prémélangée (Peters [163]).*

Peters [163] introduit une limite en $Ka = 100$, délimitant la région où les plus petits tourbillons de l'écoulement deviennent plus petits que l'épaisseur de la zone de réaction (supposée être 10 fois plus petite que l'épaisseur de flamme). Cette ligne représente la limite supérieure du régime des flammes épaissies ;

- le dernier régime est caractérisé par un Karlovitz supérieur à 100, et un nombre de Damköhler très inférieur à 1. C'est le régime de combustion distribuée. Dans ce cas, les plus petites structures turbulentes ont une taille inférieure à l'épaisseur de la zone de réaction et sont donc capables d'altérer profondément celle-ci. La chimie est fortement perturbée par la turbulence, et on ne peut plus réellement distinguer de front de flamme. Le mélange turbulent est très rapide comparé aux mécanismes chimiques, c'est pourquoi on parle souvent de réacteur parfaitement mélangé.

La limite correspondant à $Ka = 1$, appelée critère de Klimov - Williams, définit la transition entre le régime des flammelettes et le régime des flammes épaissies. Différents travaux ont été proposés dans le but de caractériser plus précisément la position de cette transition (Poinsot *et al.* [175, 140], Abdel-Gayed et Bradley [5]). Il est apparu en particulier que le régime des flammelettes peut se prolonger au delà de cette limite. Ceci est principalement dû au fait que le critère de Klimov - Williams suppose que les tourbillons à l'échelle de Kolmogorov sont capables d'altérer la flamme turbulente. Or, ceux-ci ont une durée de vie généralement trop courte pour affecter efficacement la flamme. En fait, l'échelle caractéristique des plus petits tourbillons pouvant altérer la flamme, l'échelle de Gibbs, peut être évaluée suivant [162] :

$$l_G \approx \frac{\left(S_L^0\right)^3}{\epsilon}, \tag{1.26}$$

où ϵ représente le taux de dissipation de la turbulence dans la zone inertielle.

Récemment, la DNS s'est révélée être un outil particulièrement efficace pour l'étude des interactions flamme/turbulence (pour une revue complète, voir Hilbert *et al.* [109] ou Poinsot *et al.* [172]). Ces travaux ont notamment permis le développement de diagrammes de combustion avancés. Sur la figure 1.13, la ligne en pointillés correspond à la limite d'influence des tourbillons sur la flamme. La limite de quenching, séparant le régime des flammelettes du régime des flammes épaissies, est beaucoup plus haute que ce que prédit le critère de Klimov - Williams.

La turbulence, à travers ces différentes interactions avec le front de flamme, modifie l'épaisseur et la vitesse de propagation de la flamme. L'influence de la turbulence sur ces paramètres est très complexe et difficilement représentable analytiquement. Des corrélations existent cependant reliant par exemple

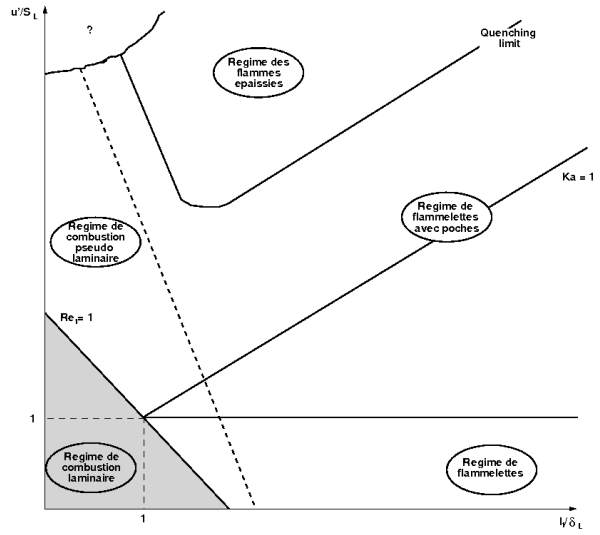

FIG. 1.13 – *Diagramme de combustion turbulente prémélangée étendu, construit à partir de résultats de calculs DNS d'interactions flamme/tourbillon (Poinsot et Veynante [174]).*

la vitesse de flamme turbulente à la vitesse de flamme laminaire (Abdel-Gayed *et al.* [4]) :

$$\frac{S_t}{S_L^0} = 1 + \frac{u'}{S_L^0}. \tag{1.27}$$

Une grande part d'empirisme subsiste toutefois dans ce type de modèle.

1.2.2 Flammes turbulentes non prémélangées

De manière similaire, pour les flammes de diffusion, il est possible d'identifier différents régimes de combustion distincts en comparant les échelles caractéristiques des flammes (longueur et temps) à celles de la turbulence. Lorsque l'on s'intéresse à de telles flammes, la définition formelle de ces échelles présente certaines difficultés. En effet, contrairement au cas prémélangé, le front de flamme ne se propage pas ce qui rend impossible la définition d'une vitesse de propagation. De plus, l'épaisseur de la zone de réaction dépend fortement des conditions de l'écoulement. Ainsi, les échelles de la flamme non prémélangée sont souvent liées aux phénomènes diffusifs, notamment via le taux de dissipation scalaire de z à la stœchiométrie. Un temps caractéristique peut, par exemple, être obtenu suivant :

$$\tau_f = \frac{1}{\chi_{st}}. \tag{1.28}$$

L'indice f fait référence à un temps caractéristique de la flamme. Si cela s'avère nécessaire, un temps chimique τ_c peut être obtenu dans le cadre d'une chimie globale, à partir de développements asymptotiques des taux de réactions [174].

Cuenot et Poinsot [53] se basent sur des résultats de calculs DNS pour tracer un diagramme représentant les différents régimes de combustion non prémélangée pouvant être rencontrés en pratique. Une représentation simplifiée de ce diagramme, tracé en fonction du nombre de Damköhler de la flamme et du Reynolds turbulent, est schématisée sur la figure 1.14. On y distingue quatre domaines séparés par trois courbes correspondant à des Damköhler diffusifs constants : la limite d'extinction est représentée par la droite $Da = Da^{ext}$ et la limite du régime de flammelettes par la droite $Da = Da^{LFA}$ (LFA pour "Laminar Flamelet Assumption").

- Le premier domaine correspond à des valeurs du nombre de Reynolds turbulent inférieures à 1. Dans cette zone, l'écoulement reste laminaire (les flammes possèdent donc une structure laminaire).
- Le second domaine est défini par $Re_t > 1$ et $Da > Da^{LFA}$. Dans cette zone, l'hypothèse de flammelettes laminaires est vérifiée. Ainsi, la zone de réaction de la flamme est considérée comme mince et le temps caractéristique de la chimie est négligeable devant les échelles de temps de la turbulence. On peut alors considérer la flamme turbulente comme étant constituée d'une collection de flammelettes, ce qui confère localement à la flamme turbulente les mêmes proprietés qu'une flamme laminaire.
- La troisième zone est définie pour des nombres de Damköhler compris entre Da^{LFA} et Da^{ext}. Les temps caractéristiques de la chimie ne sont plus négligeables devant les temps de la turbulence. Des effets liés à l'instationnarité de l'écoulement peuvent alors apparaître, modifiant le comportement de la flamme. L'hypothèse de flammelettes n'est donc plus valide.
- Dans la dernière région, délimitée par $Da < Da^{ext}$, des extinctions locales (ou quenching) peuvent être observées le long de la flamme. Lorsque le nombre de Damköhler est encore augmenté, c'est toute la flamme qui s'éteint. De fortes instabilités de combustion peuvent être observées dans ce régime.

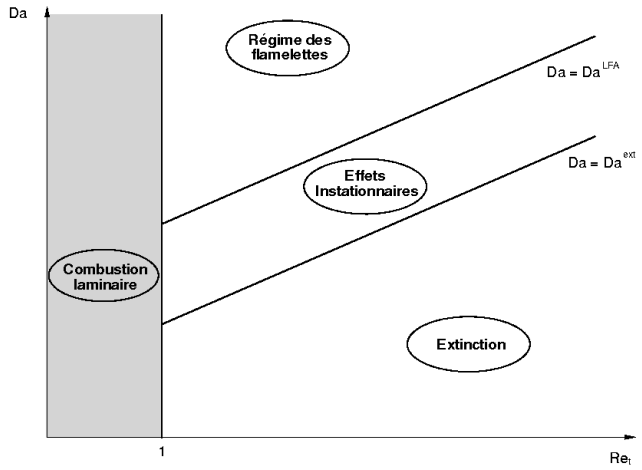

FIG. 1.14 – *Représentation schématique des différents régimes de combustion turbulente non prémélangée (Poinsot et Veynantes [174]).*

Ce diagramme permet de se représenter de façon schématique les différents régimes rencontrés en combustion turbulente non prémélangée. Cependant, de telles flammes sont très dépendantes des conditions de l'écoulement externe (richesse, débit, pression...) et le diagramme présenté ne permet pas de définir de manière quantitative les différents régimes rencontrés. En particulier les bornes de ceux-ci sont susceptibles de varier fortement suivant le point de fonctionnement de la flamme.

1.3 Diagrammes pour la combustion turbulente numérique

Lors du développement d'un nouveau modèle de combustion turbulente, il peut être intéressant de situer celui-ci par rapport aux modèles existants ainsi que par rapport aux différents régimes de combustion. Cette classification permet de mettre en évidence les avantages et les inconvénients du modèle, ainsi que sa plage de validité. Différents diagrammes ont ainsi été établis dans ce but, dont celui de Pitsch et Duchamp de Lageneste [170] (voir figure 1.15).

Ce diagramme est construit dans un repère $\left(Ka = \left(\delta_L^0/\eta\right)^2 ; \Delta/\delta_L^0\right)$ où l'abscisse représente une

évolution dans le domaine physique et l'ordonnée une évolution dans le domaine numérique. Il a été développé spécifiquement pour une identification rapide du domaine de validité d'un modèle de combustion turbulente pour la LES ou la DNS. Les différentes régions sont séparées par des lignes représentant certaines valeurs particulières des nombres sans dimension définis ci-dessous :

$$Ka_\delta = \left(\frac{\delta_r}{\eta}\right)^2 \quad \text{et} \quad Re_\Delta = \frac{u'_\Delta \Delta}{S_L^0 \delta_L^0}, \tag{1.29}$$

où η est l'échelle de Kolmogorov, u'_Δ représente les fluctuations de vitesse à l'échelle de la maille Δ et δ_r est l'épaisseur de la zone de réaction.

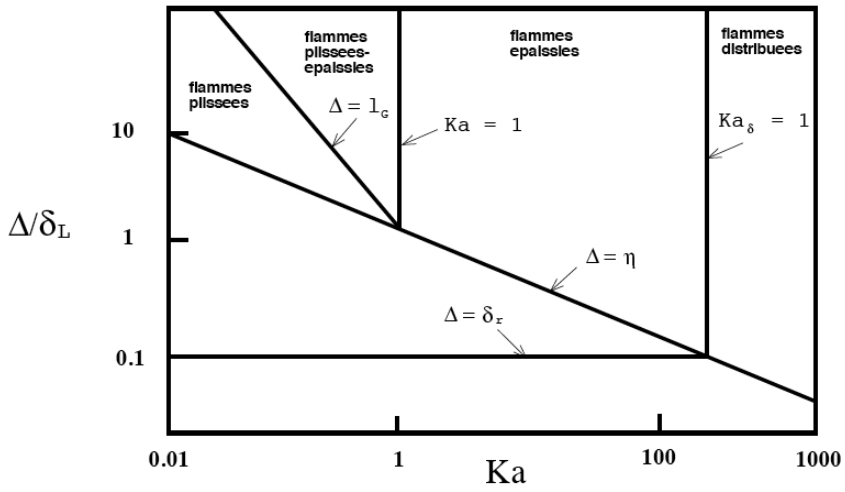

FIG. 1.15 – *Diagramme de combustion de Pitsch et Duchamp de Lageneste [170].*

Plus récemment, Dusing *et al.* [63] ont proposé une généralisation de ce diagramme. Pour cela, ils ont d'abord défini un diagramme tridimensionnel, puis ils en ont extrait le plan $\left(\Delta/\delta_L^0\right) - (Ka)$ (voir figure 1.16). Le domaine qu'il couvre est plus étendu que celui de Pitsch et Duchamp de Lageneste puisqu'il englobe également les flammes laminaires ainsi qu'une région RANS. L'abscisse Ka correspond à la dimension physique, les lignes verticales délimitent donc les régimes de combustion tels qu'ils ont été définis par Borghi [19]. En ordonnées, on retrouve l'influence de la taille de maille sur les simulations.

Quatre domaines peuvent être identifiés :

- le domaine des flammes laminaires : lorsque la flamme est résolue, le taux de réaction turbulent issu du modèle doit tendre vers le taux de réaction laminaire. Lorsque la flamme est sous résolue, le modèle de combustion doit permettre de retrouver la vitesse de propagation correcte du front ;
- le domaine RANS : ici la flamme est complètement sous résolue et le modèle de combustion turbulente doit tenir compte du fait que le taux de réaction est moyenné ;
- le domaine LES : la flamme peut être complètement sous résolue (dans le régime des flammelettes) ou partiellement résolue, suivant la taille du filtre LES. Le modèle de combustion turbulente tient directement compte de l'échelle de la maille pour déterminer les taux de réaction filtrés. Deux effets doivent alors être pris en compte : la sous résolution de la flamme et le plissement de sous maille ;
- le domaine DNS : la flamme turbulente est quasiment toujours résolue, il n'y a donc, la plupart du temps, pas besoin d'un modèle de combustion turbulente pour fermer les termes sources chimiques.

En fonction des caractéristiques décrites ci-dessus, les modèles de combustion turbulente adaptés à la LES ou au RANS doivent répondre à des contraintes différentes. Par exemple, les modèles

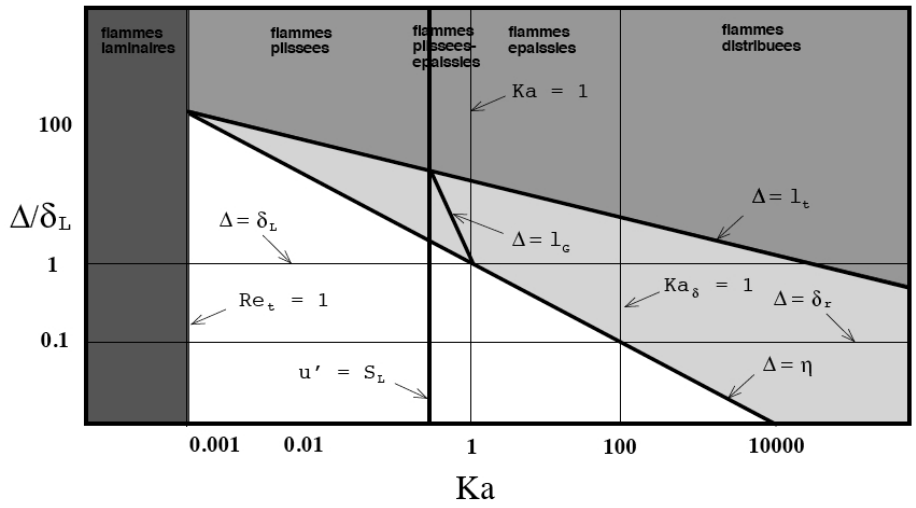

FIG. 1.16 – *Diagramme de combustion de Dusing et al. [63]. Les zones sont grisées en fonction du type de simulation considéré. Du plus foncé au plus clair : laminaire, RANS, LES, DNS.*

LES doivent explicitement tenir compte de la taille de coupure du filtre pour déterminer le niveau de résolution de la flamme. Les modèles de combustion RANS et LES doivent donc posséder des caractéristiques qui leurs sont propres, bien que des modèles similaires puissent être employés pour les deux approches.

Chapitre 2

Méthode de tabulation de flammes laminaires prémélangées

Sommaire

2.1 Contexte et orientation de l'étude 32
2.2 Etat de l'art sur les méthodes de réduction des schémas cinétiques 32
2.2.1 Réduction systématique des schémas réactionnels 32
2.2.2 Algorithmes génétiques 34
2.2.3 Méthode de réduction CSP 34
2.2.4 Méthode de réduction de type ILDM 35
2.2.5 Méthode ISAT 38
2.2.6 Modèles FPI et FGM 38
2.3 Génération de tables FPI 40
2.3.1 Choix des variables du problème 40
2.3.2 Code de calcul pour flammes laminaires prémélangées libres 42
2.3.3 Interfaçage de PREMIX et génération d'une table 45
2.4 Couplage des tables avec le code CEDRE 46
2.4.1 Présentation du code CEDRE 46
2.4.2 Stratégie de couplage 50
2.4.3 Thermodynamique et coefficients de transport 52
2.4.4 Choix des espèces transportées 53
2.4.5 Cohérence des taux de réaction tabulés 55
2.4.6 Correction des termes sources interpolés 59
2.4.7 Résumé de la méthode de couplage CEDRE/FPI 64
2.5 Validation : flammes laminaires prémélangées libres 64
2.5.1 Conditions de calcul 64
2.5.2 Résultats 65
2.5.3 Conclusion 71

2.1 Contexte et orientation de l'étude

Les applications traitées dans ce mémoire concernent uniquement les flammes parfaitement et partiellement prémélangées se développant au sein de chambre de combustion de type aéronautiques. Les modèles introduits ici sont donc dédiés uniquement à ce type d'écoulements.

Une modélisation fine de la formation des polluants (CO_2, CO ou NO) au sein de flammes complexes nécessite en premier lieu l'utilisation d'un mécanisme réactionnel chimique détaillé. En général, les schémas cinétiques préconisés pour la caractérisation de la formation de tels éléments comportent plusieurs dizaines voire plusieurs centaines d'espèces chimiques. En toute rigueur, l'utilisation directe de tels mécanismes au sein de calculs de CFD nécessiterait la résolution d'une équation de transport par espèce, ce qui demeure inaccessible avec les moyens de calcul actuels. Ceci montre la nécessité de développer des méthodes de réduction de schémas cinétiques.

Les mécanismes globaux, utilisés couramment lors de la simulation d'écoulements turbulents réactifs dans un cadre industriel, ne sont pas adaptés à la modélisation d'espèces polluantes minoritaires. En revanche, les méthodes automatiques de réduction de schémas (comme ILDM), permettent de tenir compte des processus chimiques entrant en jeu lors de la formation des polluants. Toutefois, certaines difficultés, notamment à basse température, limitent leur utilisation dans le cadre d'écoulements de type industriels. Pour surmonter ces obstacles, des modèles de réduction basés sur des calculs de flammes laminaires élémentaires avec chimie complexe ont été proposés récemment par Gicquel *et al.* [90] (FPI, "Flame Prolongation of ILDM") et Van Oijen *et al.* [157] (FGM, "Flame Generated Manifold"). Ceux-ci conduisent à la construction de tables dans lesquelles les grandeurs chimiques sont regroupées en fonction d'un nombre réduit de paramètres.

Les potentialités de ce type de modèle, notamment en terme de prise en compte de la chimie complexe, nous ont conduit à nous intéresser plus particulièrement à l'approche FPI (le modèle FGM étant très similaire à FPI). Cette dernière nous est apparue parfaitement adaptée à notre problématique et a donc été implantée dans le code CEDRE de l'ONERA.

Dans la suite de ce chapitre, un rappel sur les différentes méthodes de réduction des mécanismes réactionnels existantes est d'abord proposé. Le modèle FPI est ensuite présenté tel qu'il a été utilisé au cours de cette étude. Les stratégies retenues et la méthode de génération des tables sont en particulier détaillées. Les difficultés liées à l'implémentation de ce modèle au sein du code de CFD utilisé, ainsi que les solutions proposées pour surmonter ces limitations sont ensuite introduites. Pour finir, le modèle est validé sur le cas simple de flammes de prémélange laminaires se propageant librement.

2.2 Etat de l'art sur les méthodes de réduction des schémas cinétiques

Les schémas cinétiques détaillés pour la combustion de carburants usuels peuvent parfois comporter plusieurs centaines d'espèces et de réactions élémentaires : par exemple, le mécanisme de Konnov dédié aux hydrocarbures C1 à C3 (c'est à dire ne faisant intervenir que des molécules composées de un à trois atomes de carbone), comporte actuellement 115 espèces pour 894 réactions [120]. Ces schémas doivent être réduits pour pouvoir être utilisés dans le cadre de la simulation d'écoulements réactifs industriels. Au cours des deux dernières décennies, différentes techniques ont été proposées en réponse à cette problématique. Une présentation non exhaustive des principales méthodes existantes est réalisée dans ce qui suit.

2.2.1 Réduction systématique des schémas réactionnels

Deux méthodes de réduction systématiques peuvent être distinguées : une méthode "intuitive" et une méthode chimique, basée sur des hypothèses physiques.

Approche "intuitive" :

L'approche "intuitive" autorise la création de schémas globaux ou quasi-globaux (comportant un nombre très limité de réactions, très souvent une ou deux), à partir de schémas beaucoup plus détaillés. On considère par exemple la réaction unique et irréversible cible suivante :

$$xF + yO \longrightarrow zP, \tag{2.1}$$

où x, y, et z sont les coefficients stœchiométriques associés respectivement au carburant, à l'oxydant et aux produits. Les taux de réaction des espèces présentes dans cette réaction peuvent être décrits suivant une relation dérivée de la loi d'Arrhenius :

$$\dot{\omega}_i = \nu_i' M_i A T^b \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \prod_{i=1}^{N} C_i^{\alpha_i}, \tag{2.2}$$

où A est la constante du facteur préexponentiel, b l'exposant de la température et E_a l'énergie d'activation. Il est à noter que les coefficients α_i du modèle global ne sont pas nécessairement identiques aux coefficients stœchiométriques.

Tous ces paramètres sont calibrés de manière à retrouver des caractéristiques comparables à celles obtenues avec une chimie complexe sur un cas test donné (par exemple le délai d'auto-inflammation dans un réacteur homogène, ou la vitesse de propagation d'une flamme laminaire de prémélange 1D), sur une gamme de richesse aussi large que possible. Parmi les mécanimes ainsi obtenus, on peut citer par exemple les schémas à une ou deux étapes de Westbrook et Dryer [225].

Cette méthode de réduction comporte de nombreuses limitations. Par exemple, les schémas ainsi obtenus ne décrivent qu'un nombre réduit d'espèces et ne donnent donc pas accès aux espèces polluantes. En conséquence, ce type de mécanisme tend également à surestimer la température de fin de combustion.

Un autre désavantage est lié au fait que ces schémas sont calibrés de manière à représenter au mieux une caractéristique particulière de la combustion (généralement la vitesse de flamme), sur une plage de richesse n'incluant pas l'ensemble du domaine d'inflammabilité. Ces schémas doivent donc être utilisés en connaissant parfaitement leurs limites.

Approche chimique :

La seconde méthode est basée sur une approche chimique et nécessite une bonne connaissance des processus réactionnels mis en jeu. Dans cette approche, deux hypothèses principales sont introduites dans le but d'obtenir, à partir d'un schéma réactionnel détaillé, différents schémas réduits plus ou moins simplifiés. Ces deux hypothèses sont les suivantes (Warnatz *et al.* [223]) :

- **L'hypothèse d'état quasi-stationnaire (QSSA) :** elle revient à supposer que certaines des espèces intermédiaires possédant des vitesses de réaction et de disparition très rapides peuvent être considérées à l'équilibre. Si ces radicaux sont produits très tôt dans la flamme et immédiatement consommés, on peut supposer que leur concentration n'évolue que très peu à travers la flamme. Ces espèces peuvent donc être retirées du schéma réactionnel.
- **L'hypothèse d'équilibre partiel (PEA) :** elle permet de considérer à l'équilibre certaines réactions en comparant leurs taux de réaction direct et inverse. Si les taux de production et de disparition d'une réaction r restent du même ordre de grandeur, on peut supposer que celle-ci ne joue qu'un rôle mineur dans l'évolution du système. Ceci conduit à retirer cette réaction du mécanisme.

Ces deux hypothèses sont généralement utilisées conjointement pour conduire à la construction de schémas réduits en se basant uniquement sur des considérations chimiques.

Les mécanismes ainsi obtenus se présentent sous la forme de schémas réactionnels ne comportant qu'un nombre limité de réactions élémentaires contrôlant l'évolution d'un faible nombre d'espèces.

Les concentrations des espèces minoritaires peuvent être retrouvées par des relations algébriques qui découlent directement de la réduction du mécanisme d'origine.

L'obtention de ces schémas reste complexe et laborieuse. Peters [161] propose une méthodologie en cinq points pour parvenir à la réduction de schémas cinétiques par cette approche :

- simplification préalable du mécanisme en se basant sur la structure hiérarchique de la combustion des hydrocarbures, en retirant, par exemple, les chaînes carbonées trop longues ;
- identification des espèces à l'état quasi-stationnaire par comparaison de leurs temps caractéristiques d'évolution ou par une étude de sensibilité ;
- obtention d'un premier schéma réduit à partir des considérations précédentes ;
- calcul des vitesses de réaction et identification des réactions en équilibre partiel ;
- nouvelle simplification du schéma précédemment réduit.

Ces cinq étapes peuvent être répétées autant de fois que nécessaire.

Certaines des hypothèses utilisées ne sont valables que dans des domaines de pression, température et richesse bien précis. Les schémas obtenus dépendent ainsi des conditions pour lesquelles ils ont été établis. A noter que suivant Peters et Rogg [165], un mécanisme réduit composé de quatre étapes, et incluant les espèces CO, H et H_2, est suffisant pour reproduire correctement le comportement de flammes pauvres prémélangées de méthane (vitesse de flamme, température à l'équilibre, etc...).

Parmi les schémas réduits pour la combustion du méthane dans l'air établis suivant cette méthode, on peut citer notamment les mécanismes de Sanchez *et al.* [191], Mallampalli *et al.* [133], Hewson et Bollig [107], ou Li *et al.* [128] (ces mécanismes pouvant par ailleurs contenir une étape tenant compte de la formation de NO).

2.2.2 Algorithmes génétiques

Une méthode plus récente, permettant d'automatiser la réduction des schémas réactionnels, consiste à utiliser des algorithmes d'optimisation génétiques (Polifke *et al.* [176], Martin [135]). En se fixant un mécanisme global ou quasi-global cible, il est possible, via l'utilisation de tels algorithmes, de déterminer les constantes de la loi d'Arrhénius permettant de représenter au mieux l'évolution d'un paramètre particulier (en général la vitesse de flamme) en fonction de la richesse. Pour atteindre l'objectif recherché, les algorithmes génétiques procèdent par optimisation des paramètres du mécanisme cible en proposant à l'origine une population importante de solutions possibles, puis en modifiant celles-ci à chaque itération (mutations, croisements) et en éliminant à chaque fois les moins bonnes. On tend ainsi vers un mécanisme optimal répondant aux critères fixés. Un mécanisme réduit à deux étapes pour le méthane, obtenu suivant une telle procédure, a, par exemple, été utilisé par Roux *et al.*ă[187].

2.2.3 Méthode de réduction CSP

La méthode CSP ("Computational Singular Perturbation") a été à l'origine proposée par Lam et Goussis [122], [123]. Cette méthode est basée sur l'étude des valeurs propres de la matrice jacobienne des termes sources chimiques. La méthode CSP permet dans un premier temps d'isoler les taux de réaction associés à chacune des réactions élémentaires du schéma complexe, puis de les décomposer dans une nouvelle base permettant de mettre en évidence les temps caractéristiques liés à l'évolution de chaque réaction. Les réactions rapides peuvent alors être considérées à l'état d'équilibre partiel et négligées au profit des réactions plus lentes. Les algorithmes de calcul se basant sur la méthode CSP permettent donc une automatisation de l'approche systématique chimique pour la réduction des mécanismes réactionnels détaillés.

2.2.4 Méthode de réduction de type ILDM

Principes :

Les méthodes automatiques de réduction des schémas cinétiques détaillés sont souvent basées sur la comparaison des temps caractéristiques de la chimie. Les différences entre les techniques proposées résident dans la façon d'identifier ces temps caractéristiques. La méthode ILDM ("Intrinsic Low Dimensional Manifold") à laquelle nous nous intéressons ici (Maas et Pope [131], [132]), propose une procédure automatique pour tester et trier les temps caractéristiques des espèces. Ceci conduit à supposer que le système chimique relaxe rapidement vers un sous-espace attracteur de dimensions réduites. La détermination de ce sous-espace peut se faire suivant un mécanisme réactionnel détaillé et conduit à l'élaboration de tables regroupant l'évolution de l'ensemble des grandeurs thermochimiques décrites en fonction d'un nombre réduit de paramètres.

Comme le montre Gicquel [89], le principe de la méthode est aisément compréhensible. En réalisant plusieurs calculs de réacteurs homogènes avec une chimie détaillée, partant de différents états initiaux conduisant au même état d'équilibre, on peut voir que le système relaxe vers un sous-espace attracteur. La figure 2.1 présente les trajectoires dans l'espace des phases (Y_{CO_2}, Y_{H_2O}) tracées pour différents réacteurs chimiques (mélange CO/H_2/air).

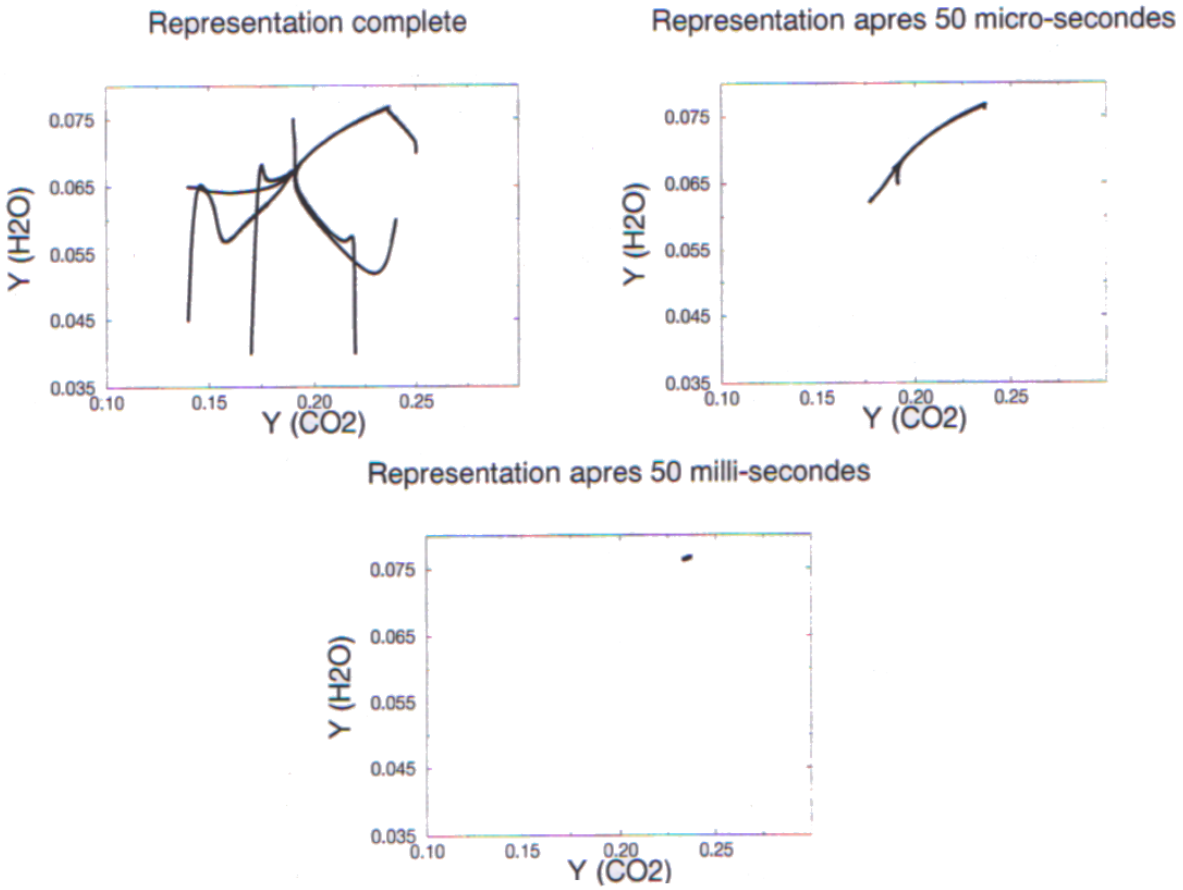

FIG. 2.1 – *Représentation intuitive du principe général de la méthode ILDM (Gicquel [89]).*

La première figure représente les trajectoires dans l'espace des phases de systèmes chimiques évoluant entre différents mélanges de gaz frais initiaux et l'état d'équilibre. Dans un second temps, on ne trace ces mêmes trajectoires qu'à partir d'un temps d'évolution $t_1 = 50$ μs. On remarque alors clairement l'existence d'une variété (manifold) attractrice de dimension 1 se réduisant à un simple segment de droite aboutissant à l'état d'équilibre. Ensuite, on laisse le système évoluer pendant un

temps beaucoup plus long, soit 50 ms, avant de tracer les trajectoires considérées. Dans ce cas, la variété se réduit à un point unique dans l'espace des phases correspondant à l'état d'équilibre. Au bout du temps t_2, tous les systèmes considérés ont donc atteint l'équilibre chimique.

Construction de variétés ILDM :

Ce résultat peut s'expliquer par l'étude du système chimique le plus simple (un réacteur homogène) défini par un jeu d'équations écrit sous la forme vectorielle condensée suivante :

$$\frac{d\mathbf{\Psi}}{dt} = F\left(\mathbf{\Psi}\right), \tag{2.3}$$

où $\mathbf{\Psi}$ représente le vecteur des $N_e + 2$ quantités conservées contenant l'enthalpie, la pression, et les N_e fractions massiques des espèces. Le vecteur F représente les termes sources chimiques de $\mathbf{\Psi}$ (F est nul pour l'enthalpie et la pression). La méthode ILDM requière l'identification des temps caractéristiques du système réactif. Pour cela, on linéarise $F\left(\mathbf{\Psi}\right)$ autour d'un état de référence noté $\mathbf{\Psi^0}$. On trouve :

$$F\left(\mathbf{\Psi}\right) = F\left(\mathbf{\Psi^0}\right) + \boldsymbol{J}\left(\mathbf{\Psi} - \mathbf{\Psi^0}\right), \tag{2.4}$$

où $\boldsymbol{J}$ est la matrice jacobienne du système, définie par :

$$J_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial \Psi_j}. \tag{2.5}$$

On peut alors faire apparaître $N_e + 2$ temps caractéristiques, correspondant aux valeurs propres de la matrice jacobienne, ainsi que $N_e + 2$ directions privilégiées, représentées par les vecteurs propres à droite. Toute perturbation d'un des éléments du vecteur $\mathbf{\Psi}$ entraine une variation du système dans l'espace des phases dans la direction donnée par le vecteur propre à droite et avec un temps caractéristique donné par la valeur propre associée.

Quatre groupes de valeurs propres peuvent être distingués en comparant les parties réelles de celles-ci :

- les valeurs propres largement positives faisant diverger le système,
- les valeurs propres nulles correspondant aux invariants du systèmes,
- les valeurs propres largement négatives correspondant aux grandeurs variant rapidement,
- les valeurs propres faiblement négatives ou faiblement positives correspondant aux temps caractéristiques les plus grands.

Les N_f espèces associées aux valeurs propres les plus rapides peuvent être supposées à l'état quasi stationnaire, et seules les N_c espèces variant le plus lentement sont conservées. On aboutit ainsi à la création d'une variété, possédant un nombre de degrés de liberté N_c, représentant la dynamique lente du système chimique.

En pratique, la matrice jacobienne du système en un point donné est décomposée de la façon suivante :

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{V_g}\mathbf{\Lambda}\boldsymbol{V_d}, \tag{2.6}$$

où $\mathbf{\Lambda}$ est la matrice diagonale regroupant les valeurs propres de $\boldsymbol{J}$, et $\boldsymbol{V_d} = \boldsymbol{V_g}^{-1}$ est la matrice des vecteurs propres à droite (matrice de changement de base). Cette décomposition permet de mettre en évidence les temps caractéristiques chimiques associés à chaque espèce.

La variété ILDM est ensuite déterminée par la résolution du système d'équations suivant :

$$\begin{cases} p = p^0 & \\ h = h^0 & \\ \mathcal{Y}_l = \mathcal{Y}_l^0 & \text{avec } j = 1, ..., N_a \text{ (atomes)} \\ c_i = c_i^0 & \text{avec } i = 1, ..., N_c \text{ (degrés de liberté de la variété ILDM)} \\ \boldsymbol{W}.F\left(\mathbf{\Psi}\right) = 0 & N_f \text{ équations associées aux } \Lambda_i \text{ les plus faibles en partie réelle.} \end{cases} \tag{2.7}$$

La dernière condition traduit le fait que la variété ILDM doit rester tangente aux N_f vecteurs propres associés aux valeurs propres de $\boldsymbol{J}$ dont la partie réelle est la plus grande en valeur absolue (correspondant aux espèces variant les plus rapidement). $\boldsymbol{W}$ est un tenseur de dimension NxN_f formé par ces vecteurs propres ; p, h et $\mathcal{Y}_l$ (les fractions atomiques) sont les grandeurs conservées. Du fait qu'elles soient invariantes, celles-ci permettent de fixer $2 + N_a$ degrés de libertés. Les c_i sont les fractions massiques des espèces définissant les variables d'avancement du problème.

Blasenbrey *et al.* [16] ont proposé un algorithme robuste permettant de surmonter les difficultés numériques rencontrées lors de la résolution de ce système.

Sur la figure 2.2, une variété ILDM est représentée pour la combustion d'un mélange CO/H_2/air (Maas et Pope [131]). Les lignes noires non fléchées correspondent à la variété ILDM (courbe supérieure) et à ce que donnerait un mécanisme réduit usuel (courbe inférieure). Les lignes fléchées représentent différentes trajectoires dans l'espace $(CO_2; H_2O)$.

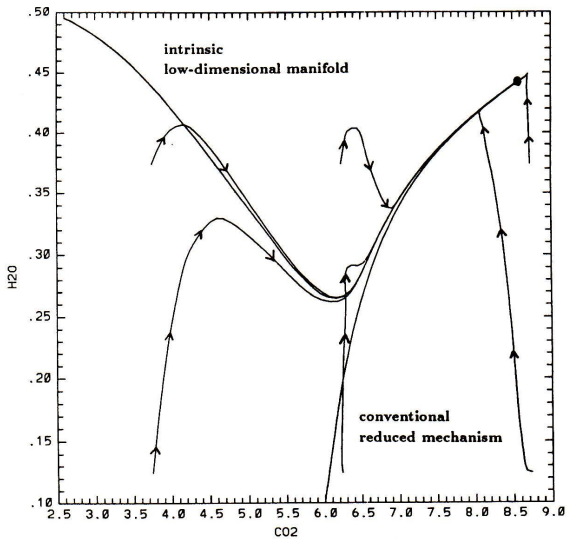

FIG. 2.2 – *Représentation d'une variété ILDM et de différentes trajectoires chimiques dans l'espace* (H_2O, CO_2) *pour une combustion* $CO/H_2/air$ *[131].*

Limitations de la méthode ILDM :

Les tables ILDM sont généralement mal adaptées au domaine des basses températures (typiquement pour $T < 1200$ K). Dans cette zone, il est en effet difficile de faire la distinction entre les temps caractéristiques chimiques lents et rapides, tous les processus chimiques intervenant à des temps caractéristiques comparables. Maas et Pope [131] ont montré que l'étendue de cette zone de basses températures dépendait du nombre de dimensions de la variété ILDM (plus le nombre de dimensions est élevé, plus cette zone est réduite).

Cette difficulté est généralement résolue en prolongeant linéairement les tables ILDM dans le domaine des basses températures (voir Maas et Pope [131] ou Bykov et Maas [37]). Par la suite, Bykov et Maas [36] ont proposé une méthode d'extrapolation non linéaire en considérant la décomposition de la matrice des flux de diffusion dans sa base propre.

Le fait qu'ILDM ne considère qu'un système réactif simplifié, uniquement piloté par la chimie (réacteur homogène), limite son utilisation dans un cadre industriel. En pratique, les flammes résultent de la compétition entre la chimie et d'autres phénomènes physiques. Ainsi, lorsque les phénomènes de diffusion par exemple et les réactions chimiques interviennent à des temps caractéristiques comparables, la méthode ILDM est difficilement applicable.

De nombreux travaux ont donc eu pour but d'étendre ILDM aux problèmes de réaction/diffusion. Pour plus de précision, le lecteur peut se reporter aux travaux de Maas et Pope [132] ou Eggels et De Goey [67]. De la même manière, certaines incertitudes subsistent quant au bon comportement de la méthode ILDM en régime turbulent. Dans ce but, différentes études ont été réalisées sur le calcul de flammes élémentaires turbulentes avec ILDM, en général couplées à des approches à PDF (Nau *et al.* [152] ou Xiao *et al.* [229]).

Toutes ces limitations rendent finalement l'utilisation de ILDM dans un contexte industriel très difficile, voire impossible.

2.2.5 Méthode ISAT

D'autres techniques similaires à ILDM ont été développées, comme par exemple la méthode ISAT (pour "In Situ Adaptive Tabulation") proposée par Pope [181]. Dans cette approche, directement dérivée d'ILDM, la variété attractrice construite par comparaison des différents temps caractéristiques du système est déterminée parallèlement au calcul de CFD. La table étant générée en temps réel, seuls les points qui ne sont pas déja présents dans celle-ci sont recalculés. Elle ne contient donc que les points nécessaires au calcul, ce qui réduit l'occupation mémoire ainsi que les délais d'interpolation. Cette technique de construction de tables peut être appliquée à d'autres méthodes de calcul de la chimie.

2.2.6 Modèles FPI et FGM

Les méthodes de tabulation basées sur des calculs de flammes laminaires de prémélange (type FPI [90], [89] ou FGM [157], [155]) ont été développées pour répondre aux difficultés rencontrées par ILDM dans la région des basses températures. Dans cette optique, Gicquel *et al.* [90] ont proposé d'étendre les bases de données ILDM au domaine de la chimie lente en les complétant par des calculs de flammes laminaires de prémélange librement propagatives. A l'origine, les tables FPI ne devaient donc être utilisées qu'en dehors du domaine de définition d'ILDM.

Par la suite, les auteurs ont montré que, dans le domaine de la chimie rapide, les tables ILDM initiales recouvraient parfaitement les trajectoires de flammes laminaires de prémélange (figure 2.3). Dès lors, il est apparu qu'une tabulation de la chimie, uniquement basée sur des calculs de flammes laminaires, était pertinente et permettait de représenter l'évolution de flammes prémélangées complexes. La figure 2.3 montre par exemple que les données tabulées suivant la méthode FPI correspondent aux états atteints au sein d'une flamme de prémélange turbulente à richesse équivalente (DNS).

Ces caractéristiques remarquables nous ont conduit à retenir l'approche FPI pour caractériser la chimie complexe dans le cadre de ce travail de thèse. L'utilisation de cette méthode s'avère d'autant plus pertinente que les régimes de combustion rencontrés au sein des applications visées recoupent son domaine de validité. A noter que la méthode FGM développée par Van Oijen *et al.* [157], [158] est très similaire à FPI.

Le modèle FPI d'origine :

Tout comme ILDM, FPI est fondé sur la construction de tables contenant l'ensemble des états thermochimiques accessibles lors de l'évolution d'un système réactif élémentaire. Dans le cadre du modèle FPI d'origine, on calcul une série de flammes de prémélange 1D à différentes richesses à l'aide de mécanismes réactionnels détaillés, puis on tabule leur réponse chimique en fonction d'une variable d'avancement c et d'une fraction de mélange z. Le modèle FPI de Gicquel [89] est donc dédié à la modélisation de la combustion partiellement prémélangée. Les grandeurs tabulées prennent alors la forme suivante :

$$Y_i^{tab}(c,z) \quad \dot{\omega}_i^{tab}(c,z) \quad T^{tab}(c,z)\,. \tag{2.8}$$

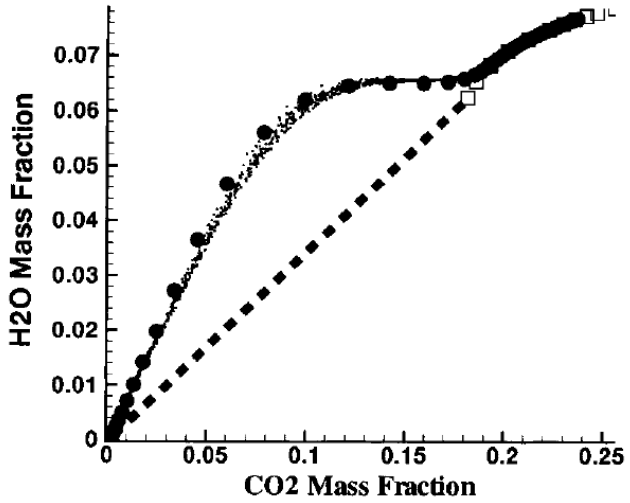

FIG. 2.3 – *Trajectoire dans l'espace des phases d'une flamme laminaire $CO/H_2/Air$ (cercles noirs). La varieté ILDM correspondante est représentée par les carrés blancs et est prolongée linéairement dans la zone froide (tirets). Les points noirs correspondent aux états atteints au sein d'une flamme de prémélange turbulente (calculs DNS). (Gicquel et al. [89]).*

L'indice supérieur *tab* indique qu'il s'agit de grandeurs tabulées.

La variable c permet de caractériser l'état d'avancement de la combustion à travers la flamme. Il faut que chaque valeur de c corresponde à un unique état thermochimique de la table : c doit donc varier de façon continue et strictement monotone à travers la flamme, et peut être normalisée. Suivant ces critères, différentes expressions peuvent être proposées, comme par exemple [75] :

$$c = \frac{Y_{CO_2}}{Y_{CO_2}^{eq}} \quad \text{ou} \quad c = \frac{Y_{H_2O}}{Y_{H_2O}^{eq}}. \tag{2.9}$$

L'indice supérieur *eq* caractérise ici des grandeurs prises à l'équilibre.

Par définition, z caractérise la richesse du mélange réactif et peut être normalisée. Cette grandeur doit donc rester constante à travers chaque flamme simulée. Toutefois, la diffusion différentielle peut entraîner des fluctuations plus ou moins importantes de z à la traversée du front de flamme. Une définition possible de z a été donnée dans le chapitre 1 de ce mémoire (relation (1.12)).

Extensions possibles du modèle :

Le modèle FPI, tel que proposé par Gicquel [89], ne peut être utilisé que dans le cadre de flammes adiabatiques, sous des conditions de pression et de température des gaz brûlés fixées. Son extension à la modélisation des flammes non-adiabatiques et non-isobares est cependant possible, mais nécessite l'introduction de nouvelles dimensions.

Fiorina *et al.* [74, 75] ont étendu le modèle FPI aux flammes non adiabatiques via l'addition d'un paramètre correspondant à l'enthalpie totale du mélange. Dans leurs travaux, les auteurs utilisent des calculs de flammes laminaires stabilisées sur un brûleur comme élément de référence pour la construction des tables. En modifiant le débit des gaz frais en entrée, il est en effet possible de contrôler les pertes thermiques au nez du brûleur et donc l'enthalpie initiale du prémélange. Des tables multidimensionnelles peuvent ainsi être construites en collectant l'évolution des grandeurs recherchées à travers les flammes calculées en fonction de c et de l'enthalpie.

Embouazza *et al.* [69] ont proposé une extension de la méthode permettant de tenir compte des variations de pression au sein des flammes. Pour cela, la pression p du mélange doit être rajoutée en tant

que paramètre dimensionnant des tables. Celles-ci sont construites à partir de calculs de nombreuses flammes de prémélange librement propagatives possédant chacune une pression différente.

Dans le cas du modèle ILDM, l'augmentation du nombre de variables d'avancement améliore la description des phénomènes chimiques mis en jeu [131], ce qui peut, par extension, s'appliquer aux modèles FPI et FGM (Van Oijen *et al.* [157, 156]). On peut ainsi construire des tables FPI pour lesquelles le nombre de variables d'avancement évoluant à travers le front de flamme est augmenté, indépendamment des autres degrés de liberté (par exemple z ou l'enthalpie).

Ces tables peuvent être construites en réalisant des calculs successifs de flammes pour lesquelles la composition initiale des gaz frais est modifiée en transformant une partie des réactifs en produits de réaction. En procédant ainsi, il faut s'assurer que la composition atomique du mélange est conservée de sorte que l'état d'équilibre atteint reste toujours le même. La figure 2.4 présente un exemple de table 2D obtenue de cette manière avec FGM. Ces tables peuvent par exemple être utilisées pour modéliser des flammes de prémélange étirées [157], dans la limite des faibles taux d'étirement.

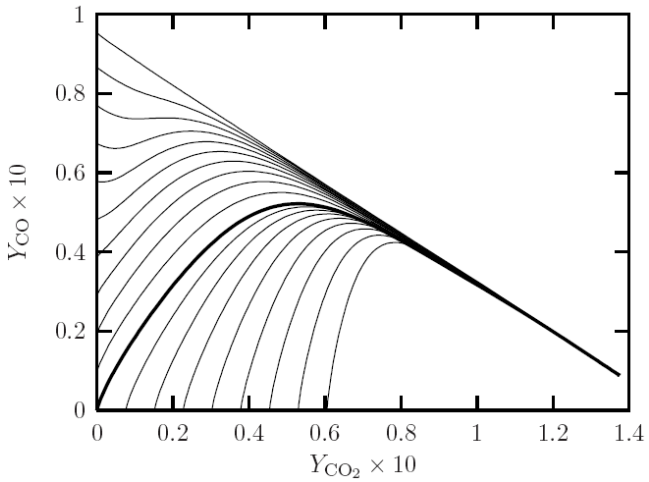

FIG. 2.4 – *Exemple de table multidimensionnelle indexée par Y_{CO_2} et Y_{CO} donné par Van Oijen [155]. En gras, la trajectoire correspondant à une flamme stœchiométrique.*

2.3 Génération de tables FPI

Dans cette section sont exposés les choix et les adaptations qui ont été nécessaires pour implémenter et utiliser le modèle FPI au sein de la plate-forme logicielle CEDRE de l'ONERA.

2.3.1 Choix des variables du problème

La variable d'avancement :

Différentes définitions de c peuvent être données, fondées sur des combinaisons linéaires des fractions massiques des espèces présentes dans l'écoulement (par exemple O_2 [157], CO_2 [89] ou bien H_2O [75]). En s'appuyant sur les travaux de Fiorina *et al.* [74] et Rullaud [188], il ressort qu'une définition adaptée à la combustion du méthane dans l'air est la suivante :

$$c = \frac{Y_{CO_2} + Y_{CO}}{Y^{eq}_{CO_2} + Y^{eq}_{CO}}. \tag{2.10}$$

En faisant intervenir Y_{CO_2} et Y_{CO}, on tient compte de la dissociation CO/CO_2 à richesse élevée, de sorte que la variable d'avancement reste strictement monotone sur une vaste gamme de points de fonctionnement.

Suivant les applications, d'autres définitions de c peuvent s'avérer également pertinentes. Ainsi, les travaux récents de Domingo *et al.* [57] montrent que l'introduction de la fraction massique de H_2O à la définition de c donnée précédemment peut se révéler utile lorsque les gaz brûlés sont mélangés progressivement aux gaz frais. De la même manière, Godel *et al.* [100] font intervenir les fractions massiques des espèces NO et N_2 pour tenir compte de la dissociation de cette dernière lors de la formation de NOx.

On peut montrer que c est également solution d'une équation de transport, déduite des équations de conservation sur les espèces :

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \nabla.(\rho \boldsymbol{u} c) - \nabla.(\rho D_c \nabla c) - \rho \dot{\omega}_c = 0, \tag{2.11}$$

où D_c représente le coefficient de diffusion de la variable d'avancement et $\dot{\omega}_c$ le taux de production chimique de c. Le coefficient D_c est très délicat à calculer. On choisit ainsi souvent de l'évaluer en attribuant à c un nombre de Schmidt constant, préalablement déterminé (généralement de l'ordre de 0,7).

En combustion parfaitement prémélangée, étant donné qu'il n'y a pas d'inhomogénéités de richesse dans l'écoulement, l'évaluation de la seule variable d'avancement est nécessaire (possibilité de s'affranchir de la variable z).

La fraction de mélange :

La manière la plus précise de définir z pour limiter les effets de la diffusion différentielle s'appuie sur les fractions atomiques des éléments présents dans le mélange (Bilger *et al.* [14], Pitsch et Peters [171]). Pour cela, on écrit la relation suivante représentant l'équilibre des différents éléments à travers la flamme :

$$\mu_C C + \mu_H H + \mu_O O \longrightarrow P. \tag{2.12}$$

En considérant que les carburants étudiés ne comportent que les éléments C et H, on ne base la définition de z que sur ces deux atomes. En suivant Pitsch et Peters [171], la grandeur suivante est conservée à travers chaque flamme prémélangée :

$$\frac{\mathcal{Y}_C}{\mu_C \mathcal{M}_C} + \frac{\mathcal{Y}_H}{\mu_H \mathcal{M}_H} = cte = \beta. \tag{2.13}$$

Ainsi, en utilisant la grandeur β comme traceur du mélange et en la renormalisant de telle sorte que la variable z ainsi construite varie entre 0 dans un écoulement constitué d'oxydant pur et 1 dans le carburant pur, on peut définir :

$$z = \frac{\frac{(\mathcal{Y}_H - \mathcal{Y}_H^O)}{\mu_H \mathcal{M}_H} + \frac{(\mathcal{Y}_C - \mathcal{Y}_C^O)}{\mu_C \mathcal{M}_C}}{\frac{(\mathcal{Y}_H^F - \mathcal{Y}_H^O)}{\mu_H \mathcal{M}_H} + \frac{(\mathcal{Y}_C^F - \mathcal{Y}_C^O)}{\mu_C \mathcal{M}_C}}. \tag{2.14}$$

Les exposants O et F indiquent des grandeurs calculées respectivement dans l'oxydant pur et dans le carburant pur. μ_l représente le nombre d'atomes l contenu dans les réactifs. $\mathcal{Y}_l$ est la fraction massique de l'élément l et peut être calculée à partir des fractions massiques des espèces de la façon suivante :

$$\mathcal{Y}_l = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\mu_l^i \mathcal{M}_l}{M_i} Y_i, \tag{2.15}$$

où M_i est la masse molaire de l'espèce i et $\mathcal{M}_l$ la masse atomique molaire de l'atome l.

La figure 2.5 montre l'évolution de la fraction de mélange définie par la relation (2.14) à travers des flammes méthane/air pour trois richesses différentes (conditions atmosphériques). Une variation de z due à la diffusion différentielle est toujours observée (de l'ordre de 4% au maximum), mais celle-ci reste suffisamment faible pour pouvoir considérer z constant à la traversée de la flamme.

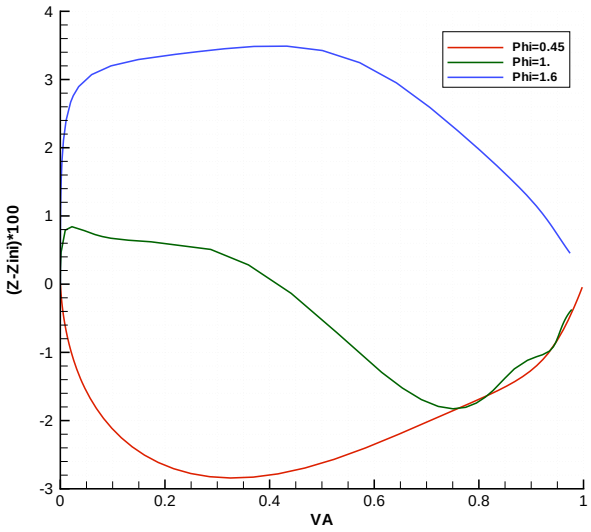

FIG. 2.5 – *Evolution de z (en pourcentage) à travers une flamme méthane/air pour trois richesses différentes.*

De même que pour c, une équation de transport pour z peut être établie :

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \nabla.(\rho \boldsymbol{u} z) - \nabla.(\rho D_z \nabla z) = 0, \tag{2.16}$$

où D_z est le coefficient de diffusion du scalaire z. Ce coefficient de diffusion reste toujours compliqué à évaluer de façon précise étant donné que z résulte de la combinaison linéaire de plusieurs espèces (suivant la relation (2.14)). Dans ce contexte, on choisit souvent de calculer ce coefficient à partir d'un nombre de Schmidt constant préalablement fixé.

2.3.2 Code de calcul pour flammes laminaires prémélangées libres

Les bases de données FPI sont construites par tabulation de la réponse chimique de flammes laminaires de prémélange librement propagatives. Un logiciel dédié à la résolution de ce type de problème, capable de prendre en compte une chimie détaillée, doit être utilisé. Dans le cadre de ce travail, c'est le solveur PREMIX (Kee *et al.* [116]) de la bibliothèque CHEMKIN qui a été choisi.

Equations résolues :

Les équations résolues par le code sont celles des flammes laminaires de prémélange stationnaires planes 1D. Ces flammes sont considérées comme adiabatiques et quasi-isobares. On peut ainsi établir les équations suivantes :

$$\rho u = cte, \tag{2.17}$$

$$c_p \rho u \frac{dT}{dx} + \frac{dQ}{dx} + \sum_{i=1}^{N_e} \rho Y_i V_i c_{p,i} \frac{dT}{dx} + \rho \sum_{i=1}^{N_e} \dot{\omega}_i h_i = 0, \tag{2.18}$$

$$\rho u \frac{dY_i}{dx} + \frac{d}{dx}(\rho Y_i V_i) - \rho \dot{\omega}_i = 0, \tag{2.19}$$

$$\rho = \frac{pM}{RT}. \tag{2.20}$$

où R représente la constante des gaz parfaits, égale à 8,314 J.mol^{-1}.K^{-1}, M la masse molaire du mélange, c_p la capacité calorifique à pression constante du mélange (ces grandeurs indicées i sont

évaluées par espèce), h_i l'enthalpie massique de l'espèce i, Q le flux de diffusion thermique, V_i la vitesse de diffusion moléculaire de i, et $\dot{\omega}_i$ le taux de production massique de i.

Propriétés physiques :

Le flux de diffusion moléculaire peut s'exprimer suivant : $J_i = -Y_i V_i$. Ces flux, ainsi que le flux de diffusion thermique, peuvent s'écrire (en 1D) (Giovangigli [93]) :

$$J_i = -\sum_{j=1}^{N_e} D_{ij}\mathbf{d}_j - \underbrace{\rho Y_i \Theta_i \frac{\partial \log T}{\partial x}}_{Soret}, \tag{2.21}$$

$$Q = -\lambda\frac{\partial T}{\partial x} - \underbrace{p\sum_{i=1}^{N_e}\Theta_i\mathbf{d}_i}_{Dufour}, \tag{2.22}$$

où D_{ij} représente les coefficients de diffusion complexes multiespèces, Θ_i les coefficients de diffusion thermiques et λ la conductivité thermique partielle du mélange. Le vecteur $\mathbf{d}_i$ inclut les effets liés aux gradients des variables d'état ainsi qu'aux forces extérieures.

En pratique, dans CHEMKIN, la vitesse de diffusion moléculaire est décomposée en trois termes :

$$V_i = V_i^d + W_i + V_c. \tag{2.23}$$

Le premier terme est lié aux gradients de fractions molaires, le second est lié aux gradients de température (effet Soret), le dernier est une vitesse correctrice qui assure la conservation de la masse.

Dans CHEMKIN, V_i^d est approchée par la relation de Hirschfelder et Curtiss [111] :

$$V_i^d = -\frac{1-Y_i}{X_i\sum_{j\neq i}\frac{X_j}{\mathscr{D}_{ij}}}\frac{\partial X_i}{\partial x}. \tag{2.24}$$

Dans cette relation, les $\mathscr{D}_{ij}$ représentent les coefficients de diffusion binaires. Pour construire cette expression, on suppose que seule l'espèce i diffuse. Le terme $\frac{1-Y_i}{\sum_{j\neq i}\frac{X_j}{\mathscr{D}_{ij}}}$ correspond donc à un coefficient de diffusion global, quantifiant la diffusion de l'espèce i dans le mélange.

Les coefficients de diffusion binaires peuvent être évalués selon le formalisme de Lennard-Jones (pour les molécules non polaires) en fonction de polynômes dépendant notamment des intégrales de collisions et de la température [47]. Les données nécessaires au calcul des coefficients de diffusion sont regroupées au sein de tables.

La vitesse de diffusion due aux gradients thermiques, W_i, peut être ajoutée si besoin. Ce phénomène est non négligeable lorsque l'on s'intéresse à des espèces légères comme H et H_2, ou dans le cadre de flammes d'hydrogène. Il possède cependant un effet limité sur les espèces majoritaires présentes lors de la combustion d'hydrocarbures. Il s'exprime dans PREMIX suivant l'expression :

$$W_i = \rho Y_i \Theta_i \frac{1}{T}\frac{dT}{dx}, \tag{2.25}$$

où Θ_i est également évalué à partir de tables de propriétés de transport.

Pour finir, la vitesse de correction V_c est déterminée pour assurer la conservation totale de la masse. Elle doit permettre de vérifier la relation suivante :

$$\sum_{i=1}^{N} Y_i\left(V_i^d + W_i + V_c\right) = 0. \tag{2.26}$$

Cette vitesse de correction, introduite par Hirschfelder et Curtiss [47] correspond exactement au premier terme d'une série convergente de Stefan-Maxwell [93]. Ce terme peut donc être déterminé à l'issue d'un développement mathématique rigoureux et possède un véritable sens physique. Cette relation traduit le fait qu'il est important que la vitesse de correction des flux de diffusion soit indépendante de l'espèce considérée.

Le flux de diffusion thermique se réduit à la loi de Fourier où seul le terme lié aux gradients de température est conservé :

$$Q = -\lambda \frac{dT}{dx}. \tag{2.27}$$

La conductivité thermique moyenne approchée est obtenue à partir des conductivités thermiques d'espèces en appliquant une moyenne mixte (définie à partir d'une moyenne arithmétique et harmonique) pondérée par les fractions molaires des espèces. Les conductivités thermiques par espèce sont déterminées à partir de données de transport tabulées.

Les propriétés thermodynamiques sont calculées à partir de deux polynômes de degré 5 définis sur deux plages de température distinctes (tables NASA-Lewis [138]). Le domaine total de définition s'étend généralement entre 100 K et 3000 K et la température intermédiaire délimitant les deux plages est d'environ 1000 K.

Chimie :

Le taux de réaction chimique est évalué à partir de la loi d'action de masse. Si on considère que le processus chimique fait intervenir N_e espèces différentes pouvant être reliées entre elles via N_r réactions élémentaires, chacune de ces réactions peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\sum_{i=1}^{N_e} \nu'_{ij} R_i \leftrightarrow \sum_{i=1}^{N_e} \nu''_{ij} R_i, \tag{2.28}$$

où ν'_{ij} et ν''_{ij} représentent respectivement les coefficients stœchiométriques directs et inverses liés à l'espèce R_i dans l'équation j.

La théorie cinétique des gaz permet de déterminer la forme prise par le terme source chimique massique lié à R_i :

$$\rho \dot{\omega}_i = M_i \sum_{j=1}^{N_r} \left(\nu''_{ij} - \nu'_{ij}\right) \left(k_{fj} \prod_{i=1}^{N_e} C_i^{\nu'_{ij}} - k_{bj} \prod_{i=1}^{N_e} C_i^{\nu''_{ij}} \right), \tag{2.29}$$

où C_i est la concentration molaire de l'espèce i.

Les vitesses de réaction directes k_{fj} sont évaluées suivant la loi d'Arrhenius en fonction de la température :

$$k_{fj} = A T^{-b} e^{-\frac{Ea}{RT}}. \tag{2.30}$$

Les paramètres de cette loi sont généralement donnés. Les vitesses inverses, k_{bj}, doivent ensuite être recalculées à partir des constantes d'équilibre :

$$k_{eq} = k_f / k_b = \left(\frac{p_a}{RT}\right)^{\sum_{i=1}^{Ne}\left(\nu''_{ij} - \nu'_{ij}\right)} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{R} - \frac{\Delta H_j^0}{RT}\right), \tag{2.31}$$

où $p_a = 101\ 325$ Pa. ΔS_j^0 et ΔH_j^0 sont les variations d'entropie et d'enthalpie dues à la réaction j.

Pour tenir compte de l'influence d'un éventuel troisième corps, il convient en général de multiplier le taux d'avancement de la réaction impliquée par une concentration de mélange définie par :

$$C_M = \sum_{i=1}^{N_e} \alpha_i C_i, \tag{2.32}$$

où α_i représente l'efficacité de l'espèce i.

A basse pression, la concentration de troisième corps est généralement prise en compte suivant la loi de "fall-off" de Lindemann. Cette corrélation permet de tenir compte de la dépendance en pression des taux de réaction. Dans ce cas, les vitesses de réaction directes k_f s'ecrivent :

$$k_f = k_\infty \left(\frac{\frac{k_0 C_M}{k_\infty}}{1 + \frac{k_0 C_M}{k_\infty}} \right) F, \tag{2.33}$$

où k_∞ représente la vitesse de la réaction calculée à partir des paramètres d'Arrhenius. La grandeur k_0 est calculée à partir des paramètres de "fall-off" et prend également la forme d'une loi d'Arrhenius :

$$k_0 = A_0 T^{b_0} e^{-\frac{E_0}{RT}}. \tag{2.34}$$

Dans la relation (2.33), F est généralement fixé à 1. Cependant, des lois plus complexes peuvent être employées comme par exemple celle de Troe.

2.3.3 Interfaçage de PREMIX et génération d'une table

Pour la construction de tables dédiées à la combustion partiellement prémélangée, nous avons choisi d'effectuer en série les N_f calculs de flammes élémentaires nécessaires. Sachant que la convergence de la méthode de Newton utilisée pour la résolution du système dépend fortement de la solution initiale imposée, celle-ci doit être adaptée avant chaque simulation : on réintroduit donc comme condition initiale le résultat obtenu au calcul précédent.

Cette méthode, très simple à mettre en œuvre, peut cependant conduire à des temps de restitution très longs. Dans ce cas, il est également possible d'utiliser une méthode basée sur des calculs de continuation (Giovangigli et Smooke [94], [95]), qui permettent, à l'aide d'un changement de variable adequat, d'obtenir rapidement la réponse d'une flamme à la variation d'un paramètre particulier (ici la richesse). Cette méthode, plus rapide mais plus complexe, n'a pas été utilisée au cours de ce travail de thèse.

Les données brutes issues des calculs PREMIX préliminaires sont pré-traitées avant de constituer les tables FPI définitives. Ces données sont notamment projetées sur un nouveau maillage en c et en z afin de redistribuer de façon pertinente les points dans l'espace des phases.

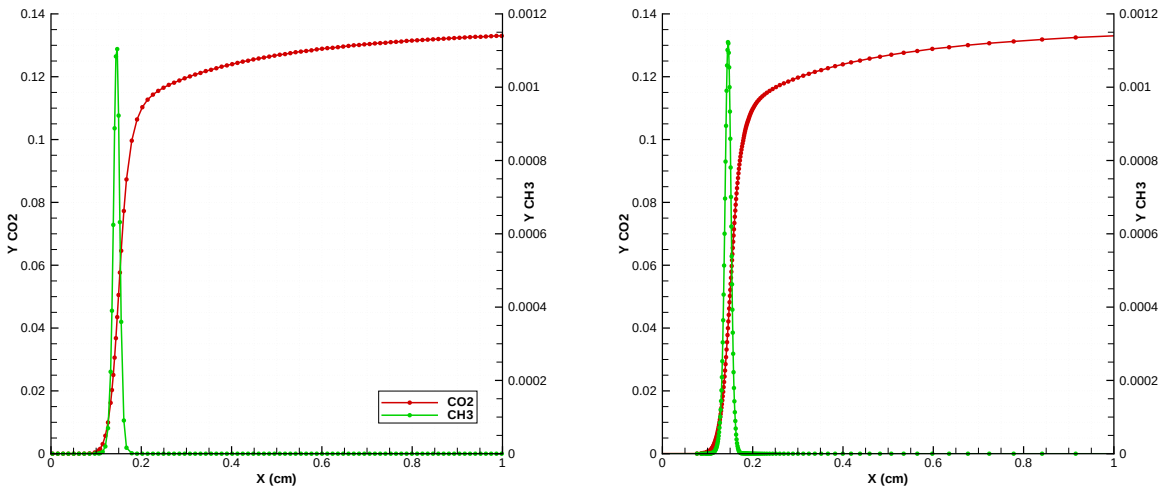

FIG. 2.6 – *Profils de fractions massiques de CO_2 et CH_3 en fonction de x au sein d'une flamme méthane/air stœchiométrique. A gauche résultats bruts donnés par CHEMKIN, à droite, projection sur un maillage de 150 points.*

Le nouveau maillage est composé d'un nombre de points donnés, et est raffiné dans la zone de production des radicaux intermédiaires, localisée par le pic de Y_{OH}. C'est en effet au voisinage de cette région que l'on rencontre les gradients les plus forts, susceptibles de rendre les interpolations peu précises. La figure 2.6 présente un exemple de redistribution des points issus d'un calcul de flamme stœchiométrique. Durant le calcul PREMIX, 300 points ont été nécessaires. Les résultats ont ensuite été projetés sur un maillage comportant 150 points.

Une procédure de projection similaire peut être employée suivant z. Le nouveau maillage défini dans ce cas peut par exemple être raffiné autour de la fraction de mélange moyenne rencontrée au cours du calcul.

Les figures 2.7 montrent un exemple de table créée pour la combustion du méthane dans l'air dans les conditions atmosphériques. Le schéma cinétique utilisé est le mécanisme GRI-Mech 2.11 [23]. Les bornes du calcul sont $\varphi = 0{,}45$ en régime pauvre et $\varphi = 2{,}4$ en régime riche.

Comme cela a été mentionné dans la première section de ce chapitre, FPI peut facilement être étendu aux flammes non adiabatiques. L'approche proposée par Van Oijen [155] dans ce contexte a ainsi été testée dans le cadre de notre travail. De plus amples détails sont donnés en annexes sur la procédure suivie pour la construction des tables et sur la validation de l'approche sur un cas simple. La méthode employée a également été résumée dans [194].

2.4 Couplage des tables avec le code CEDRE

2.4.1 Présentation du code CEDRE

On introduit ici les équations de conservation de Navier-Stokes sous leur forme de base, ni filtrées, ni moyennées. Ces équations sont ici fermées en utilisant les modèles pour les propriétés physiques du fluide employées dans CEDRE.

Equations de conservation :

Equation de conservation des espèces :

$$\rho\frac{DY_i}{Dt} = \frac{\partial\rho Y_i}{\partial t} + \nabla.\left(\rho\mathbf{u}Y_i\right) = -\nabla.\mathbf{J}_i + \rho\dot{\omega}_i. \tag{2.35}$$

Equation de conservation de la quantité de mouvement (où $\boldsymbol{\tau}$ est le tenseur des contraintes visqueuses) :

$$\rho\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial\rho\mathbf{u}}{\partial t} + \nabla.\left(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}\right) = \nabla.\left(\boldsymbol{\tau} - p\mathbf{Id}\right). \tag{2.36}$$

Equation de conservation de l'énergie totale ($e_t = e + \frac{1}{2}\mathbf{u}.\mathbf{u}$, avec e, l'énergie interne du mélange) :

$$\rho\frac{De_t}{Dt} = \frac{\partial\rho e_t}{\partial t} + \nabla.\left(\rho e_t\mathbf{u}\right) = \nabla.\left[\left(\boldsymbol{\tau} - p\mathbf{Id}\right)\mathbf{u}\right] - \nabla.\boldsymbol{J_t}. \tag{2.37}$$

Dans le cadre du modèle FPI, il est intéressant également de transporter une équation de transport pour un scalaire passif z :

$$\rho\frac{Dz}{Dt} = \frac{\partial\rho z}{\partial t} + \nabla.\left(\rho\mathbf{u}z\right) = -\nabla.\mathbf{J}_z. \tag{2.38}$$

Dans CEDRE, ce jeu d'équation est completé par la loi d'état des gaz parfaits :

$$\rho = \frac{pM}{RT}, \tag{2.39}$$

où M est évaluée suivant : $M = \left(\sum_{i=1}^{N_e} Y_i/Mi\right)^{-1}$.

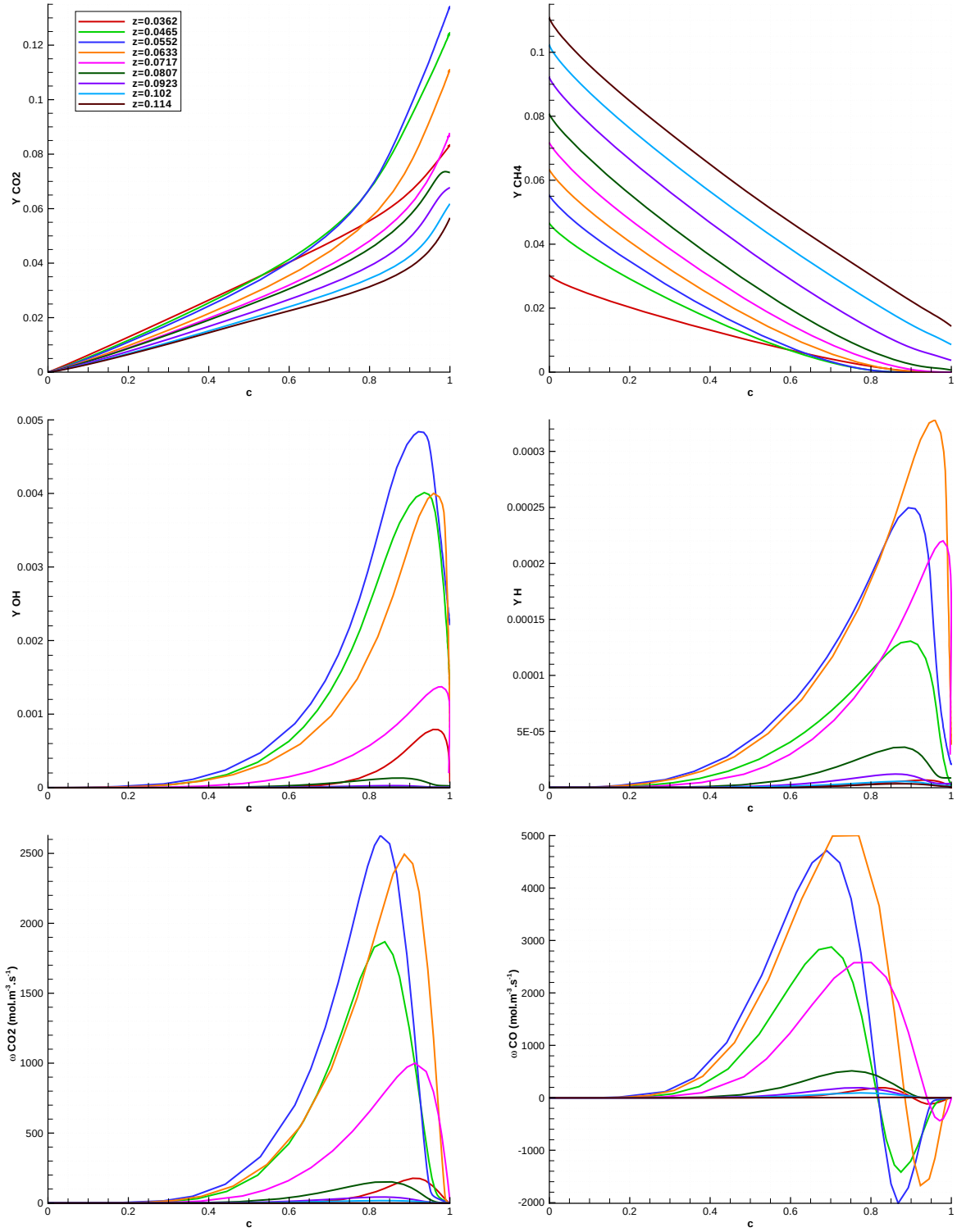

FIG. 2.7 – *Exemple de table FPI pour la combustion du méthane dans l'air. En haut à gauche, Y_{CO_2}, en haut à droite, Y_{CH_4}, au centre à gauche, Y_{OH}, au centre à droite, Y_H, en bas à gauche, $\dot{\omega}_{CO_2}$, en bas à droite, $\dot{\omega}_{CO}$.*

Propriétés physiques :

Le tenseur des contraintes visqueuses $\boldsymbol{\tau}$ est fermé en considérant que le mélange se comporte comme un fluide newtonien :

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right] + \eta \nabla . (\mathbf{u}) \, \mathbf{Id}. \tag{2.40}$$

Le second coefficient de viscosité, η, est évalué suivant l'hypothèse de Stokes : $\eta = -\frac{2}{3}\mu$. Cette approximation n'est *a priori* valable que pour les gaz polyatomiques, et pour certains écoulements à faible nombre de Mach. Dans les situations contraires, l'hypothèse de Stokes peut se révéler très fausse (Billet *et al.* [15]).

Le coefficient de viscosité dynamique, μ, est calculé suivant la loi de Sutherland :

$$\mu_i(T) = \mu_i^0 \frac{T_i^0 + T_i^1}{T + T_i^1} \left(\frac{T}{T_i^0}\right)^{1.5}, \tag{2.41}$$

avec T_i^0, T_i^1 et μ_i^0 les coefficients de la loi, sachant que μ_0 représente la viscosité de l'espèce i à la température T_i^0. La viscosité de mélange est ensuite obtenue suivant :

$$\mu = \sum_{i=1}^{N_e} Y_i \mu_i. \tag{2.42}$$

Le flux de diffusion moléculaire est donné par la loi de Fick :

$$\mathbf{J}_i = -\rho D_i \nabla Y_i. \tag{2.43}$$

Le flux de diffusion thermique total, noté $\boldsymbol{J_t}$, est égal à :

$$\boldsymbol{J_t} = \mathbf{Q} + \sum_{i=1}^{N_e} h_i \mathbf{J}_i. \tag{2.44}$$

Le flux de chaleur $\mathbf{Q}$ est donné par la loi de Fourier :

$$\mathbf{Q} = -\lambda \nabla T. \tag{2.45}$$

La conductivité thermique de mélange λ est évaluée en fonction de la conductivité thermique de chaque espèce via une moyenne arithmétique, pondérée par la viscosité :

$$\lambda = \mu \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\lambda_i}{\mu_i} Y_i. \tag{2.46}$$

Les conductivités thermiques des espèce, λ_i, sont évaluées à partir de nombres de Prandtl constants, et les coefficients de diffusion moléculaires à l'aide de nombres de Schmidt constants, soit :

$$\lambda_i = \frac{\mu_i c_{p,i}}{Pr_i} \quad \text{et} \quad D_i = \frac{\nu}{Sc_i}. \tag{2.47}$$

La procédure permettant d'évaluer ces nombres adimensionnels par espèce est décrite section 2.4.3.

Lorsque l'on considère l'équation de conservation du scalaire passif z (équation (2.38)), le flux de diffusion est approché par la relation suivante :

$$\mathbf{J}_z = -\rho D_z \nabla z. \tag{2.48}$$

Le coefficient de diffusion D_z est particulièrement délicat à évaluer du fait que z dépend généralement des fractions massiques des espèces présentes dans le mélange de façon non-linéaire (par exemple suivant la relation (2.14)). Dans ce contexte, on approche généralement ce coefficient en utilisant la relation (2.47), et en imposant un nombre de Schmidt de l'ordre de 0,9.

Le principe de conservation de la masse impose une contrainte supplémentaire sur les flux de diffusion moléculaire :

$$\sum_{i=1}^{N_e} \mathbf{J}_i = 0. \tag{2.49}$$

Sachant que cette condition n'est généralement pas respectée en raison des lois de diffusion très approchées, uniquement $N_e - 1$ équations sur les espèces sont résolues. La masse totale est ensuite conservée en fixant la masse de la dernière espèce (souvent N_2) suivant :

$$Y_{N_e} = 1 - \sum_{i=1}^{N_e-1} Y_i. \tag{2.50}$$

A noter que cette relation permet effectivement d'assurer la conservation de la masse, mais ne permet pas de vérifier le principe de conservation des atomes.

La capacité calorifique à pression constante de chaque espèce est évaluée à partir de polynômes de degré 7, ce qui est différent de la méthode employée par CHEMKIN (polynômes de degré 5) :

$$c_{p,i} = \sum_{k=0}^{7} a_{i,k} \left(\frac{T}{1000} \right)^k. \tag{2.51}$$

Le terme source chimique apparaissant dans l'équation de conservation des espèces est exprimé suivant la loi d'action de masse présentée précédemment (équation (2.29)). Les vitesses de réaction directes et inverses sont données par les lois d'Arrhenius.

Méthodes numériques :

Les calculs présentés dans ce mémoire ont été réalisés à l'aide d'une méthode d'intégration temporelle explicite. Dans le cas présent, c'est un schéma de Runge-Kutta à deux étapes qui a été retenu. Ce schéma est précis à l'ordre 2 en temps.

La limite de stabilité des schémas explicites est fixée par le critère CFL :

$$CFL = \frac{|u + a|\Delta t}{\Delta x}, \tag{2.52}$$

où a est la vitesse du son locale, u la vitesse de l'écoulement, Δx la taille de la maille traversée et Δt le pas de temps. Dans le cas du schéma Runge-Kutta 2, le nombre de CFL doit rester inférieur à $0,5$ pour assurer la stabilité numérique des calculs.

Dans le cadre des simulations présentées par la suite, les pas de temps que nous avons dû utiliser étaient toujours contraints par le critère CFL et non par la chimie. En effet, comme nous le verrons par la suite, la méthode FPI adaptée au code CEDRE permet de ne transporter que les espèces majoritaires en masse dans l'écoulement. Or, ces espèces possèdent généralement des temps caractéristiques chimiques relativement grands comparés aux espèces radicalaires produites et détruites dans le front de flamme. Ainsi, pour les conditions de calcul étudiées au cours de cette thèse, les temps chimiques des espèces transportées par CEDRE se sont toujours révélés être supérieurs aux temps limités par le critère CFL.

En pratique, il est possible, sous certaines conditions et pour quelques espèces, que les temps chimiques des espèces considérées soient inférieurs au temps défini par le nombre de CFL. Dans ces conditions, le pas de temps choisi pour la résolution temporelle du système doit être inférieur au temps chimique le plus faible. On estime ainsi en général que toutes les échelles de temps chimiques doivent être résolues pour assurer la stabilité de la méthode numérique, soit :

$$\Delta t << \frac{1}{|\Re(\Lambda_1)|}, \tag{2.53}$$

où $|\Re(\Lambda_1)|$ représente la partie réelle de la valeur propre la plus grande en valeur absolue de la matrice jacobienne :

$$J_{ij} = \frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial Y_j}. \tag{2.54}$$

L'inverse de ce terme représente donc le temps caractéristique chimique le plus faible rencontré au sein du mélange, indépendamment de l'espèce concernée.

Dans le code CEDRE, l'intégration temporelle des équations peut également être réalisée à l'aide de schémas implicites [11]. L'intérêt de ces méthodes est qu'elles restent stables jusqu'à des nombres de CFL très élevés. Elles nécessitent la linéarisation des équations conservées, et donc l'évaluation de matrices jacobiennes. Dans CEDRE, le système implicite est résolu à l'aide de la méthode GMRES (gradients conjugués).

Lors des simulations FPI présentées, on a été obligé, dans certains cas, d'employer des pas de temps extrêmement faibles (de l'ordre de 10^{-8} s). L'utilisation de méthodes implicites permettrait d'augmenter significativement ces pas de temps. Cette procédure nécessiterait cependant l'évaluation des matrices jacobiennes des termes sources relatifs à chaque espèce, ce qui peut se révéler relativement fastidieux.

Toutefois, il faut garder à l'esprit ici qu'une implicitation par linéarisation comme proposé précédemment permettrait effectivement de s'affranchir du critère e CFL mais pas du critère chimique. Ainsi, dans certains cas, l'utilisation d'une méthode d'intégration implicite peut ne pas être pertinente si la limitation liée au temps chimique reste trop contraignante. Ceci est par exemple le cas lors des simulations de la configuration PRECCINSTA introduite dans le chapitre 6[1]. L'implicitation des termes sources chimiques FPI n'est pas abordée au cours de ce mémoire mais pourrait s'avérer nécessaire à l'avenir.

CEDRE utilise une méthode de discrétisation spatiale volumes finis, où les quantités conservées sont évaluées au centre des cellules. Les méthodes employées permettent la résolution des équations transportées sur des maillages non structurés généraux formés de polyèdres quelconques. Des interpolations de type MUSCL d'ordre 2 sont réalisées en espace, associées à un schéma décentré de type Roe.

Plus spécifiquement, les flux numériques sont calculés par la méthode ODFI et les interpolations ont été réalisées par la méthode de Green 4 [1]. De plus, la majorité des calculs présentés, mis à part le calcul PRECCINSTA partiellement prémélangé, ont été menés sans limitation des gradients de mailles.

2.4.2 Stratégie de couplage

Le couplage entre le code de CFD et les tables FPI peut se faire de deux façons distinctes (ces deux approches ont été identifiées par Poinsot et Veynante [174] pour les modèles à flammelettes de diffusion stationnaires et discutées par Galpin *et al.* [100] dans le cadre du modèle FPI) :

- la première méthode consiste en un couplage "direct", ou couplage fort, via les grandeurs primitives. Dans le code de CFD, la quantité de mouvement, l'énergie, la masse volumique, la variable d'avancement et un éventuel scalaire passif sont transportés. Les fractions massiques Y_i ainsi que, dans certains cas, la température, sont directement interpolées dans la table ;
- la seconde méthode consiste en un couplage "indirect", ou couplage faible, via les termes sources. Dans le code, la quantité de mouvement, l'énergie, les fractions massiques et un éventuel scalaire passif sont transportés. Les taux de réaction chimiques des espèces sont interpolés dans la table et introduits dans les équations de transport correspondantes.

La figure 2.8 montre une représentation schématique des deux modes de couplages possibles entre les tables FPI et un code de CFD.

Jusqu'à présent, FPI n'a principalement été utilisé que dans le cadre de codes de laboratoire (Domingo *et al.* [56, 57]). La facilité d'implémentation de la méthode de couplage "directe" ainsi que l'architecture des codes utilisés dans ces travaux ont permis l'emploi de cette dernière.

[1] L'utilisation de méthodes implicites peut cependant se révéler intéressante lors de la simulation de PRECCINSTA en prémélange partiel.

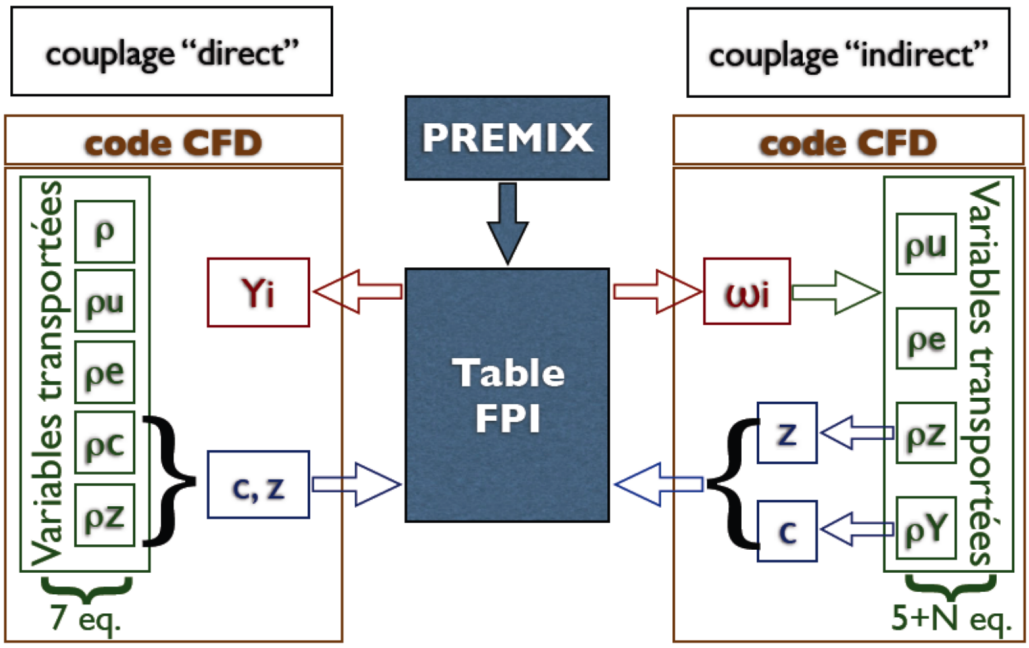

FIG. 2.8 – *Représentation des modes de couplage "direct" et "indirect" possibles entre les tables FPI et un code CFD.*

En ce qui concerne le travail présenté ici, le code utilisé nous a conduit à privilégier l'implémentation de la méthode de couplage "indirecte". En effet, CEDRE est un code dédié aux écoulements de type industriels, et, de ce fait, il utilise des méthodes et des modèles spécifiques à ce type d'applications. En particulier, afin de traiter une vaste gamme de problèmes rencontrés dans l'industrie, CEDRE possède des solveurs dédiés à la caractérisation de certains phénomènes physiques tels que le rayonnement ou le transport de particules liquides.

Dans ces deux cas, il est souvent nécessaire de résoudre des équations de transport pour les espèces. Par exemple, lorsque l'on considère la combustion d'un carburant liquide tel que le kérosène, les termes sources liés à l'évaporation des gouttes doivent être introduits dans les équations de transport du carburant.

Très récemment, FPI a été utilisé dans un cadre très similaire avec le code AVBP (Galpin [83], [100]), ce qui a également nécessité l'emploi d'une méthode de couplage "indirecte".

Une des principales caractéristiques du couplage faible est qu'il ne requière pas nécessairement la résolution d'une équation de transport pour la variable d'avancement. En effet, lorsque les espèces intervenant dans la définition de c sont transportées, cette-dernière peut être directement recalculée algébriquement. En revanche, l'équation de transport sur le scalaire z doit impérativement être résolue lorsque celui-ci est nécessaire. Les raisons nous imposant ce choix sont explicitées dans la section 2.4.4.

Malgré son intérêt notable, le mode de couplage faible n'est pas sans difficultés :

- en premier lieu l'évaluation dans les deux codes des propriétés thermodynamiques et de transport doivent être vérifiées de manière à assurer la cohérence entre ceux-ci ;
- pour des raisons de coût de calcul, le nombre d'espèces transportées par CEDRE doit être limité, ce qui nous contraint à déterminer un jeu d'espèces réduit à transporter ;
- la stratégie de couplage retenue peut être responsable de dérives à travers le front de flamme pouvant conduire à une composition des gaz brûlés erronée à l'équilibre. Ceci nous a poussé à développer un modèle de correction des termes sources interpolés améliorant la consistance du couplage.

2.4.3 Thermodynamique et coefficients de transport

Les propriétés thermodynamiques des espèces sont calculées à partir de polynômes de degrés 7 dans CEDRE et 5 dans PREMIX [116]. Il est donc nécessaire de vérifier que les flux calculés par les lois de CHEMKIN (tables NASA-Lewis [138]) et ceux obtenus par CEDRE restent consistants (voir figure 2.9).

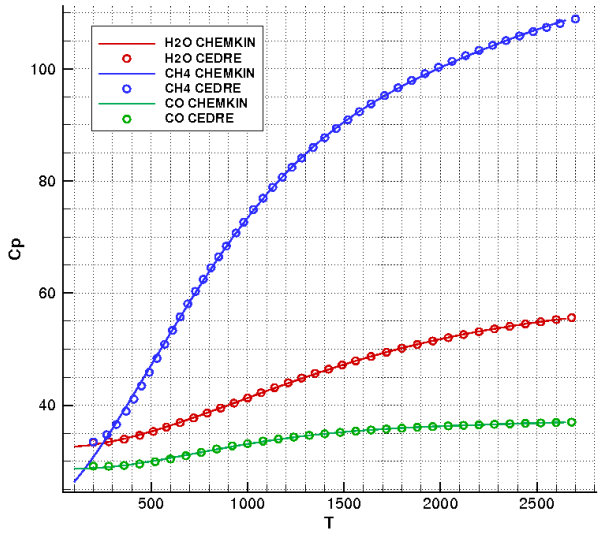

FIG. 2.9 – *Comparaison de l'évolution du c_p en fonction de la température, calculé à partir des données CHEMKIN et des polynômes approchés de CEDRE.*

Les coefficients de viscosité dynamique des espèces sont généralement délicats à modéliser (plus que les coefficients de diffusion de masse et d'énergie). Dans le cadre de ce travail, ceux-ci sont évalués par la loi de Sutherland dont les paramètres ont été déterminés par régression sur les tables utilisées par CHEMKIN. Ceci nous assure que les viscosités employées par CEDRE et CHEMKIN restent strictement identiques quelle que soit la température.

Pour que les calculs PREMIX et CEDRE restent compatibles, il faut également vérifier la cohérence des propriétés de transport utilisées par CEDRE et CHEMKIN (sachant que les modèles utilisés par les deux codes sont différents). Pour cela, une procédure est mise en place de sorte que les nombres de Schmidt et de Prandtl utilisés par CEDRE soient déterminés à partir de données CHEMKIN.

Les coefficients de transport relevés au sein des gaz brûlés issus d'un calcul PREMIX préliminaire sont ainsi utilisés pour évaluer les valeurs recherchées de Sc_i et Pr_i. Le tableau 2.1 récapitule les nombres de Lewis ($Le_i = Sc_i/Pr_i$) obtenus pour certaines espèces dans le cas d'une flamme méthane/air stœchiométrique.

Espèces	CH_4	O_2	N_2	H_2O	CO_2	CO
Lewis	0,934	1,05	1,034	0,755	1,3	1,056
Prandtl	0,725	0,705	0,703	0,722	0,724	0,71
Schmidt	0,677	0,739	0,727	0,545	0,946	0,75

TAB. 2.1 – *Nombres de Lewis, Prandtl et Schmidt déterminés pour un prémélange méthane/air stœchiométrique.*

La figure 2.10 compare les coefficients de diffusion par espèce et le coefficient de conductivité thermique moyens obtenus à travers une flamme méthane/air stœchiométrique à l'aide des modèles de PREMIX et de CEDRE (ces calculs ont été effectués à l'aide de PREMIX). Les coefficients de diffusion

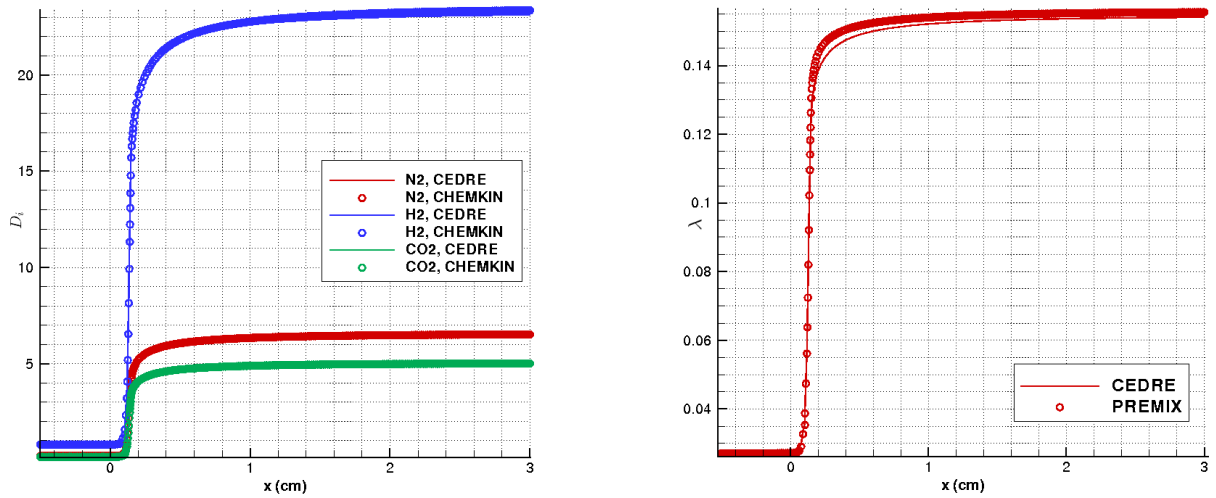

FIG. 2.10 – *Evolutions de coefficients de diffusion moyens (à gauche) et du coefficient de diffusion thermique moyen (à droite) calculés avec PREMIX et les modèles de flux de CHEMKIN et de CEDRE.*

de masse obtenus par les deux méthodes sont très proches, alors que les conductivités thermiques présentent des écarts plus importants, mais toujours inférieurs à 5%. Ces observations nous permettent de conclure que les modèles employés dans CEDRE bien que très approchés, fournissent une très bonne approximation des données utilisées par CHEMKIN.

Des calculs de flammes laminaires méthane/air à richesse variant de 0,8 à 1,75 ont été réalisés à l'aide de PREMIX (mécanisme réactionnel de Smooke et Giovangigli [203]) en utilisant les deux méthodes d'évaluation des flux de diffusion. Les profils de Y_{O_2}, Y_{CO_2} et Y_{CO} issus de ces calculs sont présentés sur la figure 2.11. La structure interne des flammes n'est que très peu modifiée par l'utilisation des lois approchées de CEDRE. Les différences majeures apparaissent au niveau du pic de CO qui peut se trouver légèrement surestimé et décalé lorsque le modèle de diffusion de CEDRE est appliqué. On remarque par ailleurs que l'état d'équilibre n'est pas modifié par le choix du modèle de diffusion, hormis dans le cas de O_2 à $\varphi = 0,8$. Le choix du mode de calcul des flux de diffusion thermique et de masse n'a donc que peu d'influence sur la structure des flammes simulées.

Ces résultats recoupent les conclusions obtenues par le passé notamment par Coffee et Heimerl [47], [48], et Ern et Giovangigli [71], sur des flammes méthane/air et hydrogène/air. Pour ces dernières, le problème est toutefois légèrement différent compte tenu du fait que les effets Dufour et Soret apportent une contribution particulièrement importante.

2.4.4 Choix des espèces transportées

Comme nous l'avons vu précédemment, le code CEDRE nécessite la résolution d'équations de transport portant sur les espèces du mélange. De ce fait, le rôle principal des tables FPI est de fournir au code les termes sources chimiques relatifs aux espèces transportées ainsi que les fractions massiques des espèces minoritaires. Toutefois, pour des raisons de coût de calculs et d'occupation mémoire, la résolution numérique des équations de CEDRE ne doit porter que sur un nombre limité d'espèces. Ces dernières doivent alors être choisies de manière pertinente.

Dans l'adaptation du modèle FPI à CEDRE, il faudra par la suite faire la distinction entre le jeu d'espèces complet vu par PREMIX et le jeu d'espèces réduit transporté par CEDRE.

Le fait de ne transporter qu'un jeu réduit d'espèce ne permet pas de vérifier la conservation de la

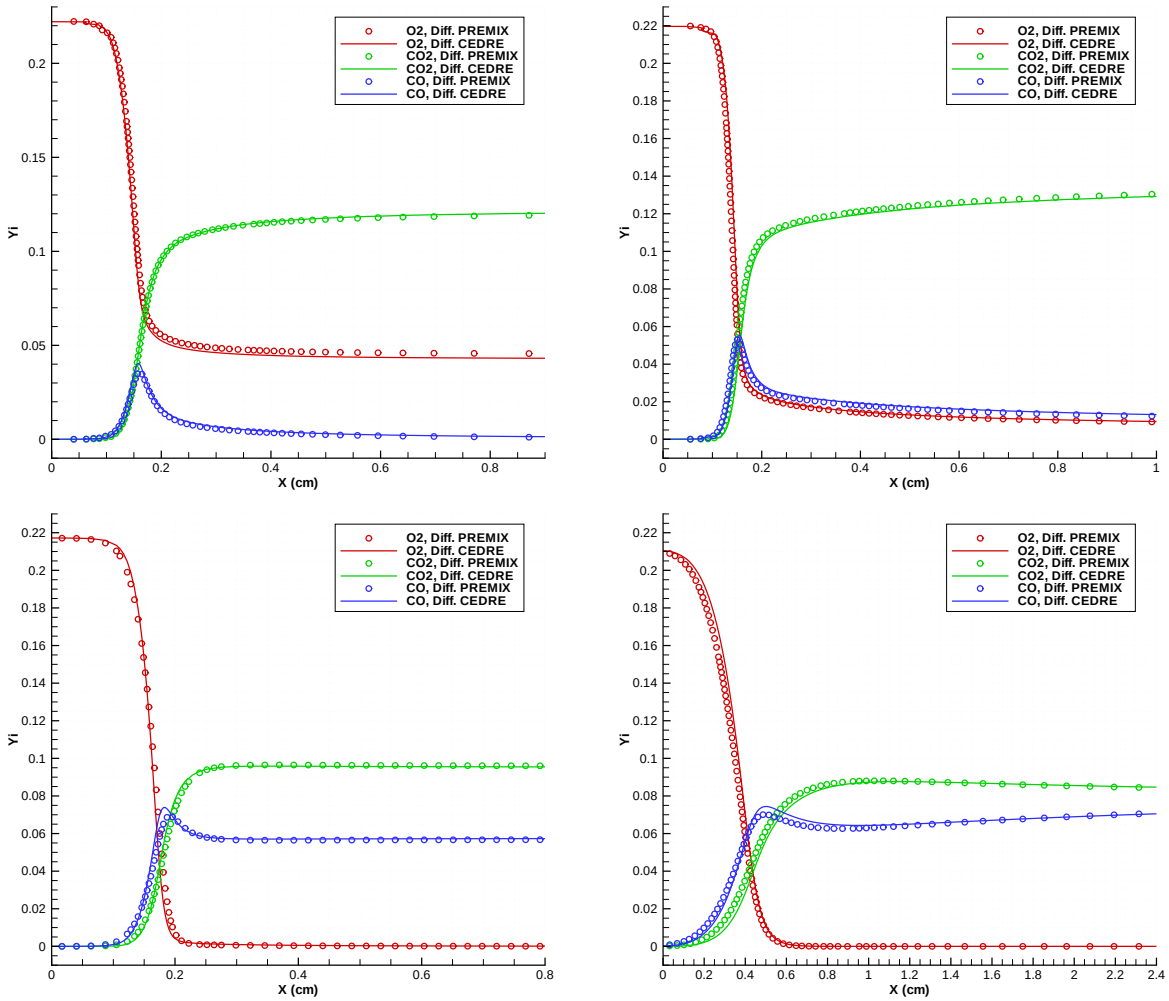

FIG. 2.11 – *Profils des fractions massiques de O_2, CO_2 et CO obtenus avec PREMIX en utilisant les lois de diffusion de CHEMKIN et de CEDRE. En haut à gauche, $\varphi = 0{,}8$, en haut à droite, $\varphi = 1$, en bas à gauche, $\varphi = 1{,}25$, en bas à droite, $\varphi = 1{,}75$.*

masse, ce qui peut se traduire en terme de production chimique par :

$$\sum_{i=1}^{N_e} \dot{\omega}_i^{tab} \neq 0. \tag{2.55}$$

De manière à limiter au maximum les erreurs réalisées, il est nécessaire que le jeu d'espèces transporté représente la majorité de la masse totale du système chimique complet (la masse que représente les espèces non transportées doit être faible). Dans un premier temps, le choix le plus pertinent consiste donc à ne retenir que les espèces majoritaires en masse, soit, dans le cas d'une combustion méthane/air : CH_4, O_2, CO_2, CO, H_2O et N_2.

En pratique, pour déterminer de manière automatique le jeu d'espèces optimal à transporter, on peut suivre la méthodologie initialement proposée par Galpin [83], exposée en annexe C. Cette méthode se fonde sur deux critères concrets pour déterminer si le système transporté retenu est suffisant et cohérent avec les principes de conservation de la masse et de l'énergie. Suivant cette méthode, l'adjonction d'une ou de plusieurs espèces au jeu d'espèces supplémentaires déterminé ci-dessus, peut s'avérer nécessaire.

Sous certaines conditions, la masse résiduelle que représente les espèces non transportées par le code de CFD peut être assez élevée et entraîner certaines difficultés lors de l'utilisation du modèle FPI

du fait de (2.55). Dans ce contexte, une procédure spécifique, décrite en annexe C, doit être employée afin d'assurer une répartition cohérente de la masse résiduelle sur les espèces transportées (suivant le principe de conservation des atomes). Après différents tests, nous avons toutefois conclu que, pour les applications visées dans ce mémoire, l'utilisation de cette procédure ne se justifiait pas et que le transport des seules espèces majoritaires énoncées précédemment était suffisant.

Suivant la définition retenue dans ce mémoire, le traceur de mélange z dépend directement des fractions atomiques de C et de H. Dans ce contexte, si la conservation des atomes n'est pas assurée par le modèle (ce qui est le cas suivant l'approche retenue), z ne peut pas être évalué directement de façon consistante. La résolution d'une équation de transport pour z permet donc de s'affranchir de cette difficulté et s'avère nécessaire dans le contexte du modèle introduit.

2.4.5 Cohérence des taux de réaction tabulés

Problématique :

Du fait du couplage faible imposé entre les tables FPI et le solveur CFD, des inconsistances entre les termes sources chimiques interpolés et les équations de transport résolues peuvent apparaître. Ces incohérences sont liées au fait que la variable d'avancement et les espèces transportées se propagent en réalité avec des vitesses différentes. Cette propriété remet ainsi en question l'hypothèse suivant laquelle toutes les grandeurs thermochimiques tabulées, et en particulier les taux de production chimiques, peuvent être reliées uniquement à la variable c.

A partir du moment où les espèces sont transportées, on introduit implicitement leurs vitesses de propagation dépendant à la fois de la diffusion moléculaire et des réactions chimiques. Dans FPI, les taux de production de ces espèces sont évalués suivant une variable d'avancement unique se propageant avec une vitesse qui lui est propre. Ceci revient à supposer que toutes les espèces se propagent suivant cette même vitesse. Il s'ensuit une inconsistance de la méthode dans le cadre du couplage faible retenu.

On se propose dans la suite de mettre en évidence l'erreur réalisée par cette hypothèse en se basant sur les équations résolues.

Cas parfaitement prémélangé :

La manipulation des équations de conservation des espèces, pour lesquelles les termes sources chimiques sont tirés de tables en fonction de la seule variable d'avancement, permet de mettre en évidence l'origine des écarts observés. Pour la démonstration, on se place dans le contexte de flammes de prémélange planes monodimensionnelles.

Les équations de conservation de c et des fractions massiques de chacune des espèces transportées peuvent s'écrire :

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho u c\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x}\right) - \rho \dot{\omega}_c\left(c\right) = 0, \tag{2.56}$$

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho u Y_i\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D \frac{\partial Y_i}{\partial x}\right) - \rho \dot{\omega}_i\left(c\right) = 0, \tag{2.57}$$

où on a supposé l'égalité des coefficients de diffusion : $D_c = D_i = D$.

Il est possible de réécrire l'équation d'évolution des Y_i dans l'espace des phases (ayant pour unique dimension c) en procédant aux changements de variables suivants [57] :

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\partial Y_i}{\partial c}\frac{\partial c}{\partial t}, \tag{2.58}$$

$$\frac{\partial Y_i}{\partial x} = \frac{\partial Y_i}{\partial c}\frac{\partial c}{\partial x}, \tag{2.59}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D\frac{\partial Y_i}{\partial x}\right)=\rho D\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)^2\frac{\partial^2 Y_i}{\partial c^2}+\frac{\partial Y_i}{\partial c}\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D\frac{\partial c}{\partial x}\right), \tag{2.60}$$

où $\chi_c = D\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)^2$ est le taux de dissipation scalaire de c.

Ces expressions sont ensuite introduites dans l'équation (2.57), en utilisant la relation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\partial \rho u}{\partial x}=0, \tag{2.61}$$

soit :

$$\begin{aligned}\rho\frac{\partial Y_i}{\partial c}\frac{\partial c}{\partial t}+\rho u\frac{\partial Y_i}{\partial c}\frac{\partial c}{\partial x}-\left[\rho\chi_c\frac{\partial^2 Y_i}{\partial c^2}+\frac{\partial Y_i}{\partial c}\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D\frac{\partial c}{\partial x}\right)\right]-\rho\dot{\omega}_i(c) &= 0,\\ \frac{\partial Y_i}{\partial c}\left[\frac{\partial \rho c}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(\rho u c)-\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D\frac{\partial c}{\partial x}\right)\right]-\rho\dot{\omega}_i(c)-\rho\chi_c\frac{\partial^2 Y_i}{\partial c^2} &= 0.\end{aligned} \tag{2.62}$$

On trouve finalement :

$$\underbrace{\frac{\partial \rho c}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(\rho u c)-\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D\frac{\partial c}{\partial x}\right)}_{=\rho\dot{\omega}_c}-\frac{1}{\partial Y_i/\partial c}\left(\rho\dot{\omega}_i(c)+\rho\chi_c\frac{\partial^2 Y_i}{\partial c^2}\right)=0. \tag{2.63}$$

Par identification avec l'équation de conservation de c, on peut établir que le taux de formation de la variable d'avancement apparaissant dans (2.56), est équivalent à :

$$\dot{\omega}_c(c)=\frac{1}{\partial Y_i/\partial c}\left(\dot{\omega}_i(c)+\chi_c\frac{\partial^2 Y_i}{\partial c^2}\right), \tag{2.64}$$

soit :

$$\dot{\omega}_i(c)=\dot{\omega}_c(c)\frac{\partial Y_i}{\partial c}-\chi_c\frac{\partial^2 Y_i}{\partial c^2}. \tag{2.65}$$

Le taux de production lié à l'espèce i dans l'espace des phases dépend d'un terme source chimique, $\dot{\omega}_c$, et d'un terme de diffusion, représenté par le taux de dissipation scalaire de c. Ce dernier terme permet de tenir compte de la diffusion de Y_i à travers les iso-surfaces de c. Cette expression correspond en fait à la valeur exacte des $\dot{\omega}_i$ à réintroduire dans les équations de conservation des espèces.

On cherche maintenant à quantifier l'information perdue lorsque les taux de réaction des espèces transportées sont interpolés dans la table FPI. Pour cela, on évalue la différence $\dot{\omega}_i(x,t)-\dot{\omega}_i^{tab}(c,t)$, en supposant qu'à l'instant initial, en chaque point, on a :

$$Y_i(x)=Y_i^{tab}(c,t). \tag{2.66}$$

En suivant la définition de la vitesse locale de déplacement des iso-surfaces liées à chaque espèce (notée S_d^i) et à c (S_d^c), donnée par exemple par Echekki et Chen [66], et en se servant de plus de la relation (2.63), on trouve :

$$\begin{aligned}\rho\left[\dot{\omega}_i(x,t)-\dot{\omega}_i^{tab}(c,t)\right] &= \left[\rho\dot{\omega}_i(x,t)+\nabla.(\rho D\nabla Y_i)\right]-\frac{\partial Y_i}{\partial c}\left[\rho\dot{\omega}_c(c,t)+\nabla.(\rho D\nabla c)\right]\\ &= \rho\left[\frac{\rho\dot{\omega}_i(x,t)+\nabla(\rho D\nabla Y_i)}{\rho|\nabla Y_i|}|\nabla Y_i|-\frac{\partial Y_i}{\partial c}\frac{\rho\dot{\omega}_c(c,t)+\nabla(\rho D\nabla c)}{\rho|\nabla c|}|\nabla c|\right]\\ &= \rho\left(S_d^i|\nabla Y_i|-\frac{\partial Y_i}{\partial c}S_d^c|\nabla c|\right),\end{aligned} \tag{2.67}$$

avec :

$$S_d^i=\frac{\rho\dot{\omega}_i+\rho D_i\nabla Y_i}{\rho|\nabla Y_i|}. \tag{2.68}$$

Sachant que l'on a :

$$|\nabla c| = \frac{\nabla c.\nabla c}{|\nabla c|} \quad \text{et} \quad |\nabla Y_i| = \frac{\nabla Y_i.\nabla Y_i}{|\nabla Y_i|}, \tag{2.69}$$

et en introduisant le changement de variable $\nabla Y_i = \frac{\partial Y_i}{\partial c}\nabla c$ dans l'expression (2.67), on obtient :

$$\dot{\omega}_i(x,t) - \dot{\omega}_i^{tab}(c,t) = \left(S_d^i \frac{\nabla Y_i}{|\nabla Y_i|} - S_d^c \frac{\nabla c}{|\nabla c|} \right) .\nabla Y_i. \tag{2.70}$$

En introduisant la normale aux iso-surfaces d'une grandeur ϕ, n_ϕ, définie par :

$$n_\phi = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}, \tag{2.71}$$

on trouve pour finir :

$$\dot{\omega}_i(x,t) - \dot{\omega}_i^{tab}(c,t) = \left(S_d^i n_i - S_d^c n_c\right) .\nabla Y_i = \mathcal{Q}_i. \tag{2.72}$$

Dans le cadre d'un couplage faible entre les tables FPI et le code de CFD, les iso-surfaces de chaque espèce se déplacent à la même vitesse que c, soit $S_d^c = S_d^i$. Toutefois, cette proposition n'est pas vérifiée en pratique du fait des temps chimiques caractéristiques parfois très différents et de la diffusion différentielle. Dans ces conditions, le terme $\mathcal{Q}_i$ est non nul.

A noter que $\mathcal{Q}_i$ a également été introduit par De Goey *et al.* [101] sans en donner l'expression exacte. Le développement proposé ici introduit donc de façon formelle ce terme et en donne une démonstration. Van Oijen [155] retrouve différemment ce résultat en comparant les équations cinématiques de propagation des iso-surfaces de Y_i et de c.

Dans l'expression de $\mathcal{Q}_i$ donnée par Van Oijen, un terme permettant de prendre en compte la diffusion non orthogonale des espèces à travers les iso-surfaces de c apparaît (voir figure 2.12). Ce terme permet de prendre en compte des effets multidimensionnels sur la propagation des iso-surfaces de Y_i. Il peut être retrouvé en omettant l'hypothèse de flamme 1D réalisée au début de cette section.

FIG. 2.12 – *Effets des différentes contributions du terme $\mathcal{Q}_i$ sur les iso-surfaces de c (en noir) et des Y_i (en gris) à travers une flamme de prémélange laminaire [155].*

Cas partiellement prémélangé :

La démonstration exposée précédemment est étendue aux flammes partiellement prémélangées, ce qui constitue une originalité par rapport aux travaux de De Goey *et al.* [101] et Van Oijen [155].

Dans le contexte de la combustion partiellement prémélangée, la structure des flammes est décrite par deux paramètres : z et c. L'introduction de la fraction de mélange peut accentuer les décalages

observés au niveau de la réponse chimique des flammes simulées avec FPI. De manière à quantifier l'effet de l'adjonction de z, on réécrit l'équation d'évolution de Y_i dans l'espace des phases en posant [57] (sous l'hypothèse d'equidiffusivité) :

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\partial Y_i}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial Y_i}{\partial c}\frac{\partial c}{\partial t}, \tag{2.73}$$

$$\frac{\partial Y_i}{\partial x} = \frac{\partial Y_i}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial x} + \frac{\partial Y_i}{\partial c}\frac{\partial c}{\partial x}, \tag{2.74}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D\frac{\partial Y_i}{\partial x}\right) = \rho D\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} + \rho D\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)^2\frac{\partial^2 Y_i}{\partial c^2} + \frac{\partial Y_i}{\partial z}\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D\frac{\partial z}{\partial x}\right) \\ + \frac{\partial Y_i}{\partial c}\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D\frac{\partial c}{\partial x}\right) + 2\rho D\left(\frac{\partial z}{\partial x}\frac{\partial c}{\partial x}\right)\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z\partial c},\end{aligned} \tag{2.75}$$

où les termes $D\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)^2$, $D\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2$ et $D\left(\frac{\partial c}{\partial x}\frac{\partial z}{\partial x}\right)$ représentent respectivement les taux de dissipation scalaires de c (χ_c), de z (χ_z), et le taux de dissipation scalaire croisé entre c et z ($\chi_{z,c}$). Bray *et al.* [32] ont montré que la dépendance des Y_i en z et c, entraîne l'apparition de nouveaux termes dans l'équation de conservation de c, généralement négligés.

En procédant au changement de variable au sein de l'équation de transport des Y_i et en utilisant l'équation de conservation du scalaire z, on trouve :

$$\begin{aligned}\frac{\partial Y_i}{\partial c}\underbrace{\left[\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \frac{\partial \rho u c}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D\frac{\partial c}{\partial x}\right)\right]}_{=\rho\dot{\omega}_c} + \frac{\partial Y_i}{\partial z}\underbrace{\left[\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u z}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D\frac{\partial z}{\partial x}\right)\right]}_{=0} \\ - \left[\rho\chi_c\frac{\partial^2 Y_i}{\partial c^2} + \rho\chi_z\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} + 2\rho\chi_{z,c}\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z\partial c}\right] - \rho\dot{\omega}_i = 0.\end{aligned} \tag{2.76}$$

Finalement, par identification entre cette dernière équation et l'équation de conservation de c, il vient :

$$\rho\dot{\omega}_i(z,c) = \rho\dot{\omega}_c(z,c)\frac{\partial Y_i}{\partial c} - \rho\chi_c\frac{\partial^2 Y_i}{\partial c^2} - \rho\chi_z\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} - 2\rho\chi_{z,c}\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z\partial c}. \tag{2.77}$$

De la même façon que dans le cas parfaitement prémélangé, les erreurs intervenant lors de l'interpolation directe des termes sources dans la table peuvent être quantifiées par :

$$\dot{\omega}_i(x,t) - \dot{\omega}_i(z,c) = \left(S_d^i n_i - S_d^c n_c\right).\nabla Y_i - \frac{1}{\rho}\frac{\partial Y_i}{\partial z}\nabla\left(\rho D\nabla z\right) + \chi_z\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} + 2\chi_{z,c}\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z\partial c} = \mathcal{Q}_i, \tag{2.78}$$

où la vitesse de déplacement de c est exprimée comme dans [32], et contient des termes additionnels introduits par la dépendance de c en z :

$$S_d^c = \frac{1}{\rho|\nabla c|}\left[\rho\dot{\omega}_c + \nabla\left(\rho D\nabla c\right) + \frac{1}{\partial Y_i/\partial c}\left(\rho\chi_z\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} + 2\rho\chi_{z,c}\frac{\partial^2 Y_i}{\partial z\partial c}\right)\right]. \tag{2.79}$$

En comparant l'expression (2.78) à (2.72), différents termes apparaissent pour tenir compte des gradients de Y_i à travers les iso-surfaces de z.

Influence de l'étirement :

Si la flamme simulée est courbée et étirée par les contraintes aérodynamiques qu'elle subit, la contribution de ces phénomènes peuvent s'ajouter à $\mathcal{Q}_i$ et perturber d'avantage sa propagation.

Après décomposition des équations de conservation des espèces, De Goey *et al.* [101], [102], introduisent un terme d'étirement correspondant à la variation du débit de masse à travers la flamme :

$$\rho K = \nabla \left(\rho S_d^c n \right). \tag{2.80}$$

Au final, on obtient l'équation suivante pour la variable d'avancement [157] (dans le cas parfaitement prémélangé) :

$$\frac{\partial A_S \dot{m} c}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(A_S \rho D \frac{\partial c}{\partial \xi} \right) = A_S \dot{\omega}_c - A_S \rho K c + \mathcal{Q}_i, \tag{2.81}$$

où ξ est la coordonnée normale au front de flamme, $\dot{m}$ est le débit massique et A_S représente un petit élément de surface. Les variations d'orientation de A_S expriment la courbure de la flamme. Cette relation représente l'équation d'évolution exacte d'une flamme laminaire 1D étirée, dans laquelle les taux de réaction chimiques seraient fournis par une table.

2.4.6 Correction des termes sources interpolés

Nécessité d'une correction :

Trois raisons principales susceptibles de perturber le comportement du modèle FPI dans le cadre d'un couplage faible avec le code CEDRE ont été énoncées précédemment :

- la cohérence du calcul des flux de diffusion entre PREMIX et CEDRE n'est pas toujours observée ;
- la conservation des atomes n'est pas forcément vérifiée (suivant (2.55)) lorsqu'un jeu d'espèces réduit est transporté ;
- les termes sources chimiques interpolés dans les tables sont incohérents avec les équations de transport des espèces résolues par CEDRE.

Les premières simulations de flammes laminaires prémélangées avec CEDRE ont mis en évidence l'incapacité de l'approche définie à reproduire correctement la structure interne des flammes étudiées (voir figure 2.13), pouvant conduire à une composition des gaz brûlés différente de l'état d'équilibre attendu. Les écarts observés sont clairement liés aux trois éléments cités précédemment, mais déterminer leur contribution respective s'avère extrêmement compliqué et n'est pas nécessaire pour la suite du travail effectué.

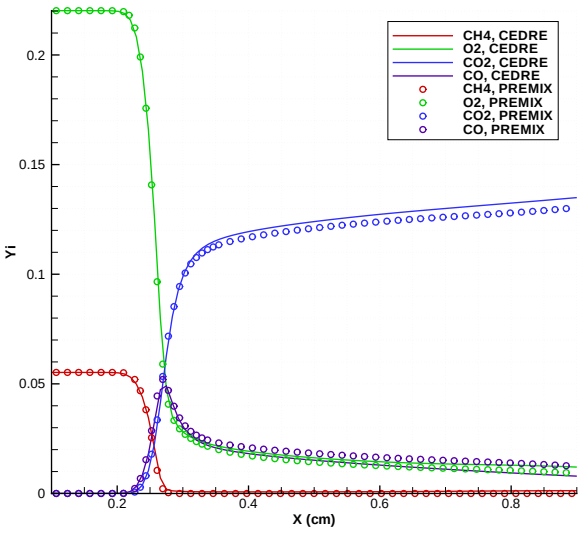

FIG. 2.13 – *Comparaison des profils d'espèces majoritaires obtenus sur une flamme méthane/air stœchiométrique avec CEDRE utilisant la méthode FPI d'origine, et le code PREMIX.*

De manière à corriger les erreurs observées et à compenser les effets des trois phénomènes identifiés ci-dessus, le développement d'un modèle de correction des termes sources a été nécessaire.

Modèle de correction des termes sources interpolés :

Le modèle proposé est basé sur l'étude de la réponse des termes sources interpolés soumis à des perturbations chimiques suivant les concentrations des espèces présentes dans le mélange [193]. On suppose ainsi que les déviations des trajectoires des concentrations transportées par CEDRE sont uniquement dues à des phénomènes chimiques.

On linéarise donc les $\dot{\omega}_i$ autour d'un état de référence (ici, l'état tabulé donné par $\dot{\omega}_i^{tab}$). Il vient :

$$\dot{\omega}_i = \dot{\omega}_i^{tab} - \sum_{j=1}^{N_e} \left.\frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial Y_j}\right|^{tab} \left(Y_j^{tab} - Y_j\right) + \mathcal{O}\left[\left(Y_i^{tab} - Y_i\right)^2\right], \tag{2.82}$$

ou, sous une forme vectorielle :

$$\boldsymbol{\dot{\omega}} = \boldsymbol{\dot{\omega}^{tab}} - \nabla_Y^{tab}\boldsymbol{\dot{\omega}} \left(\boldsymbol{Y^{tab}} - \boldsymbol{Y}\right) + \mathcal{O}\left[\left(\boldsymbol{Y^{tab}} - \boldsymbol{Y}\right)^2\right], \tag{2.83}$$

où ∇_Y^{tab} représente un gradient pris suivant le vecteur $\boldsymbol{Y^{tab}}$.

Dans un premier temps, on suppose que les termes d'ordres supérieurs peuvent être négligés. En faisant ensuite l'hypothèse que toutes les espèces ne dépendent que de c (et sont donc indépendantes les unes des autres), il résulte que les termes hors diagonaux de la matrice jacobienne, notée $\mathbf{J}$, sont nuls. On trouve alors :

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_i &= \dot{\omega}_i^{tab} - \left.\frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial Y_i}\right|^{tab} \left(Y_i^{tab} - Y_i\right) \\ &= \dot{\omega}_i^{tab} - J_{ii}^{tab}\left(Y_i^{tab} - Y_i\right). \end{aligned} \tag{2.84}$$

Les inverses des termes diagonaux de cette matrice jacobienne définissent des temps caractéristiques chimiques relatifs à chaque espèce (Lovas *et al.* [130]) :

$$\tau_c^i = -\frac{1}{J_{ii}^{tab}}. \tag{2.85}$$

Ainsi, la relation (2.84) peut être réécrite sous la forme suivante [193] :

$$\dot{\omega}_i = \dot{\omega}_i^{tab} + \underbrace{\frac{Y_i^{tab} - Y_i}{\tau_c^i}}_{\mathcal{W}_i\left(Y_i, Y_i^{tab}, \tau_c^i\right)}, \tag{2.86}$$

où $\dot{\omega}_i$ représente le terme source chimique effectif de l'espèce i qui doit être utilisé dans CEDRE pour corriger les éventuelles perturbations.

Le terme $\mathcal{W}_i$ permet de relaxer les Y_i transportés vers leurs trajectoires dans l'espace des phases tabulées, avec un temps caractéristique τ_c^i. L'évaluation de ce temps de relaxation constitue un point crucial dans le développement du modèle et doit être discutée. Ce temps dépend de l'espèce considérée et est fonction de la position au sein de la flamme.

Le modèle de Colin *et al.* :

Colin *et al.* [50] puis Galpin *et al.* [100], ont proposé une méthode légèrement différente pour surmonter les difficultés liées à l'emploi d'un mode de couplage faible. Partant de la relation (2.65),

et en négligeant le terme de diffusion faisant intervenir la dérivée seconde, les auteurs montrent que le taux de formation de l'espèce i peut être reconstruit à partir de la fraction massique de i interpolée dans la table via :

$$\dot{\omega}_i \approx \dot{\omega}_c \frac{\partial Y_i}{\partial c} \approx \frac{c}{\tau_c}\frac{\partial Y_i}{\partial c} \approx \frac{c}{\tau_c}\frac{\delta Y_i}{\delta c}. \tag{2.87}$$

En première approximation, le temps chimique τ_c est supposé proportionnel au pas de temps, soit $\tau_c \approx \alpha\Delta_t$, avec α de l'ordre de 0,1. Dès lors, la progression en c d'une itération à l'autre est approchée par $\gamma = \delta c/(\alpha c)$, et le terme source de l'espèce i peut être reconstruit suivant :

$$\dot{\omega}_i = \frac{Y_i^{tab}\left[c\left(x, t+\gamma\Delta t\right)\right] - Y_i\left(x,t\right)}{\gamma\Delta t}. \tag{2.88}$$

Ici, la grandeur $Y_i^{tab}\left(c\left(x,t+\gamma\Delta t\right)\right)$ est interpolée dans la table en $c^* = c\left(x,t+\gamma\Delta t\right)$. Cette grandeur est évaluée dans le calcul via une interpolation linéaire, en supposant l'évolution de c purement chimique, soit :

$$c\left(x,t+\gamma\Delta t\right) = c\left(x,t\right) + \gamma\Delta t\dot{\omega}_c\left(c\right). \tag{2.89}$$

Dans [100], le facteur γ a été considéré constant, de l'ordre de 5.

Comparé à la relation (2.86) utilisée dans ce mémoire, la méthode résultant de la relation (2.88) semble plus empirique puisque le temps de relaxation est fixé par l'utilisateur au lieu d'être défini de manière physique. De plus, elle nécessite deux phases d'interpolation dans les tables multipliant ainsi le coût d'exploitation du modèle. Une première interpolation réalisée pour $c^* = c\left(x,t\right)$ permet de déterminer la valeur locale de $\dot{\omega}_c\left(c\right)$ nécessaire pour approcher $c\left(x,t+\gamma\Delta t\right)$. Ensuite, une deuxième interpolation est requise en $c^* = c\left(x,t+\gamma\Delta t\right)$ de manière à déterminer la valeur de Y_i^{tab} intervenant dans (2.88). De ce point de vue, la solution proposée dans ce mémoire apparaît plus facile à mettre en œuvre.

Définition du temps de relaxation τ_c^i :

Trois manières de modéliser le temps chimique de relaxation sont proposées ici :

- en premier lieu, on peut se baser sur l'approche de Rao et Rutland [182] employée dans le cadre de flammelettes de diffusion instationnaires. Les auteurs définissent un temps chimique de la flamme en fonction de la richesse uniquement, indépendamment de l'espèce considérée. En régime riche, ils utilisent un temps basé sur O_2 et en régime pauvre un temps fondé sur le carburant, soit : $|\partial\dot{\omega}_{O_2}/\partial Y_{O_2}|^{-1}$ et $|\partial\dot{\omega}_F/\partial Y_F|^{-1}$. En suivant ce raisonnement, une première façon de modéliser τ_c^i pour la combustion prémélangée consiste à définir un temps unique pour toutes les espèces, dépendant de c. On peut par exemple se baser sur CO_2 :

$$\tau_c\left(c\right) \approx \left|\frac{\partial\dot{\omega}_{CO_2}}{\partial Y_{CO_2}}\right|^{-1}; \tag{2.90}$$

- une seconde façon de modéliser le temps de relaxation consiste à le rendre indépendant de c, mais dépendant de l'espèce considérée. Dans ce contexte, on choisit de définir τ_c^i comme le minimum atteint par $|\partial\dot{\omega}_i/\partial Y_i|^{-1}$ à travers chaque flamme de référence. Ce minimum est généralement atteint dans la zone de réaction, là où les variations des concentrations de chaque espèce sont les plus raides. En choisissant le temps chimique de cette manière, on permet une relaxation précise des espèces vers leur trajectoire tabulée, en particulier dans les zones de forts gradients :

$$\tau_c^i \approx min\left(\left|\frac{\partial\dot{\omega}_i}{\partial Y_i}\right|^{-1}\right); \tag{2.91}$$

- une dernière façon de modéliser le temps de relaxation consiste à se baser sur une approximation de la matrice jacobienne **J**. Dans ce cas, il est classique de définir le temps chimique à partir de la relation approchée suivante (voir par exemple Bongers *et al.* [18]) :

$$\tau_c^i(c) \approx \frac{Y_i}{|\dot{\omega}_i|}. \tag{2.92}$$

L'efficacité de ces trois modèles est testée sur le cas d'une flamme laminaire de prémélange libre méthane/air stœchiométrique. La figure 2.14 permet de comparer l'influence du choix du temps de relaxation sur les profils de fractions massiques de CO_2 et CO.

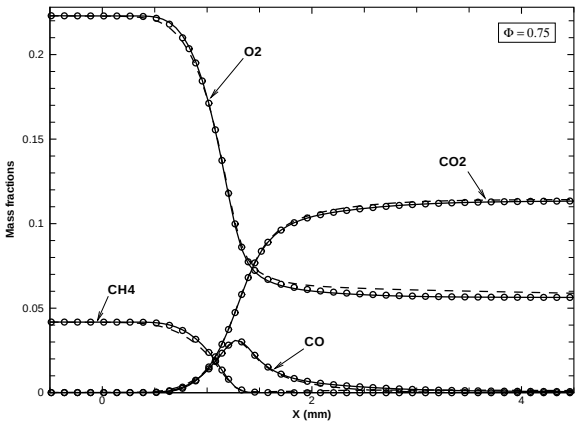

FIG. 2.14 – *Influence du temps de relaxation sur les profils de Y_{CO} et Y_{CO_2} calculés à l'aide de CEDRE pour une flamme prémélangée méthane/air à richesse 1. Les symboles correspondent aux résultats avec chimie détaillée, les traits pleins à la correction 2 basée sur le minimum, les traits mixtes à la correction 1, les gros tirets à la correction 3. Les traits en pointillés correspondent au cas non corrigé.*

Le modèle basé sur l'évaluation des temps caractéristiques à partir du minimum à travers la flamme permet de retrouver, avec la meilleure précision, l'évolution attendue pour les deux espèces présentées. Par ailleurs, le modèle utilisant une approximation de la matrice jacobienne donne également de bons résultats conduisant à des écarts très faibles sur l'ensemble des profils. Enfin, on peut noter l'écart important relevé lorsque les sources ne sont pas corrigées.

Pour mieux comprendre ces résultats, il est intéressant de comparer l'évolution des différents temps caractéristiques à travers la flamme stœchiométrique [194] (figures 2.15 et 2.16).

Le temps caractéristique lié à CO_2 reste, la plupart du temps, supérieur aux autres temps caractéristiques (en particulier de CO, CH_4 et H_2O). Ainsi, on trouve, à certains endroits, plusieurs ordres de grandeur d'écart entre le temps lié à CO_2 et les temps liés aux espèces les plus rapides. L'utilisation d'un temps chimique uniquement lié à CO_2, ne permet donc pas une relaxation précise des espèces rapides. En revanche, les temps issus de la jacobienne approchée sont toujours proches des temps chimiques exacts (avec un facteur d'environ 10), ce qui garanti une relaxation correcte pour toute les espèces.

En conclusion, le modèle retenu dans la suite de ces travaux est celui défini par la relation (2.91) [194]. Les temps de relaxation nécessaires peuvent alors être évalués préalablement au calcul CFD et tabulés dans les bases de données FPI. En combustion partiellement prémélangée, τ_c^i étant une grandeur caractéristique de chaque flamme tabulée, les temps de relaxation par espèces doivent être interpolés en fonction de z.

Stabilité numérique et raideur :

Le fait de corriger les termes sources en faisant intervenir un terme chimique de relaxation peut conduire à une augmentation artificielle de la raideur du système. Ce phénomène peut provoquer de

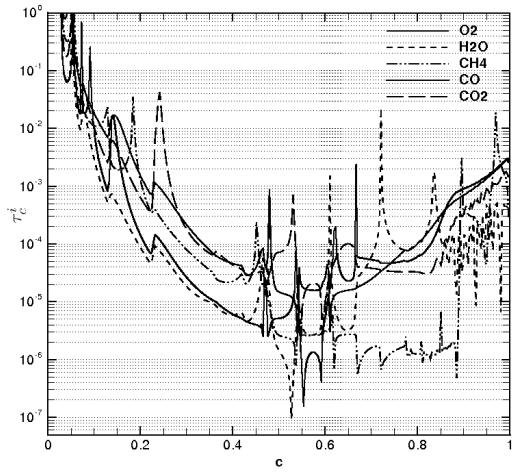

FIG. 2.15 – *Evolution des temps caractéristiques des différentes espèces à travers la flamme laminaire de prémélange 1D stœchiométrique.*

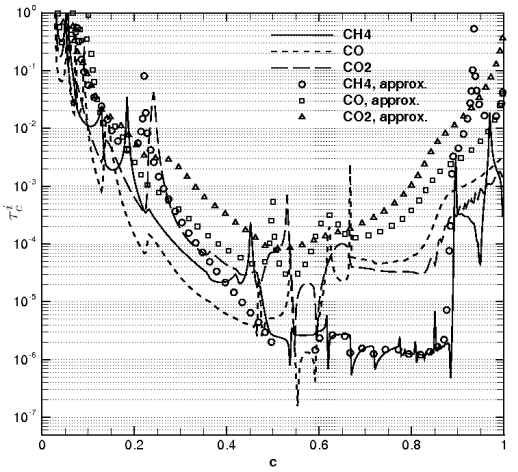

FIG. 2.16 – *Comparaison pour quelques espèces des temps chimiques exacts et définis à partir d'une jacobienne approchée.*

fortes instabilités numériques et doit donc être analysé.

Pour assurer la stabilité du système chimique, il est admis que toutes les échelles de temps chimiques doivent être résolues. Le pas de temps de la simulation doit alors être fixé par le critère défini par la relation (2.53).

En général, la stabilité numérique de systèmes chimiques est étudiée à travers l'équation simplifiée suivante :

$$\frac{dY_i}{dt} = \dot{\omega}_i. \tag{2.93}$$

Cette relation représente un mélange dont l'évolution serait uniquement contrôlée par les processus chimiques (réacteur homogène parfaitement mélangé). En remplaçant $\dot{\omega}_i$ par la relation (2.86), puis en linéarisant l'expression obtenue, on trouve :

$$\frac{dY_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N_e} J_{ij} Y_j - |J_{ii}|\, Y_i + |J_{ii}|\, Y_i^{tab}. \tag{2.94}$$

Cette expression peut être réécrite sous la forme matricielle suivante :

$$\frac{d\mathbf{Y}}{dt} = \underbrace{(\mathbf{J} - diag\,(|\mathbf{J}|))}_{\mathcal{J}}\,\mathbf{Y} + diag\,(|\mathbf{J}|)\,\mathbf{Y^{tab}}, \tag{2.95}$$

où $diag\,(|\mathbf{J}|)$ représente la matrice diagonale dont les termes correspondent aux termes diagonaux de $|\mathbf{J}|$.

L'étude de la stabilité de (2.95) passe par l'étude des valeurs propres de $\mathcal{J}$. En particulier, en se basant sur la relation (2.53), la stabilité du système est limitée par la valeur propre la plus élevée en valeur absolue, Λ_1. La figure 2.17 présente l'évolution de $1/|\Re\,(\Lambda_1)\,|$ à travers la flamme méthane/air stœchiométrique.

Le minimum en valeur absolue atteint par la partie réelle de l'inverse de la première valeur propre, lorsque les termes sources sont corrigés par le modèle retenu, est divisé par deux par rapport au cas non corrigé. Ainsi, le pas de temps utilisé par CEDRE dans ce cas doit être divisé par un facteur deux pour assurer la stabilité numérique du système.

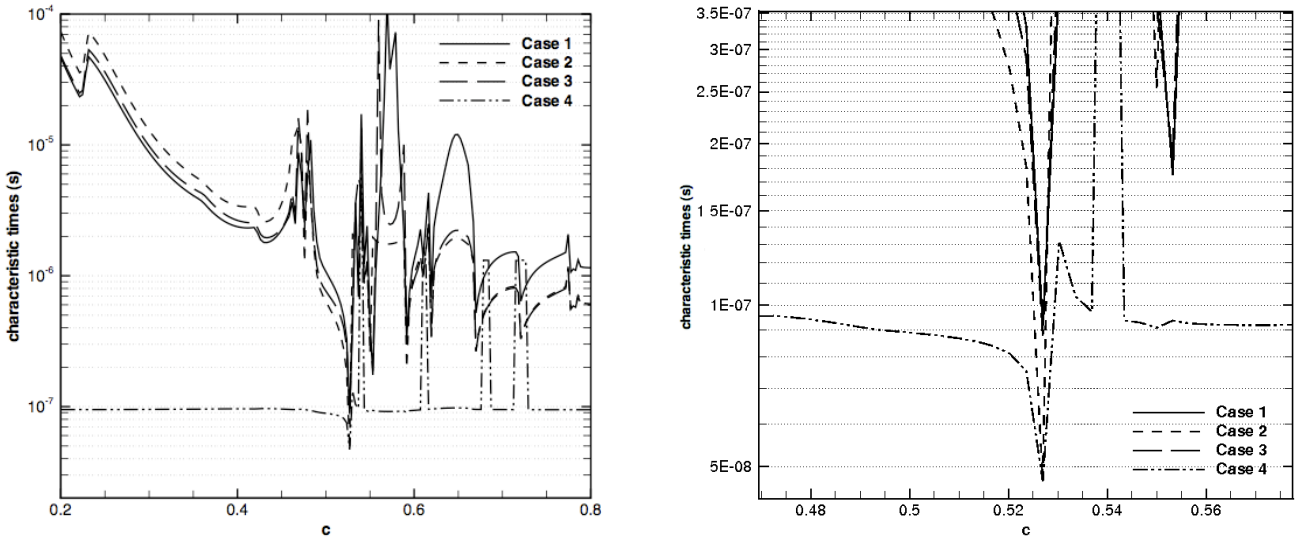

FIG. 2.17 – *Evolution de* $1/|\Re(\Lambda_1)|$*, avec* Λ_1 *issue de* $\mathcal{J}$*. Cas 1, termes sources non corrigés, cas 2, temps chimiques exacts, cas 3, temps chimiques définis à partir des minima, cas 4, temps chimiques définis à partir de* CO_2*. A droite, zoom autour du minimum des temps chimiques.*

2.4.7 Résumé de la méthode de couplage CEDRE/FPI

Une méthode complète de couplage entre les tables FPI construites de manière classique et le code de CFD CEDRE, a été décrite. Le schéma 2.18 résume cette méthode. Sur ce schéma, on a considéré que la procédure de conservation de la masse discutée en annexes n'était pas pertinente dans le cadre de notre étude.

Le schéma met en évidence les deux points principaux faisant l'originalité de la méthode de couplage adoptée entre CEDRE et les tables FPI : le transport d'un nombre réduit d'espèces (les espèces majoritaires, ce qui permet de recalculer directement la variable d'avancement) et la méthode de correction des termes sources chimiques interpolés, impliquant les Y_i tabulés des espèces considérées.

2.5 Validation : flammes laminaires prémélangées libres

La flamme laminaire prémélangée librement propagative a été retenue comme cas test pour la validation de l'implantation du modèle FPI dans le code CEDRE. Ce cas canonique représente le cas le plus simple pour tester l'approche développée. En effet, il n'est pas nécessaire ici de considérer les variations de z à travers les flammes, ce qui simplifie considérablement le problème en réduisant le nombre de degrés de liberté du système chimique à la seule variable d'avancement.

Dans ce qui suit, nous comparons les résultats obtenus avec la méthode de couplage entre CEDRE et FPI proposée et les résultats obtenus avec PREMIX et une chimie détaillée. Ces calculs ont également été présentés dans [193] et [194].

2.5.1 Conditions de calcul

Les calculs de flammes de prémélange 1D méthane/air sont effectués pour quatre richesses différentes, soit 0,8 ; 1 ; 1,25 et 1,75 ; et dans les conditions atmosphériques. Le mécanisme réactionnel réduit employé lors de la construction des tables est le mécanisme de Smooke et Giovangigli [203] présenté en annexe A.

Les calculs sont menés sur un maillage quasi monodimensionnel (en fait 2D plan mais avec une seule maille en hauteur). Les plus petites cellules sont localisées au voisinage du front de flamme et

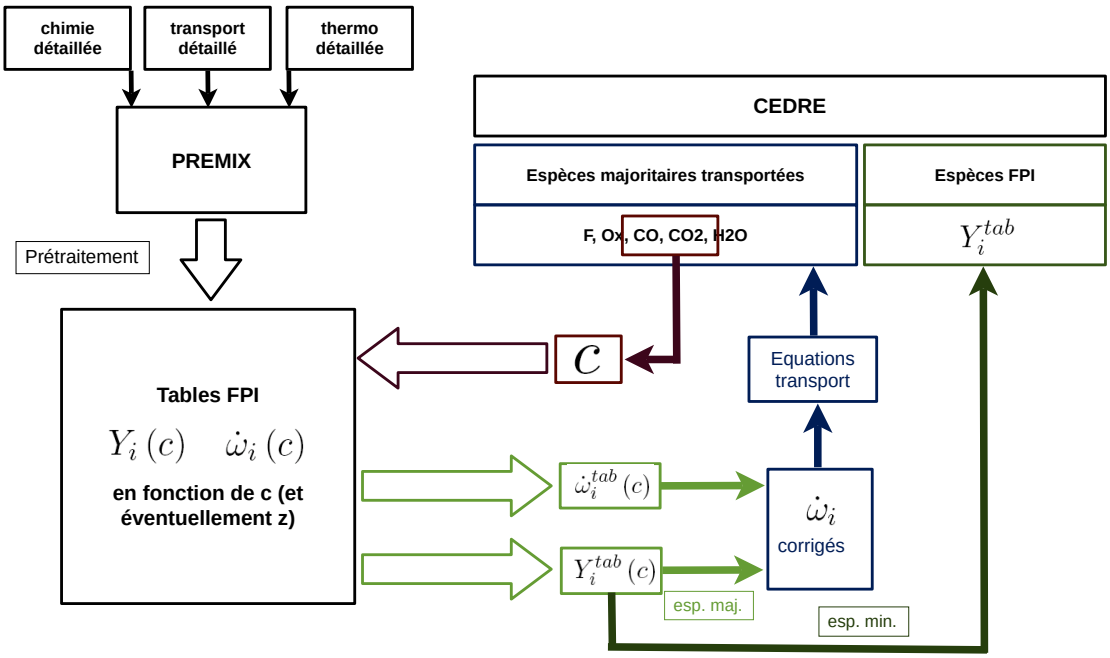

FIG. 2.18 – *Schéma résumant la procédure complète de couplage entre les tables FPI et le code CEDRE.*

mesurent ≈ 13 μm. Ainsi la zone de réaction de la flamme est discrétisée par un minimum d'environ 60 mailles (à la stœchiométrie) de manière à la résoudre parfaitement (la convergence en maillage a été vérifiée). Les calculs CEDRE ont été initialisés en imposant directement les profils issus des calculs PREMIX. La figure 2.19 présente un apperçu du maillage ainsi que des conditions permettant l'initialisation de la flamme (champ de Y_{CO_2}).

Le schéma d'intégration temporel retenu est un schéma de Runge-Kutta explicite à deux étapes avec un pas de temps de 10^{-8} s. Les calculs présentés ont été réalisés sur un temps physique voisin de $\tau = 2\delta_L^0/S_L^0$, pour chaque richesse. τ correspond au temps mis par une flamme pour parcourir une distance équivalente à deux fois l'épaisseur de sa zone de réaction. Pour des temps de calcul inférieurs, on se situe en fait dans un régime transitoire provoqué par la formation d'une onde de pression à l'initialisation. En outre, on ne considère que les flux de diffusion, visqueux et thermiques, les flux convectifs Euler étant omis.

Des tables monodimensionnelles ont été construites, indexées par la seule variable d'avancement, et en appliquant dans PREMIX des flux et des coefficients de diffusion évalués suivant les modèles CEDRE (Prandtl et Schmidt constants). Ainsi, du point de vue de la diffusion, les tables restent cohérentes avec leur utilisation dans le code CEDRE.

Trois niveaux de raffinement ont été testés pour verifier la sensibilité des résultats à la discrétisation selon c. Bien que ces trois tables conduisent à des résultats identiques, la majorité des profils présentés ont été obtenus à partir de bases de données contenant 150 points, ceci afin de conserver une certaine marge de sécurité par rapport à la précision des interpolations.

2.5.2 Résultats

Sensibilité à la discrétisation des tables :

On se limite ici à des flammes à richesse 0,75 et 1,25. Trois tables contenant respectivement 50, 150 et 250 points sont testées. La figure 2.20 présente les profils d'espèces majoritaires obtenus pour les différents cas de calcul considérés. Notons que pour les résultats présentés ici, les termes sources chimiques interpolés dans les tables n'ont pas été corrigés.

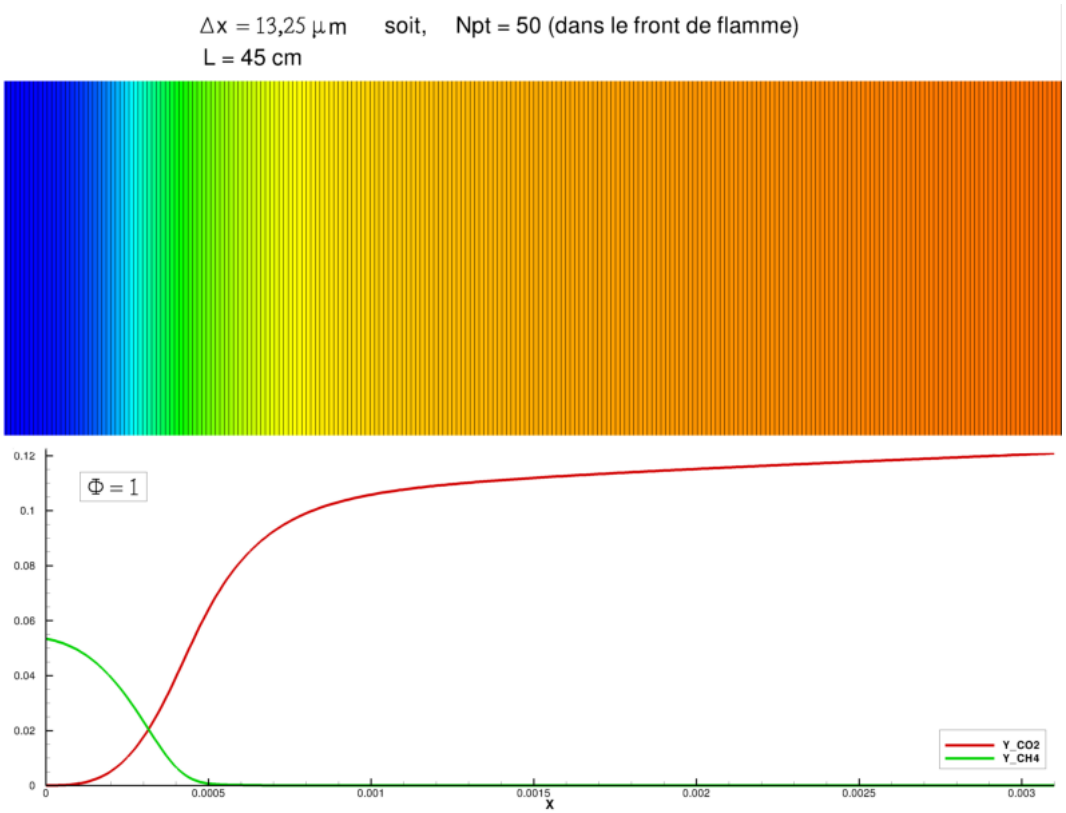

FIG. 2.19 – *Maillage et champ initial pour une flamme laminaire de prémélange libre stœchiométrique.*

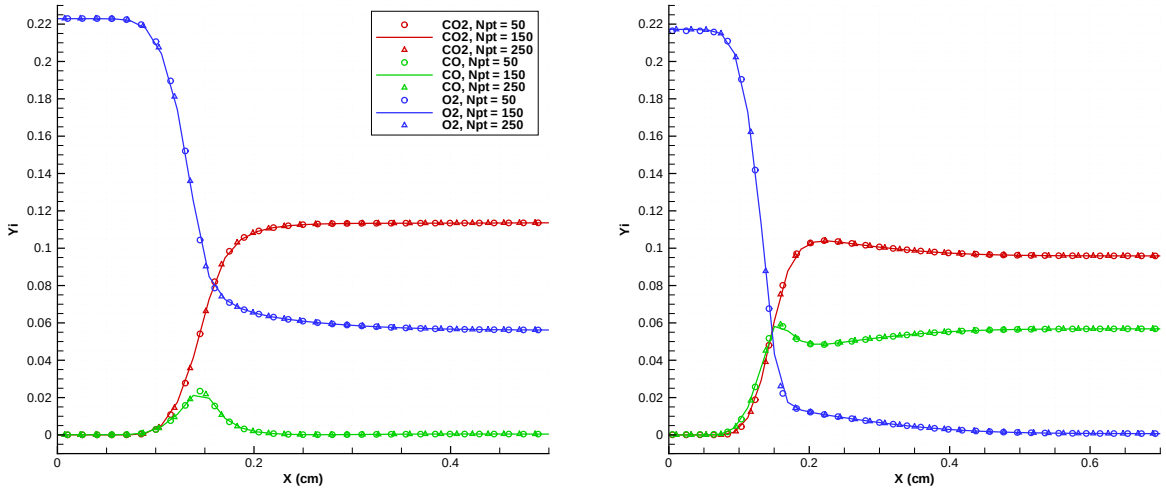

FIG. 2.20 – *Fractions massiques obtenues avec CEDRE utilisant les termes sources FPI interpolés dans des tables contenant 50, 150 et 250 points en c. A gauche, $\varphi = 0{,}75$, à droite, $\varphi = 1{,}25$.*

Les trois tables testées conduisent à des résultats identiques, quelle que soit la richesse et l'espèce considérée. De légers écarts sont observés au niveau du pic de Y_{CO}, liés aux erreurs d'interpolations introduites par le logiciel de post-traitement. On peut conclure que la convergence en maillage des tables FPI est rapidement atteinte, à partir de $N_{pts} = 50$.

Termes sources :

La figure 2.21 permet de comparer les termes sources de méthane, de CO_2 et d'énergie normalisés, interpolés par CEDRE (avant correction) à ceux directement issus des calculs PREMIX. Nous ne comparons ici que les résultats à richesse 0,75 et 1,25.

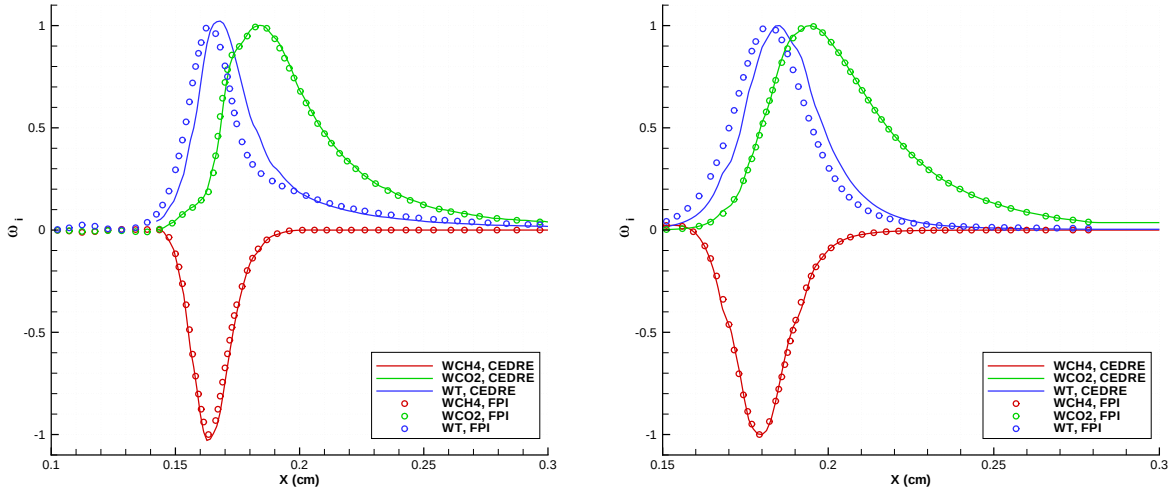

FIG. 2.21 – *Termes sources de méthane, de CO_2 et d'énergie interpolés par CEDRE (traits pleins) et provenant des calculs PREMIX (symboles). Flammes à richesse 0,75 (à gauche) et 1,25 (à droite).*

Les termes sources de CH_4 et de CO_2 non corrigés concordent parfaitement avec les données issues du calcul PREMIX, ce qui valide la procédure d'interpolation employée. On note un décalage des termes sources d'énergie de CEDRE en direction des gaz brûlés par rapport aux résultats de référence. Ce comportement est lié au fait que le jeu réduit d'espèces transportées ne permet pas de conserver l'énergie du mélange en comparaison au calcul PREMIX avec chimie détaillé. Ce décalage n'induit toutefois pas de modification significative de la température de fin de combustion, puisque celle-ci est prédite par CEDRE avec une erreur de seulement 1% dans les cas présentés ici.

Vitesses de propagation :

Le tableau 2.2 présente une comparaison des vitesses de flamme laminaires déterminées par le calcul PREMIX et par CEDRE. Cette vitesse est définie par l'intégrale du taux de réaction de la variable d'avancement à travers la flamme [174] :

$$\rho^0 S_L^0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho \dot{\omega}_c(x)\, dx. \tag{2.96}$$

Richesse	0,75	1	1,25	1,75
CEDRE	0,244	0,396	0,070	0,036
PREMIX	0,244	0,394	0,073	0,04

TAB. 2.2 – *Comparaison des vitesses de flammes (en $m.s^{-1}$) calculées par CEDRE utilisant FPI et issues des calculs de référence PREMIX avec chimie détaillée.*

En régime pauvre et jusqu'à la stœchiométrie, les vitesses de propagation données par CEDRE sont très comparables aux la vitesses obtenues avec chimie détaillée. En revanche, en régime riche, les écarts sont plus marqués, mais restent ici inférieurs à 10%.

Comparaison des profils des espèces majoritaires :

On s'intéresse ici aux profils des fractions massiques des espèces CO_2, O_2, CH_4 et CO à travers les quatre flammes (figures 2.22 à 2.25). Les comparaisons sont fondées sur trois jeux de données distinctes :

- les résultats issus des calculs PREMIX de référence (symboles noirs),
- les résultats issus de la résolution des équations de transport de CEDRE, avec termes sources corrigés (traits continus) et non corrigés (tirets),
- les fractions massiques interpolées par CEDRE dans les tables FPI (symboles colorés).

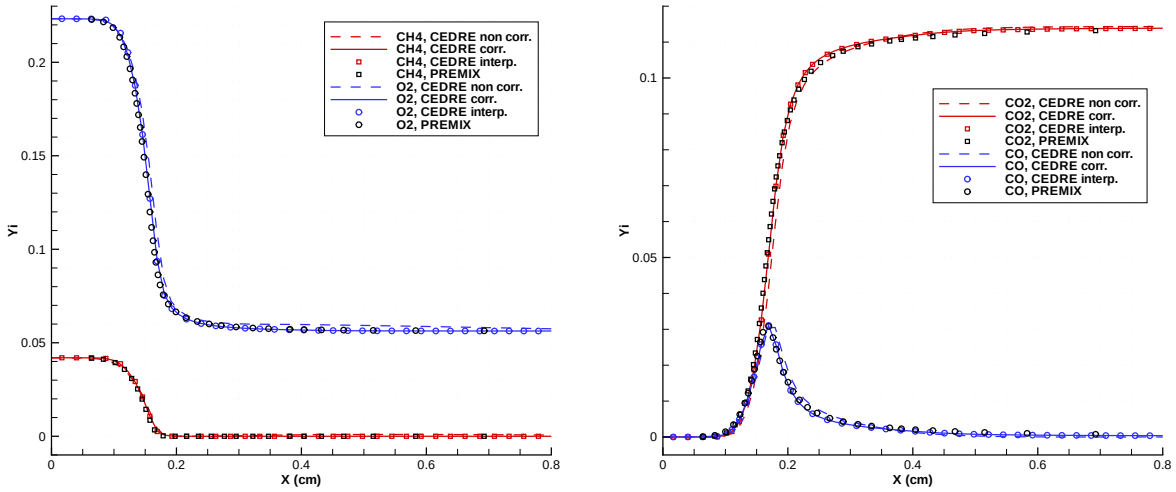

FIG. 2.22 – *Fractions massiques des espèces majoritaires obtenues par CEDRE (données transportées et interpolées) et par le code PREMIX à richesse 0,75.*

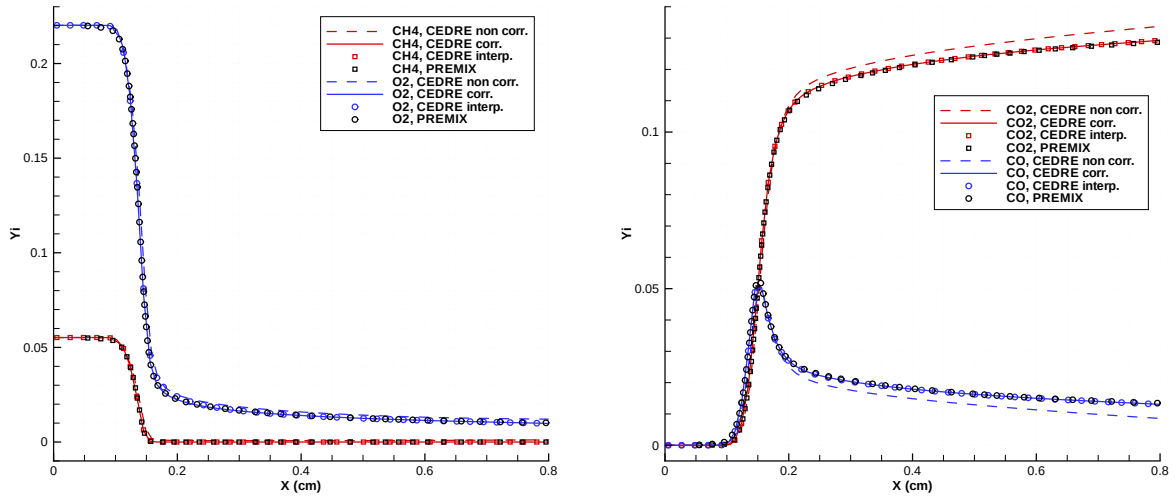

FIG. 2.23 – *Fractions massiques des espèces majoritaires obtenues par CEDRE (données transportées et interpolées) et par le code PREMIX à richesse 1.*

Mis à part à richesse 1,8 ; on note une très bonne correspondance entre les résultats CEDRE obtenus avec termes sources corrigés et PREMIX, pour toutes les espèces représentées. On peut également noter que, quelle que soit la richesse considérée (même en $\varphi = 1{,}8$), les fractions massiques des espèces transportées par CEDRE se superposent parfaitement aux trajectoires interpolées dans la table.

La présence sur les graphiques des résultats CEDRE non corrigés permet de quantifier l'apport du modèle de correction des termes sources sur les profils. A partir de la stœchiométrie, les données

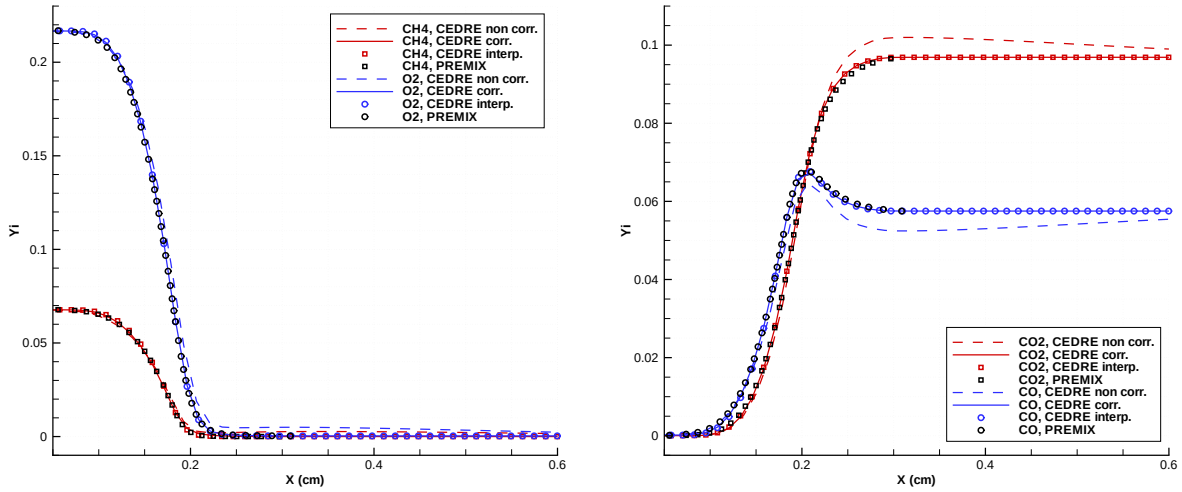

FIG. 2.24 – *Fractions massiques des espèces majoritaires obtenues par CEDRE (données transportées et interpolées) et par le code PREMIX à richesse 1,25.*

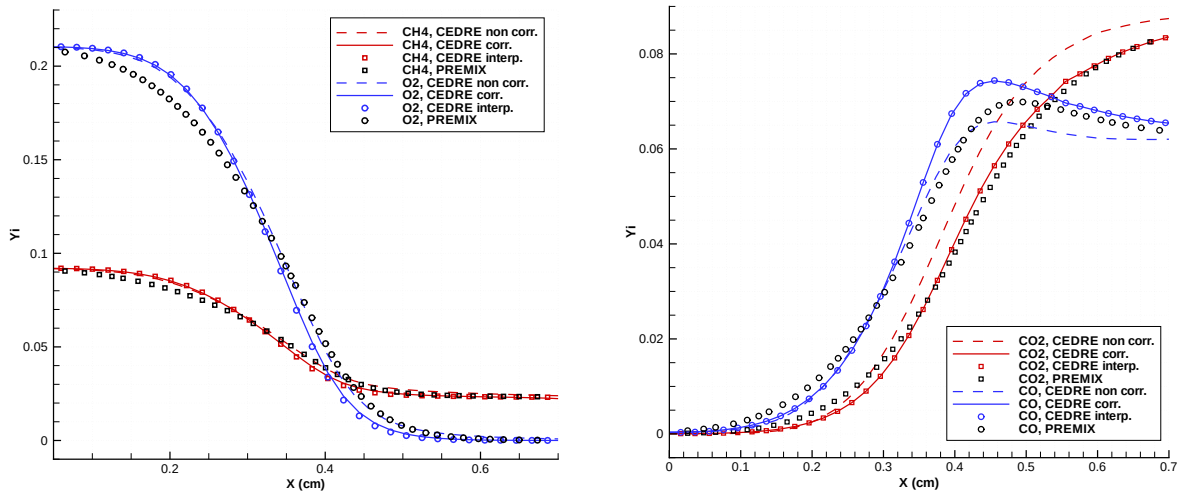

FIG. 2.25 – *Fractions massiques des espèces majoritaires obtenues par CEDRE (données transportées et interpolées) et par le code PREMIX à richesse 1,8.*

transportées par CEDRE sans correction s'éloignent de la trajectoire PREMIX. La méthode de correction permet de relaxer ces données vers les trajectoires de référence et ainsi de retrouver les résultats PREMIX.

Pour $\varphi = 1{,}8$, des écarts assez marqués sont mis en évidence entre les résultats CEDRE (transportés et interpolés) et PREMIX, en particulier dans la zone de préchauffage. A cette richesse, les processus chimiques sont lents, et les phénomènes de diffusion peuvent intervenir à des temps caractéristiques du même ordre de grandeur que les temps chimiques (ce qui explique notamment pourquoi le front de flamme laminaire à cette richesse est plus épais). Sachant que le modèle de correction utilisé est basé sur un temps caractéristique purement chimique, celui-ci ne permet pas de tenir compte du fait que les temps diffusifs ne sont plus négligeables, et il n'est par conséquent pas adapté aux conditions rencontrées ici.

Comparaison des profils d'espèces minoritaires :

La possibilité de prédire la formation d'espèces minoritaires est un des enjeux majeurs du modèle FPI en vue de la prédiction des émissions polluantes. Ces espèces sont obtenues dans CEDRE par interpolation directe des fractions massiques dans la table. La figure 2.26 permet une comparaison des profils de quelques espèces minoritaires pour les quatre flammes étudiées.

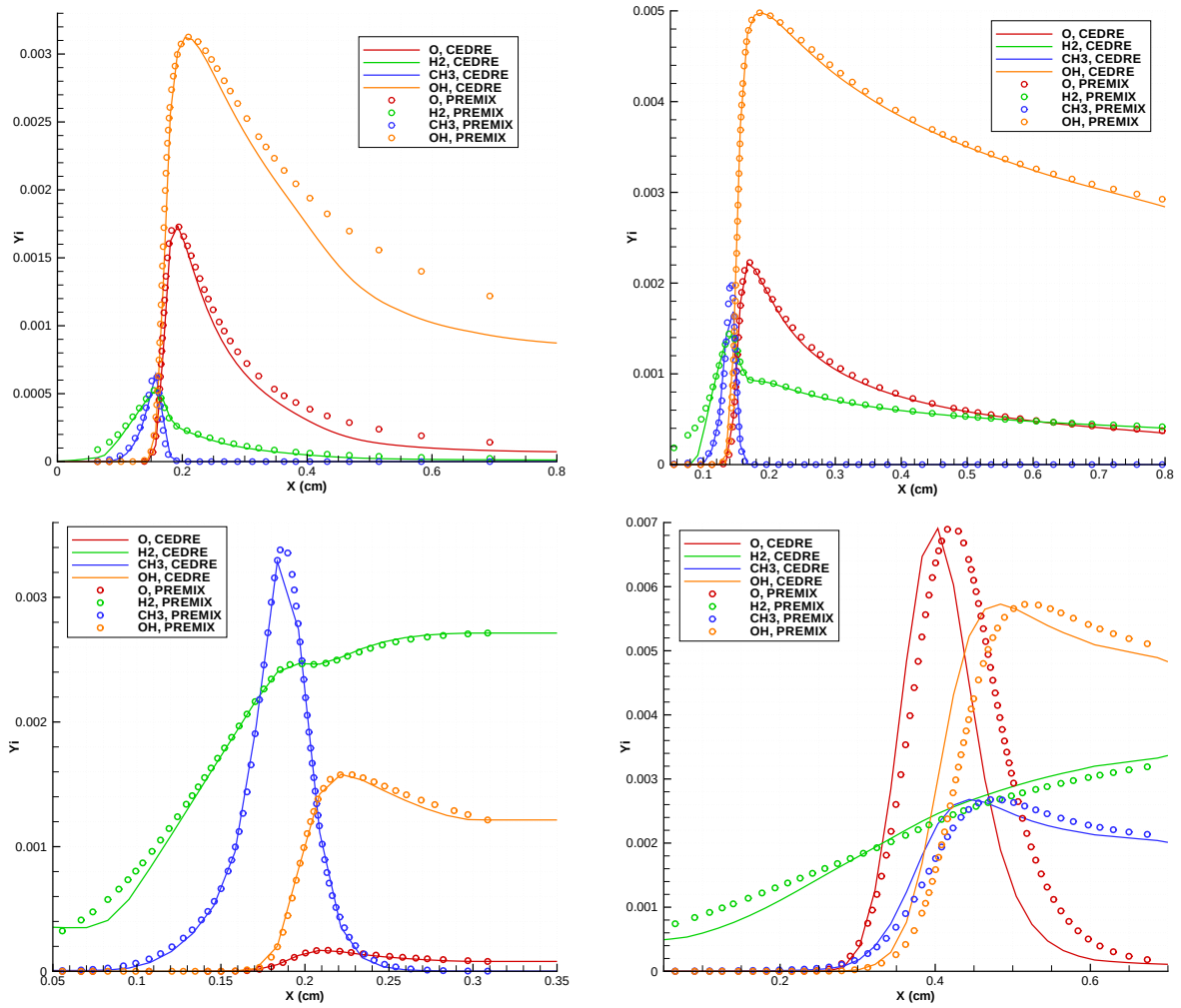

FIG. 2.26 – *Fractions massiques d'espèces minoritaires interpolées par CEDRE comparées aux résultats PREMIX avec chimie détaillée. En haut à gauche, $\varphi = 0{,}75$, en haut à droite, $\varphi = 1$, en bas à gauche, $\varphi = 1{,}25$, en bas à droite, $\varphi = 1{,}8$.*

Les écarts entre CEDRE et la chimie détaillée sont beaucoup plus importants pour les espèces minoritaires que pour les espèces majoritaires. Les différences sont particulièrement marquées dans la zone d'oxydation, alors que dans la zone de réaction, l'évolution des espèces minoritaires est plutôt bien reproduite par le modèle (en régime pauvre à légèrement sur-stœchiométrique). En régime plus riche, les processus chimiques sont beaucoup plus lents, ce qui empêche une représentation correcte de la structure interne du front de flamme. Notons que la sous-estimation des pics de CH_3 à $\varphi = 1$ et $\varphi = 1{,}25$ est due à des erreurs d'interpolation lors du post-traitement des résultats.

Dans la zone d'oxydation, les écarts sont particulièrement marqués à richesse faible et élevée. Dans ces deux cas, la dynamique chimique des espèces minoritaires présentées est très lente. Elles évoluent donc avec des temps caractéristiques chimiques comparables aux temps liés à la diffusion moléculaire. Les écarts observés sur les fractions massiques sont d'autant plus marqués que les niveaux atteints sont très faibles.

Ces profils (et les erreurs observées) sont à mettre en parallèle avec ceux tracés pour les espèces majoritaires (figures 2.22 à 2.25).

2.5.3 Conclusion

Les calculs de flammes laminaires de prémélange 1D ont permis de valider les principes essentiels du modèle, à savoir :

- la définition de la variable d'avancement,
- la méthode d'interpolation utilisée par CEDRE,
- la méthode de couplage (par correction des termes sources).

De manière générale, des résultats satisfaisants ont été obtenus avec le code CEDRE et le modèle FPI dans ce contexte laminaire. En particulier, on a pu vérifier que la vitesse de propagation des flammes était dans tous les cas retrouvée correctement. De plus, il a été montré que les profils des espèces majoritaires, transportées par CEDRE avec correction, se superposaient aux profils des espèces interpolées, mis à part à richesse 1,8. Les écarts plus importants observés à cette richesse peuvent s'expliquer par le fait que, dans ces conditions, les temps caractéristiques des phénomènes diffusifs ne sont plus négligeables devant les temps chimiques. Cette hypothèse doit toutefois être approfondie. De manière générale, l'efficacité du modèle de correction des sources chimiques a pu être validé.

Pour finir, on a montré que le modèle était tout à fait capable de reproduire l'évolution des espèces minoritaires. Des écarts plus significatifs ont été observés sur ces espèces, en particulier dans les zones d'oxydation des flammes, en régime pauvre et riche. Dans ces zones, la chimie devient plus lente et entre pleinement en concurrence avec les phénomènes diffusifs. Plus près de la stœchiométrie et au sein même de la zone de réaction, ceci n'est pas forcément vérifié ce qui explique les bons résultats observés dans ces conditions. Ces observations soulignent les limites de l'approche développée.

Tous les résultats présentés ici on permis de valider avec succès la méthode de couplage "indirecte" proposée entre les tables FPI et le code de CFD CEDRE.

Jusqu'à présent, en régime laminaire, nous avons fait l'hypothèse que la flamme était parfaitement résolue, ce qui nous a permis de nous intéresser en détail à la structure interne des flammes. Lorsque l'on considère la simulation de flammes turbulentes se développant au sein de géométries complexes, la taille des plus petites cellules rencontrées est typiquement plus grande de plusieurs ordres de grandeur par rapport à l'épaisseur de flamme laminaire. Dans ces conditions, il n'est pas nécessaire de connaître la structure interne exacte des flammes pour atteindre un niveau de précision satisfaisant. Par conséquent, les éventuelles erreurs d'interpolation et les difficultés rencontrées dans le cas laminaire s'avèrent être de moindre importance en régime turbulent.

Chapitre 3

Modélisation de la combustion turbulente

Sommaire

3.1 Introduction 74
3.2 Rappels sur la modélisation de la combustion turbulente prémélangée 74
3.2.1 Filtrages RANS et LES 75
3.2.2 Modèle de flamme épaissie pour la LES (TFLES) 77
3.2.3 Modèles géométriques 78
3.2.4 Approches statistiques 81
3.2.5 Comparaison des domaines de validité de différents modèles 85
3.3 Modélisation de la turbulence avec CEDRE : équations filtrées/moyennées . 88
3.3.1 Equations filtrées 88
3.3.2 Fermeture des équations 89
3.4 Modélisation des interactions combustion/turbulence dans le cadre de l'utilisation de tables FPI 90
3.5 Evaluation des PDF : les fonctions β 91
3.6 Moments du premier ordre : $\widetilde{z}$ et $\widetilde{c}$ 92
3.7 Moments du second ordre : $\widetilde{z''^2}$ et $\widetilde{c''^2}$ 93
3.7.1 Fermeture des taux de dissipation scalaires 94
3.7.2 Modélisation de la corrélation $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$ 98
3.7.3 Equations de transport fermées 100
3.7.4 Relations algébriques pour l'évaluation des moments d'ordre 2 100
3.8 Correction des termes sources interpolés par CEDRE 101
3.9 Construction et utilisation de tables turbulentes 102
3.9.1 Couplage de tables turbulentes avec le code CEDRE 102
3.9.2 Exemple de construction d'une table FPI turbulente 102
3.10 Conclusions et limitations du modèle 104

3.1 Introduction

Avec l'amélioration constante des capacités de calcul offertes par les calculateurs, l'utilisation de la LES pour la simulation d'écoulements turbulents réactifs devient de plus en plus aisée et tend à se généraliser. Nous avons donc choisi de centrer nos travaux sur le développement d'un modèle de combustion turbulente adapté à la LES[1]. Ainsi, les relations et modèles présentés dans ce chapitre ont été écrits au sens LES. Par ailleurs, compte tenu du type d'applications visées par ce travail (foyers aéronautiques), on se focalisera par la suite essentiellement sur la modélisation de la combustion turbulente prémélangée uniquement.

Dans le chapitre précédent, dédié à la description du modèle FPI en régime laminaire, il a été montré que l'utilisation conjointe de tables chimiques et du code CEDRE devait se faire via un couplage faible. Ainsi, les équations de conservation des espèces majoritaires doivent être résolues et les termes souces chimiques correspondant doivent être extraits des tables FPI. Dans ce contexte, le modèle de combustion turbulente a pour rôle de modéliser les taux de réaction filtrés de chaque espèce transportée.

Lorsque l'on considère la simulation de flammes turbulentes de prémélange, on distingue deux problématiques majeures nécessitant l'emploi d'un modèle de sous-maille :

- la première difficulté est induite par la sous-résolution du front de flamme (Pitsch [169])[2]. La flamme apparaît alors comme une discontinuité séparant les gaz frais des gaz brûlés ;
- le deuxième point est lié à la nécessité de tenir compte de l'influence des fluctuations turbulentes sur le front de flamme. Suivant les échelles caractéristiques auxquelles interviennent les interactions chimie/turbulence, différents régimes de combustion peuvent être identifiés. La fermeture des termes sources chimiques repose l'introduction d'une hypothèse portant sur ce régime.

Ces deux aspects de la modélisation de la combustion turbulente sont appréhendés dans le cadre de ces travaux, via une approche à PDF présumées. Ce modèle semble en effet être le mieux adapté à l'utilisation de tables FPI pour la simulation de configurations industrielles.

Pour débuter, un état de l'art concernant les modèles de combustion turbulente LES pour les flammes prémélangées est réalisé. L'approche à PDF présumées retenue est alors introduite et les facteurs clés qui ont contribué à orienter notre choix sont développés. Cette approche est ensuite détaillée dans les sections qui suivent et les modèles specifiques nécessaires à la fermeture des équations sont explicités. En conclusion, une discussion est proposée sur les limitations du modèle.

3.2 Rappels sur la modélisation de la combustion turbulente prémélangée

On s'intéresse ici aux modèles de combustion turbulente pour la combustion prémélangée, adaptés à la LES. Dans ce cadre, la plupart des modèles développés jusqu'à présent, se fondent sur l'hypothèse de flammelettes, qui suppose que la flamme turbulente est constituée d'une collection de fronts de flammes, localement laminaires. Peters [160] fut le premier à proposer un modèle spécifique pour ce régime. Par la suite, Bradley *et al.* [27] appliquèrent cette hypothèse aux flammes prémélangées et développèrent un modèle assez similaire (le modèle utilisé dans le cadre des travaux présentés ici est essentiellement fondé sur les idées de Bradley *et al.*).

Dans le cadre du modèle FPI, l'utilisation d'un modèle de combustion turbulente basé sur l'hypothèse de flammelettes s'impose, les tables FPI étant construites à partir de calculs de flammes laminaires élémentaires. Ces tables ne peuvent donc être utilisées que lorsque l'on peut supposer que

[1] Ceci ne nous empêchera pas, dans le chapitre 4, d'utiliser les modèles proposés dans un contexte RANS. Ceci est généralement possible en remplaçant les échelles caractéristiques LES (par exemple Δ) par les échelles RANS (par exemple L) et en adaptant les constantes.

[2] l'épaisseur de la flamme turbulente est typiquement plus petite d'un ordre de grandeur comparée à la taille des cellules d'un maillage utilisé en LES.

la structure interne de la flamme turbulente reste similaire à celle d'une flamme laminaire.

Pour une revue plus complète des modèles de combustion turbulente adaptés la LES, le lecteur peut se réferer à Veynante et Vervisch [219], Pitsch [169], Peters [164] ou Fureby [81, 80]. En ce qui concerne plus particulièrement les modèles de combustion turbulente avec prise en compte d'une chimie complexe, Hilbert *et al.* [109] ont réalisé un état de l'art relativement complet.

3.2.1 Filtrages RANS et LES

Préalablement à une description des principaux modèles de flammelettes existants, il est important d'introduire les notations relatives aux opérations de filtrage (en LES) et de moyennes (en RANS) qui seront utilisées dans la suite de ce mémoire.

Opérateur de filtrage RANS :

L'approche RANS consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes auxquelles on applique une moyenne statistique d'ensemble, assimilée à une moyenne temporelle grâce à l'hypothèse d'ergodicité [209]. Cette opération peut être interprétée comme une opération de filtrage, ce qui facilite l'introduction de notations pouvant être employées en RANS et en LES.

Au sens RANS, toute valeur instantanée d'une grandeur quelconque Ψ fluctuant au sein d'un écoulement turbulent, peut être décomposée en la somme de sa moyenne temporelle et des fluctuations autour de cette moyenne :

$$\Psi = \overline{\Psi} + \Psi'. \tag{3.1}$$

Les codes de CFD pour les écoulements compressibles et/ou réactifs utilisent plus couramment une moyenne pondérée par la masse volumique, appelée moyenne de Favre :

$$\widetilde{\Psi} = \frac{\overline{\rho\Psi}}{\overline{\Psi}}. \tag{3.2}$$

Les fluctuations associées à une moyenne de Favre sont notées Ψ''.

L'opérateur RANS vérifie les propriétés de linéarité, de projectivité, de conservativité des constantes, et de commutativité par rapport aux dérivées spatiales et temporelles. De ces propriétés découlent les relations suivantes utilisées lors du développement des équations de Navier-Stokes moyennées :

$$\overline{\overline{\Psi}} = \overline{\Psi} \quad \text{et} \quad \overline{\Psi'} = 0. \tag{3.3}$$

Opérateur de filtrage LES :

Au sens LES, les grandeurs sont filtrées dans l'espace physique par application d'un filtre passe haut. Une partie du spectre de la turbulence, associée aux grandes structures tourbillonnaires, est alors résolue et une partie, correspondant aux petites structures reste non résolue. Le modèle de sous-maille a pour fonction de modéliser les interactions entre les petites échelles de la turbulence et les grandes échelles. D'un point de vue mathématique, si l'on note G_Δ le noyau du filtre, l'opération de filtrage d'une grandeur Ψ dans l'espace spectral est obtenue par convolution entre G_Δ et Ψ [190] :

$$\overline{\Psi} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x)\, G_\Delta\left(x - x'\right) dx'. \tag{3.4}$$

En pratique, dans un code de CFD tel que CEDRE, le filtre est imposé dans l'espace physique à la fois par le maillage et par le schéma numérique. Le but de l'opération de filtrage résultant reste de permettre la résolution de la majorité du spectre d'énergie cinétique turbulente (portée par les plus grosses structures).

De façon analogue au RANS, on utilise fréquemment un filtrage de Favre pondéré par la masse volumique (les notations restent les mêmes qu'en RANS).

Le filtrage LES perd la proprieté de projectivité. De ce fait, les conditions (3.3) ne sont plus vérifiées :

$$\overline{\overline{\Psi}} \neq \overline{\Psi} \quad \text{et} \quad \overline{\Psi'} \neq 0. \tag{3.5}$$

Il s'ensuit que le filtrage des équations de Navier-Stokes au sens LES introduit des termes supplémentaires par comparaison aux équations RANS. Ces termes doivent être pris en compte dans les modèles de sous-maille (modèle SGS pour "Sub Grid Scale model").

Comparaisons entre expérience et calculs LES :

Veynante et Knikker [218] définissent les moyennes temporelles, non pondérées par la masse, d'une grandeur quelconque par la notation $\langle . \rangle$. Par exemple, la moyenne temporelle d'une grandeur $\overline{\Psi}$ s'écrit :

$$\left\langle \overline{\Psi} \right\rangle (x) = \frac{1}{T} \int_0^T \overline{\Psi}\,(x;t)\,dt, \tag{3.6}$$

où T représente la période sur laquelle est réalisée l'intégration temporelle. En supposant que la taille de maille Δ reste petite devant la longueur caractéristique d'évolution des quantités moyennes dans le temps, L, on peut écrire l'approximation suivante :

$$\left\langle \overline{\Psi} \right\rangle \approx \langle \Psi \rangle \,. \tag{3.7}$$

La moyenne des grandeurs filtrées issues de la LES est donc assimilée à la moyenne temporelle de ces grandeurs. En LES, cette approximation est toujours appliquée lors de la comparaison de grandeurs moyennes à des données expérimentales. L'échelle L est typiquement approchée par :

$$L \approx 1/max\left(\left|\nabla \langle \Psi \rangle\right|\right). \tag{3.8}$$

En considérant maintenant les grandeurs fluctuantes, et en posant les mêmes hypothèses que précédemment, on peut écrire :

$$\left\langle \Psi^2 \right\rangle - \langle \Psi \rangle^2 \approx \underbrace{\left[\left\langle \overline{\Psi}^2 \right\rangle - \left\langle \overline{\Psi} \right\rangle^2\right]}_{\text{résolu}} + \underbrace{\left[\left\langle \overline{\Psi^2} - \overline{\Psi}^2 \right\rangle\right]}_{\text{SGS}}. \tag{3.9}$$

Les fluctuations d'une grandeur quelconque Ψ peuvent donc être décomposées en une partie résolue, et une partie SGS modélisée. La première partie est directement disponible dans les simulations numériques. C'est donc en général cette grandeur qui est utilisée pour les comparaisons avec l'expérience, la partie SGS étant souvent négligée. Précisons néanmoins que Veynante et Knikker [218] proposent différents modèles permettant de prendre en compte la partie SGS.

De la même manière que précédemment, on peut également définir une moyenne temporelle pondérée par la masse, notée $\{.\}$:

$$\{\Psi\} = \frac{\langle \rho\Psi \rangle}{\langle \rho \rangle} \approx \frac{\left\langle \overline{\rho}\widetilde{\Psi} \right\rangle}{\langle \overline{\rho} \rangle}. \tag{3.10}$$

Il faut noter ici qu'en pratique, $\left\langle \widetilde{\Psi} \right\rangle$ ne peut s'apparenter ni à $\{\Psi\}$, ni à $\langle \Psi \rangle$ [218]. Toutefois, dans la limite de mailles relativement grandes, lorsque le plissement de la flamme est entièrement contenu sous la maille, on peut faire l'approximation suivante (par analogie à (3.8)) :

$$\left\langle \widetilde{\Psi} \right\rangle \approx \{\Psi\}. \tag{3.11}$$

Dans les chapitres 4 et 5 de ce mémoire, présentant les résultats de calculs LES effectués sur deux configurations différentes, on compare les moyennes temporelles non pondérées de grandeurs elles mêmes filtrées au sens de Favre. Dans ces chapitres, par soucis de simplification, les notations correspondant à l'opération de moyenne temporelle seront implicites. On écrira donc :

$$\widetilde{\Psi} \equiv \left\langle \widetilde{\Psi} \right\rangle \quad \text{et} \quad \Psi''_{RMS} \equiv \sqrt{\left\langle \widetilde{\Psi}^2 \right\rangle - \left\langle \widetilde{\Psi} \right\rangle^2}. \tag{3.12}$$

On ne considère ici que la partie résolue de la variance moyenne de Ψ. En supposant que la taille des cellules est grande devant l'épaisseur des flammes simulées, on pourra assimiler par la suite les moyennes de Reynolds réalisées sur les grandeurs filtrées au sens de Favre à des moyennes temporelles pondérées par la masse via la relation (3.11).

3.2.2 Modèle de flamme épaissie pour la LES (TFLES)

L'objectif du modèle TFLES est d'épaissir artificiellement le front de flamme turbulent de manière à ce que celui-ci soit résolu sur un maillage LES donné. Pour les flammes laminaires, Butler et O'Rourke [208] proposent ainsi d'épaissir la flamme en altérant directement le terme de diffusion. Il est important toutefois de s'assurer que la flamme se propage à une vitesse correcte ce qui implique la modification des taux de production chimiques.

Toutes ces grandeurs (épaisseur de flamme, vitesse de flamme, coefficients de diffusion et taux de production chimiques) sont liées via des relations simples comme le montre l'analyse asymptotique ZFK (Zel'dovitch/Frank-Kamenetski, [228]) :

$$S_L^0 \propto \sqrt{D\dot{\omega}_c} \quad \text{et} \quad \delta_L^0 \propto \frac{D}{S_L^0}, \tag{3.13}$$

où D représente un coefficient de diffusion caractéristique de la flamme et $\dot{\omega}_c$ le taux de production chimique d'une variable d'avancement (si on considère une chimie globale à une étape, celle-ci peut être assimilée au carburant).

Suivant les relations (3.13), pour épaissir le front de flamme d'un facteur F en conservant une vitesse S_L^0 constante, il faut donc multiplier sa diffusion moléculaire par F et diviser simultanément le terme source chimique $\dot{\omega}_c$ par ce même facteur.

Si on se place maintenant dans un contexte turbulent, la vitesse de propagation de la flamme est égale à $S_t \neq S_L^0$. Il est important que le modèle de combustion turbulente développé conserve les proprietés de la flamme, et en particulier sa vitesse de propagation. Pour cette raison, lorsque la flamme turbulente est épaissie via le modèle TFLES, une correction des termes sources chimiques doit être apportée pour tenir compte des effets de la turbulence sur la vitesse de flamme. Colin *et al.* [49] introduisent ainsi un facteur d'efficacité E pouvant être défini comme le rapport entre le facteur de plissement de la flamme non épaissie Ξ et épaissie Ξ^* :

$$E = \frac{\Xi\left(\delta_L^0\right)}{\Xi^*\left(F\delta_L^0\right)}. \tag{3.14}$$

Une expression détaillée de E, tenant compte de l'étirement local de la flamme et du quenching, a été proposée par Colin *et al.* [49] ou Charlette *et al.* [42].

Lorsque le coefficient d'épaississement est fixé de telle sorte que le front de flamme turbulent est résolu sur un maillage donné, les termes sources chimiques peuvent être évalués en utilisant directement les grandeurs filtrées.

Au final, l'équation de conservation de la variable d'avancement suivant le modèle TFLES peut s'écrire :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{c}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{c} - \overline{\rho}EFD_c\nabla\widetilde{c}\right) = \frac{E}{F}\overline{\rho}\dot{\omega}_c\left(\widetilde{c},\widetilde{T}\right). \tag{3.15}$$

En général, F et E peuvent être évalués de manière dynamique, de sorte que l'épaississement de la flamme dépend directement de la taille de maille locale. Dans ce cadre, le facteur d'épaississement peut être calculé suivant :

$$F = 1 + (F_{max} - 1)\,\alpha_1, \tag{3.16}$$

où α_1 est un senseur de flamme permettant de localiser le front de flamme dans l'écoulement et F_{max} est la valeur maximale de l'épaississement définie ici par : $F_{max} = \frac{n_f \Delta}{\delta_L^0}$ (avec n_f le nombre de points nécessaires pour résoudre la flamme laminaire).

Le facteur de plissement Ξ peut être évalué suivant :

$$\Xi\left(\delta_L^0\right) = 1 + \alpha\Gamma\left(\frac{\Delta}{\delta_L^0}, \frac{u'_\Delta}{S_L^0}\right)\frac{u'_\Delta}{S_L^0}, \tag{3.17}$$

où α est un coefficient introduit par Charlette *et al.* [42] et Γ est la fonction ITNFS modifiée proposée par Meneveau et Poinsot [140] :

$$\Gamma = 0,75 \exp\left[-\frac{1,2}{\left(u'_\Delta/S_L^0\right)^{0,3}}\right]\left(\frac{\Delta}{\delta_L^0}\right)^{\frac{2}{3}}. \tag{3.18}$$

La grandeur Δ est évaluée dans CEDRE à partir du rapport entre le volume et la somme des aires des faces de chaque cellule. Les fluctuations de vitesse de sous-maille u'_Δ sont évaluées de manière simple en suivant le modèle de Smagorinsky, soit :

$$u'_\Delta = C_S^2 \Delta \sqrt{\boldsymbol{D} : \boldsymbol{D}}, \tag{3.19}$$

avec C_S la constante du modèle de Smagorinsky.

Jusqu'à présent le modèle TFLES n'a été utilisé qu'avec des mécanismes chimiques très simplifiés comprenant une à deux équations. Il semble en effet que l'extension de TFLES à une chimie détaillée (par exemple par l'intermédiaire de tables FPI) soit rendue difficile par le fait que toutes les espèces sont liées de façon non-linéaire (l'utilisation d'un unique facteur d'épaississement ne se justifie plus).

3.2.3 Modèles géométriques

Modèles à densité de surface de flamme :

Les modèles géométriques, comme par exemple le modèle à densité de surface de flamme, nécessitent la définition d'un repère lié au front de flamme (vu comme une discontinuité). Ce repère est présenté sur la figure 3.1 : ξ et ζ représentent respectivement les coordonnées normale et tangentielle au front de flamme, et $\boldsymbol{n}$ est le vecteur unitaire normal à la flamme, pointant en direction des gaz frais. Il est à noter que la courbure du front de flamme peut être reliée à $\nabla.\boldsymbol{n}$, ce qui permet de distinguer les zones de courbure positives et négatives.

Les modèles à densité de surface de flamme sont fondés sur le transport d'une variable d'avancement c, qui peut être définie de façon identique à la variable du modèle FPI. En combustion prémélangée, la fonction densité de surface de flamme, évaluée en c^*, peut être exprimée en termes de moyenne du gradient de c, conditionnée à une valeur particulière $c = c^*$ [179], [213] :

$$\Sigma\left(c^*\right) = \overline{|\nabla c|\delta\left(c - c^*\right)} = \overline{|\nabla c||c^*}\widetilde{P}\left(c^*\right), \tag{3.20}$$

où $\widetilde{P}\left(c^*\right)$ est la probabilité de trouver localement la valeur $c = c^*$. Elle est reliée à la fonction de Dirac $\delta\left(c - c^*\right)$ suivant :

$$\widetilde{P}\left(c^*\right) = \overline{\delta\left(c - c^*\right)}. \tag{3.21}$$

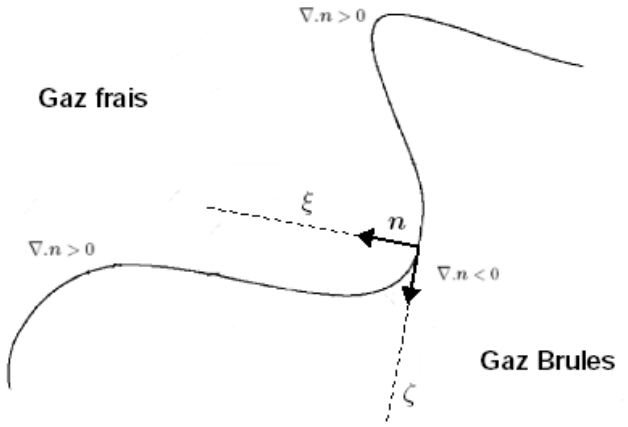

FIG. 3.1 – *Représentation du repère lié au front de flamme sur une flamme turbulente plissée.*

L'opérateur $\overline{\Psi|c^*}$ représente la moyenne de Ψ conditionnée à $c = c^*$, définie par :

$$\overline{\Psi|c^*} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi' \widetilde{P}\left(\Psi'|c^*\right) d\Psi'. \tag{3.22}$$

En suivant la définition de Σ, le taux de production local de la variable d'avancement évalué en $c = c^*$ peut être exprimé de la manière suivante :

$$\rho\dot{\omega}_c\left(c^*\right)\widetilde{P}\left(c^*\right) = \left\langle \frac{\rho\dot{\omega}_c}{|\nabla c|} \right\rangle_S \Sigma, \tag{3.23}$$

où la notation $\langle . \rangle_S$ représente une moyenne réalisée le long du front de flamme. Pour une quantité Ψ quelconque évaluée en $c = c^*$ [219], on écrit :

$$\langle \Psi \rangle_S = \frac{\overline{\Psi|\nabla c||c^*}}{\overline{|\nabla c||c^*}}. \tag{3.24}$$

Par définition, le taux de production moyen de la variable d'avancement est défini par l'intégrale sur c de la grandeur définie par la relation (3.23), soit :

$$\overline{\rho\dot{\omega}_c} = \int_0^1 \rho\dot{\omega}_c\left(c^*\right)\widetilde{P}\left(c^*\right) dc^* = \int_0^1 \left\langle \frac{\rho\dot{\omega}_c}{|\nabla c|} \right\rangle_S \Sigma\left(c^*\right) dc^* = \overline{\left\langle \frac{\rho\dot{\omega}_c}{|\nabla c|} \right\rangle_S}\,\overline{\Sigma}. \tag{3.25}$$

Dans cette expression, on définit $\overline{\Sigma}$ et $\overline{\left\langle \frac{\rho\dot{\omega}_c}{|\nabla c|} \right\rangle_S}$ de la manière suivante :

$$\overline{\Sigma} = \int_0^1 \Sigma\left(c^*\right) dc^* = \overline{|\nabla c|}, \tag{3.26}$$

$$\dot{\Omega}_c = \overline{\left\langle \frac{\rho\dot{\omega}_c}{|\nabla c|} \right\rangle_S} \approx \int_0^1 \frac{\rho\dot{\omega}_c}{|\nabla c|} dc^* \approx \rho^0 I^0 S_L^0. \tag{3.27}$$

En LES, $\overline{\Sigma}$ représente la densité de surface de flamme généralisée à l'échelle sous-maille, introduite par Boger *et al.* [17]. Dans le régime des flammelettes, où le front de flamme est supposé infiniment mince, on peut supposer que $\overline{|\nabla c|}$ reste toujours équivalent à Σ. Dans (3.27), I^0 est un paramètre introduit par Bray [28] permettant de tenir compte des effets de l'étirement et du quenching sur la vitesse de flamme. Ce terme est généralement choisi égal à l'unité. $\dot{\Omega}_c$ représente un taux de production de c moyen par unité de surface de flamme, intégré à travers la flamme.

Au final, on modélise le taux de production de la variable d'avancement de la manière suivante :

$$\overline{\rho\dot{\omega}_c} = \dot{\Omega}_c\Sigma = \rho^0 S_L^0 \Sigma. \tag{3.28}$$

Le principal intérêt de ce modèle est qu'il permet de découpler la chimie des effets de la turbulence sur la flamme. Ainsi, $\dot{\Omega}_c$, dépendant uniquement de la vitesse de flamme laminaire, peut être calculé au préalable en utilisant un mécanisme réactionnel détaillé. D'autre part, les effets de la turbulence sur la flamme sont pris en compte par la modélisation de la densité de surface de flamme.

Différentes méthodes, basées sur des relations algébriques ou sur la résolution d'équations de transport, ont été développées pour exprimer Σ :

- le modèle le plus courant consiste à résoudre une équation de transport, pouvant s'écrire de façon générale sous la forme [40], [104] :

$$\frac{\partial\Sigma}{\partial t} + \nabla.(\widetilde{\boldsymbol{u}}\Sigma) = \nabla.(\overline{\rho}D_t\nabla\Sigma) + (\kappa_m + \kappa_t) - \epsilon. \tag{3.29}$$

  Différents termes de cette équation nécessitent une fermeture, notamment κ_m et κ_t qui représentent la production de surface de flamme par étirement, due respectivement au mouvement moyen du fluide et à la turbulence. ϵ représente la destruction de surface de flamme et doit tenir compte de différents phénomènes conduisant au quenching de la flamme, comme par exemple l'étirement, les interactions flamme/paroi ou l'annihilation mutuelle de fronts de flamme.
  Les modèles d'évaluation de ϵ, κ_t et κ_m ont fait l'objet de nombreuses études. Poinsot et Veynante [219] proposent néanmoins un résumé des méthodes que l'on peut trouver dans la littérature, essentiellement dans un contexte RANS. Notons que Hawkes et Cant [104] ont proposé différents modèles équivalents, adaptés aux simulations LES ;
- la densité de surface de flamme peut s'exprimer également sous la forme simplifiée suivante :

$$\Sigma = \Xi|\nabla\widetilde{c}|. \tag{3.30}$$

  Dans cette expression, Ξ nécessite une modélisation spécifique. On peut notamment citer les modèles algébriques de Fureby [79], se basant sur une description fractale du front de flamme, ou celui de Peters [163], qui reste valable à la fois dans le régime des flammelettes et dans le régime des flammes épaissies. Weller *et al.* [224] ont quant à eux développé une équation de transport pour le facteur de plissement ;
- finalement, Boger *et al.* [17] ont établi une relation algébrique permettant de définir Σ de manière simplifiée :

$$\Sigma = K\frac{\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}{\Delta}, \tag{3.31}$$

  où K peut être exprimé suivant $K = C\Xi$, avec $C = 4\sqrt{\frac{6}{\pi}}$. Cette relation est très proche de celle proposée par Bray *et al.* [30].

Modèles à G-équation :

Dans les modèles à G-équation (parfois appelés "level-set"), une grandeur G quelconque, permettant de localiser le front de flamme (défini comme une discontinuité) au sein de l'écoulement, est transportée (Peters [164]). En général, le front est repéré par une valeur particulière G^* de G, puis on pose $G < G^*$ dans les gaz frais et $G > G^*$ dans les gaz brûlés. Il est important de noter que la fonction G ne peut être assimilée à aucune grandeur physique particulière, elle ne constitue qu'un traceur du front de flamme.

L'évolution de cette grandeur est décrite par une équation de transport écrite sous une forme propagative [219] :

$$\overline{\rho}\frac{\partial\widetilde{G}}{\partial t} + \overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}.\nabla\widetilde{G} = \rho_u S_t|\nabla\widetilde{G}|, \tag{3.32}$$

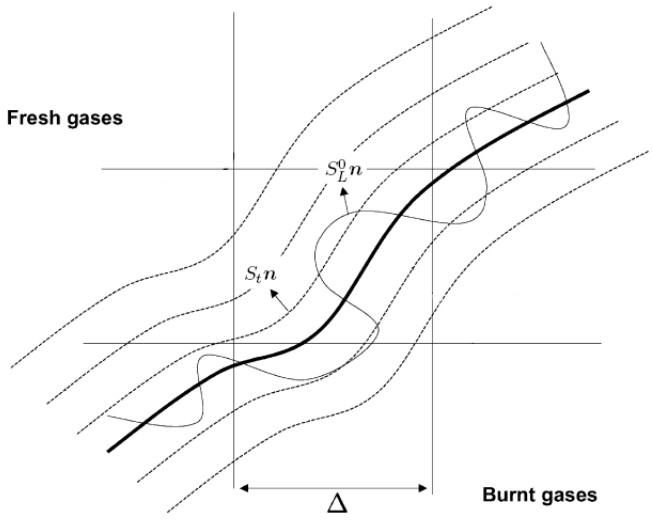

FIG. 3.2 – *Flamme turbulente filtrée dans le régime des flammelettes (Moureau et al. [145]). La ligne fine représente une iso-surface de c non filtrée et la ligne épaisse, l'iso-surface $G = G^*$ (assimilable à une iso-surface de c filtrée).*

où ρ_u représente la masse volumique des gaz frais.

Lorsque le champ de G est connu, il est possible de relier celui-ci aux champs de fractions massiques des espèces, de température et de densité, via l'utilisation d'un mécanisme cinétique global ou quasi-global. Toutefois, comme le souligne Pitsch [169], cette procédure n'est pas sans poser certaines difficultés.

Dans l'expression (3.32), S_t représente la vitesse turbulente de déplacement du front de flamme. De nombreux modèles fondés sur une fermeture algébrique ont été proposés dans un contexte LES pour évaluer cette vitesse. La signification de cette vitesse turbulente est illustrée figure 3.2.

L'intérêt du modèle level-set est de permettre le suivi de la dynamique du front de flamme sur un maillage LES (ou RANS), via une fonction continue. En ce sens, ce modèle est très proche du modèle à densité de surface de flamme présenté précédemment. On peut d'ailleurs montrer qu'il existe de fortes analogies entre ces deux modèles [217].

3.2.4 Approches statistiques

Définitions :

La description statistique des flammes turbulentes prémélangées repose essentiellement sur la connaissance de fonctions de densité de probabilité (PDF). Pour définir ces PDF, on considère une grandeur quelconque Ψ caractéristique de l'écoulement. La PDF $P(\Psi^*)$ permet de quantifier la probabilité que, en un point donné et à un instant donné, Ψ prenne une valeur comprise dans l'intervalle $\left[\Psi^* - \frac{\Delta\Psi}{2}, \Psi^* + \frac{\Delta\Psi}{2}\right]$.

Etant donné que les écoulements traités en combustion sont généralement à masse volumique variable, on travaille le plus souvent avec des grandeurs filtrées au sens de Favre (pondérées par la masse). Dans ce contexte, on introduit la PDF $\widetilde{P}$, définie par :

$$\widetilde{P}(\Psi^*; x, t) = \frac{\rho P(\Psi^*; x, t)}{\overline{\rho}}. \tag{3.33}$$

Par définition, P, et donc par extension $\widetilde{P}$, possèdent certaines propriétés particulières :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \widetilde{P}\left(\Psi^*; x, t\right) d\Psi^* = 1, \tag{3.34}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*\left(x, t\right) \widetilde{P}\left(\Psi^*; x, t\right) d\Psi^* = \widetilde{\Psi}\left(x, t\right), \tag{3.35}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi\left(\Psi^*; x, t\right) \widetilde{P}\left(\Psi^*; x, t\right) d\Psi^* = \widetilde{\Phi}\left(x, t\right), \tag{3.36}$$

où Ψ représente ici une variable scalaire quelconque dépendant du temps et de l'espace.

Dans le cadre d'un écoulement réactif, on considère généralement un vecteur $\mathbf{\Psi}$ de dimension N, dont les composantes sont les coordonnées de l'espace, les concentrations des espèces, la température et éventuellement le vecteur vitesse. La PDF résultant est alors une PDF jointe multidimensionnelle de dimension égale à celle de $\mathbf{\Psi}$. En supposant que le taux de production chimique de l'espèce i dépend de $\mathbf{\Psi}$, on peut écrire :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_i\left(x, t\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} ... \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_i\left(\Psi_1, ..., \Psi_N\right) \widetilde{P}\left(\Psi_1, ..., \Psi_N\right) d\Psi_1 ... d\Psi_N. \tag{3.37}$$

Il est important de noter que les PDF utilisées dans un cadre LES peuvent être interpretées de façon différente comparées aux PDF RANS [169]. Afin de différencier les deux interprétations, on trouve souvent les notations FDF ("Filtered Density Function") ou LEPDF ("Large Eddy Probability Density Function") pour exprimer les fonctions de densité de probabilité au sens LES. Gao et O'Brien [85] ou Colucci *et al.* [51] ont défini de façon formelle ces nouvelles fonctions et formulé leurs équations de transport.

La PDF au sens RANS peut être obtenue en répétant N fois la même expérience numérique, dans les mêmes conditions, et en relevant à chaque fois la valeur de la grandeur d'intérêt (par exemple la fraction de mélange) en un point et à un instant donnés [169]. La PDF peut donc être déterminée avec une bonne précision si l'on considère un nombre suffisant d'expériences. La FDF est définie comme la distribution de la grandeur considérée au sein d'un petit volume correspondant au filtre LES appliqué en un point donné. Il faut faire la différence ici entre la FDF qui est évaluée de cette manière et qui correspond à une réalisation à un instant donné, et la FPDF qui est obtenue en moyennant les FDF obtenues à N instants différents.

Par la suite la notation PDF sera retenue pour désigner les fonctions densité de probabilité, indépendamment de la modélisation de la turbulence, de manière à généraliser toutes les expressions introduites.

La principale difficulté liée à ce type de modèle reste l'évaluation des PDF. Deux approches sont possibles : l'approche à PDF présumée, où la PDF est évaluée en tout point à partir d'une fonction mathématique connue, ou l'approche à PDF transportée, pour laquelle une équation de transport pour cette fonction est résolue. Pour plus de détails sur ce dernier point, on peut se reporter à Pope [178], [180], ou Dopazo [58].

PDF présumées :

Les approches dites à PDF présumées constituent une solution alternative à la résolution d'une équation de transport sur $\widetilde{P}$. Différentes fonctions mathématiques peuvent être employées pour modéliser la forme des PDF de scalaires :

- les fonctions β monodimensionnelles sont définies sur l'intervalle $[0; 1]$, et peuvent s'écrire sous la forme suivante [27] :

$$\widetilde{P}\left(\Psi; x, t\right) = \frac{\Gamma\left(a+b\right)}{\Gamma\left(a\right)\Gamma\left(b\right)} \Psi\left(x, t\right)^{a-1} \left[1 - \Psi\left(x, t\right)\right]^{b-1}, \tag{3.38}$$

où la fonction Γ est définie par :

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^{+\infty} x^{\alpha-1} e^{-x} dx. \tag{3.39}$$

Après quelques développements, on peut montrer que les deux premiers moments statistiques de Ψ, $\widetilde{\Psi}$ et $\widetilde{\Psi''^2}$, s'expriment en fonction des deux paramètres a et b :

$$\widetilde{\Psi} = \frac{a}{a+b} \quad \text{et} \quad \widetilde{\Psi''^2} = \frac{ab}{(a+b)^2 (a+b+1)}. \tag{3.40}$$

En inversant ces expressions, on peut exprimer a et b en fonction des deux premiers moments statistiques de Ψ :

$$a = \widetilde{\Psi}\left[\frac{\widetilde{\Psi}\left(1-\widetilde{\Psi}\right)}{\widetilde{\Psi''^2}} - 1\right] \quad \text{et} \quad b = \left(1-\widetilde{\Psi}\right)\left[\frac{\widetilde{\Psi}\left(1-\widetilde{\Psi}\right)}{\widetilde{\Psi''^2}} - 1\right]. \tag{3.41}$$

Ainsi, les formes prises par la β-PDF sont connues si les deux premiers moments statistiques de Ψ sont donnés.
Ces fonctions sont particulièrement utilisées pour décrire les PDF de z et de c du fait de leur aptitude à reproduire des comportements observés expérimentalement ou lors de simulations DNS (Eswaran et Pope [72] et Girimaji [96]). Ainsi, lorsque $\widetilde{\Psi''^2}$ tend vers 0, la β-PDF tend vers un pic de Dirac unique centré en $\widetilde{\Psi}$. A l'inverse, lorsque $\widetilde{\Psi''^2}$ tend vers sa valeur maximale, la β-PDF tend vers une forme bi-modale représentée par deux pics de Dirac localisés en 0 et en 1 (limite BML, caractérisée par un front de flamme infiniment mince).
La figure 3.3 présente l'évolution de la β-PDF d'une variable quelconque Ψ pour deux valeurs de $\widetilde{\Psi}$ (0,5 et 0,25) et pour différentes valeurs de $\widetilde{\Psi''^2}$.

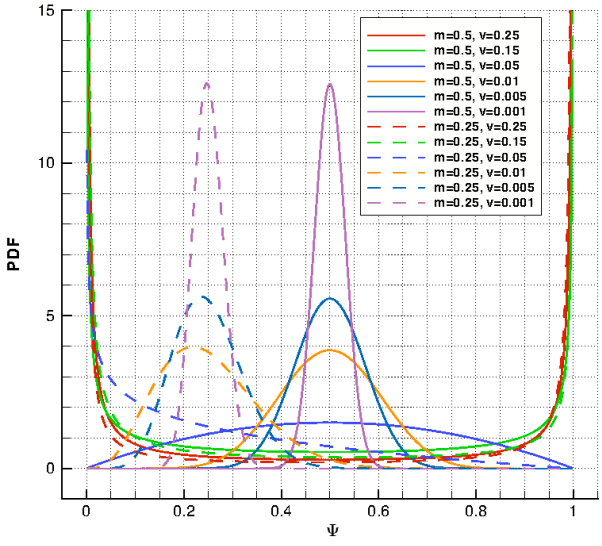

FIG. 3.3 – *PDF d'une variable quelconque Ψ évaluée sous la forme d'une fonction β. Les courbes sont tracées pour différentes valeurs de $\widetilde{\Psi}$ et de $\widetilde{\Psi''^2}$.*

Notons que Girimaji [96] a étendu les fonctions β monodimensionnelles telles qu'elles sont présentées ici, à un nombre quelconque de dimensions. Il est ainsi possible d'utiliser des β-PDF multidimensionnelles pour modéliser des PDF jointes, par exemple en z et en c : $\widetilde{P}(z,c)$ (Landenfeld *et al.* [125]) ;

- dans le régime des flammelettes, les PDF de scalaires tendent vers des formes parfaitement bimodales. On peut définir ces fonctions de la manière suivante (ici pour c) :

$$\widetilde{P}(c;x,t) = \alpha(x,t)\,\delta[c(x,t)] + \beta(x,t)\,\delta[1-c(x,t)] + F[c(x,t)], \tag{3.42}$$

où $\alpha+\beta+\gamma=1$ sont des coefficients. Les valeurs prises par ces trois paramètres peuvent être déterminées en fonction des deux premiers moments statistiques de c. La fonction F permet de tenir compte des effets de chimie finie. Elle peut être reliée à différentes grandeurs physiques, notamment à la densité de surface de flamme [56], [31] (voir en annexe F) ;

- si on pose $F=0$ dans (3.42), on obtient une PDF parfaitement bimodale, formée de deux pics de Dirac centrés en 0 et en 1 :

$$\widetilde{P}(c;x,t) = \alpha(x,t)\,\delta(c) + [1-\alpha(x,t)]\,\delta(1-c). \tag{3.43}$$

Ceci revient à considérer le front de flamme comme infiniment mince. Dans ce cas, les gaz ne peuvent atteindre que deux états distincts : frais ou brûlés. Le modèle BML (Bray, Moss et Libby [34], [33]) découle directement de cette hypothèse.
Suivant [34], et en se servant de la définition (4.13), les hauteurs respectives des deux pics peuvent être déterminées par la valeur moyenne de la variable d'avancement et le rapport entre les masses volumiques des gaz frais et des gaz brûlés (ϖ, appelé facteur de dégagement de chaleur) :

$$\alpha = \frac{1-\widetilde{c}}{1+\varpi\widetilde{c}} \quad \text{avec} \quad \varpi = \frac{\rho_u}{\rho_b} - 1. \tag{3.44}$$

Dans ce cas également, la variance du scalaire c est simplement exprimée suivant :

$$\widetilde{c''^2} = \widetilde{c}(1-\widetilde{c}). \tag{3.45}$$

De nombreuses relations algébriques découlent directement de l'hypothèse BML. Ainsi, on peut réécrire par exemple le taux de réaction de la variable d'avancement ou le taux de dissipation scalaire de c ($\widetilde{\chi_c} = D_c|\nabla\widetilde{c}|^2$) de la manière suivante :

$$\overline{\rho}\widetilde{\dot{\omega}_c} = \overline{\rho}\frac{1}{2c_m-1}\widetilde{\chi_c} = \overline{\rho}\frac{1}{2c_m-1}\frac{\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}{\tau_t}, \tag{3.46}$$

avec τ_t un temps turbulent et :

$$c_m = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} c\dot{\omega}_c d\xi}{\int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_c d\xi}, \tag{3.47}$$

où ξ est la coordonnée normale à la flamme. c_m contient des informations sur la structure de la flamme. Cette grandeur peut être calculée *a priori* en utilisant un mécanisme réactionnel détaillé. La relation algébrique (3.46) permet de déterminer de manière simple et instantanée le terme source chimique de la variable d'avancement, ce qui peut se révéler particulièrement utile.

PDF transportées :

Une équation de transport peut être écrite et résolue pour les fonctions densité de probabilité jointes (dépendant des concentrations de chaque espèce, de la température, et parfois du vecteur vitesse). Cette méthode est bien entendu la plus précise des méthodes exposées ici. De plus, étant donné qu'aucune hypothèse n'est faite sur la forme de la PDF, ce type de modèle reste valide quel que soit le régime de combustion considéré. Toutefois, sa mise en œuvre reste extrêmement lourde et nécessite par conséquent des ressources informatiques importantes.

L'équation de transport d'une PDF (ici définie dans l'espace des compositions $\mathbf{\Psi}$) peut s'écrire sous sa forme la plus générale possible de la façon suivante [219] :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \widetilde{P}\left(\mathbf{\Psi}^{*};x,t\right)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial \mathbf{\Psi}}\left[\left(\overline{\frac{d\mathbf{\Psi}\left(x,t\right)}{dt}|\mathbf{\Psi}^{*}}\right)\widetilde{P}\left(\mathbf{\Psi};x,t\right)\right] \\ &= -\frac{\partial}{\partial \mathbf{\Psi}}\left\{\left[-\overline{\boldsymbol{u}.\nabla\mathbf{\Psi}|\mathbf{\Psi}^{*}}+\left(\overline{\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial \mathbf{\Psi}}{\partial x}\right)|\mathbf{\Psi}^{*}}\right)+\dot{\boldsymbol{\omega}}\left(\mathbf{\Psi}^{*}\right)\right]\widetilde{P}\left(\mathbf{\Psi}^{*};x,t\right)\right\}.\end{aligned} \tag{3.48}$$

Le terme $D\left(\overline{\frac{\partial^2 \mathbf{\Psi}}{\partial x^2}|\mathbf{\Psi}^{*}}\right)$ est appelé terme de micromélange. Il nécessite un modèle de fermeture spécifique comme par exemple le modèle IEM/LMSE de Dopazo et O'Brien [59]. $\dot{\boldsymbol{\omega}}\left(\mathbf{\Psi}^{*}\right)$ est un terme de production lié à la grandeur $\mathbf{\Psi}$ et évalué en $\mathbf{\Psi}=\mathbf{\Psi}^{*}$.

Il est également possible d'écrire une équation de transport pour les PDF jointes composition/vitesse. Dans ce cas, des termes supplémentaires apparaissent pour tenir compte des gradients dans l'espace des vitesses.

Lorsque la PDF possède un nombre de degrés de liberté typiquement supérieur ou égal à trois, la résolution de telles équations par les méthodes de calcul employées couramment (volumes finis) demeure impossible. Dans ce cas, il est plus approprié d'utiliser par exemple une approche statistique lagrangienne dans laquelle on va suivre un grand nombre de particules numériques dans l'écoulement. La PDF est alors reconstruite à l'aide d'une méthode discrète de type Monte-Carlo [178].

Le modèle PEUL (Caillau [39], Zamuner et Dupoirieux [233]), développé à l'ONERA, est un modèle hybride eulérien-lagrangien permettant de reconstruire les PDF jointes position/composition par une méthode de Monte-Carlo. Dans ce cas, le transport des particules lagrangiennes est couplé à la résolution des équations eulériennes donnant accès notamment aux vitesses moyennes de l'écoulement. Dans le cas où le couplage ne se fait que du champ eulérien vers les particules ("one-way" coupling), l'approche peut être interprétée comme un modèle de post-traitement permettant la prise en compte d'une chimie complexe. PEUL est décrit plus en détail en annexes.

3.2.5 Comparaison des domaines de validité de différents modèles

Au chapitre 1, le diagramme de combustion de Dusing *et al.* [63] a été introduit pour identifier les différents régimes de combustion prémélangée en fonction d'échelles physiques et d'une échelle numérique (la taille de maille). Ce type de diagramme peut nous permettre d'identifier le modèle de combustion turbulente le plus apte à traiter les applications visées. Si on restreint de plus notre choix aux modèles capables d'être couplés à une chimie tabulée, il est possible de sélectionner le modèle de combustion turbulente le mieux adapté pour la suite du mémoire.

Les figures 3.4 et 3.5 permettent la comparaison des domaines de validité de différents modèles :

- le modèle EBU (pour la LES et le RANS), peut être utilisé du régime des flammelettes au régime de combustion distribuée, mais pas en régime laminaire ou en DNS. Il tend à largement surestimer le taux de production de la variable d'avancement et il n'est en aucun cas capable de tenir compte d'une chimie complexe ;
- les modèles à G-équation ainsi que les modèles à densité de surface de flamme et le modèle BML, sont destinés aux flammes sous-résolues dans le régime des flammelettes ou des flammes épaissies. Leurs domaines de validité est donc limité par la droite $\Delta=\delta_L^0$. Ces trois modèles sont basés sur l'évaluation d'un champ de variable d'avancement et ne peuvent donc pas directement tenir compte d'une chimie complexe. Ils peuvent cependant éventuellement être couplés à une table chimique (ce qui peut se révéler délicat) ;
- les modèles à PDF transportées, de même que le modèle CMC, sont capables de modéliser les flammes sur l'ensemble du domaine et peuvent de plus tenir compte d'une chimie complexe ;

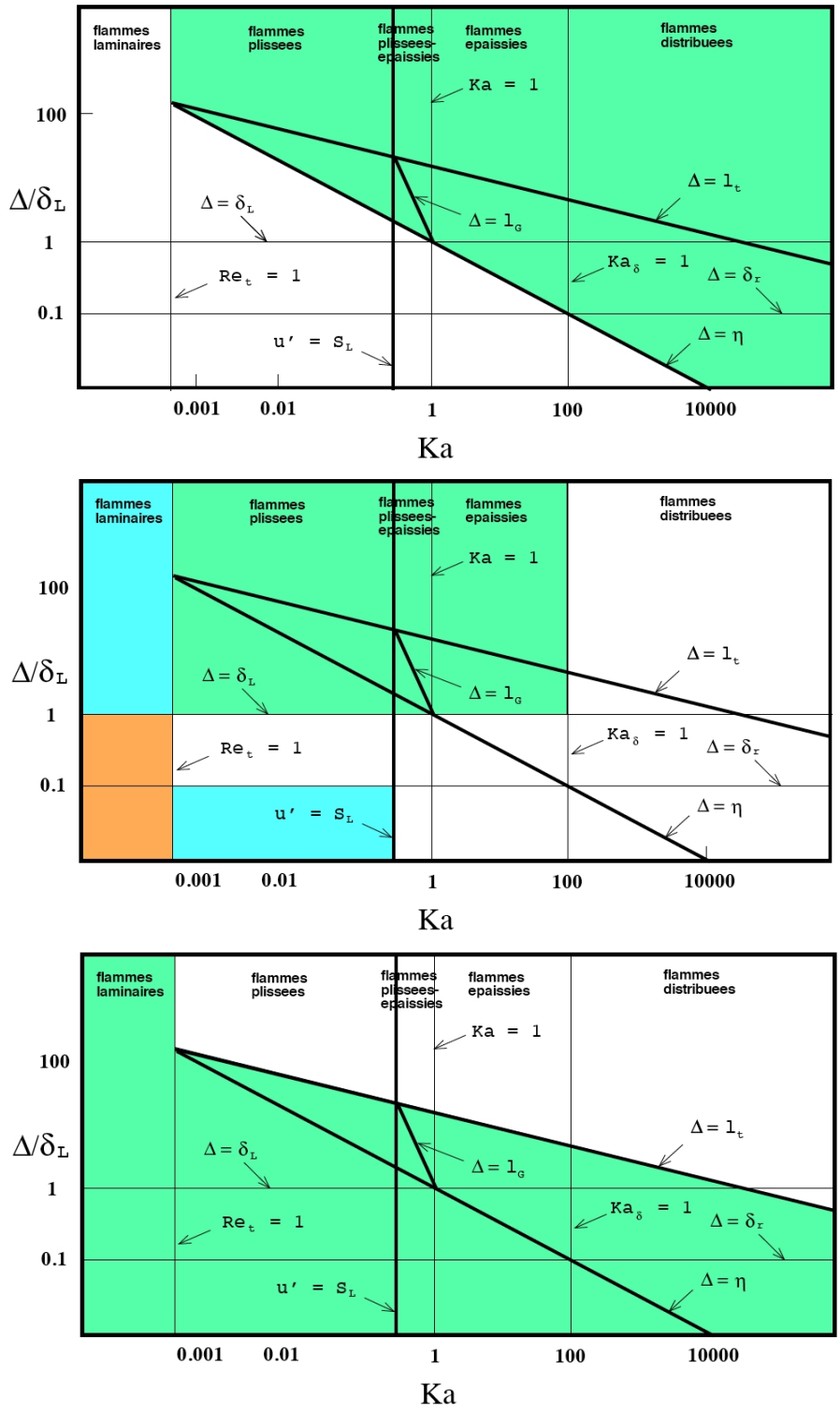

FIG. 3.4 – *Domaines de validité de différents modèles existants sur le diagramme de Dusing et al. [63]. En haut , modèle EBU, au centre, les modèles de flammelettes basés sur les approches BML, FSD et G-équation (en vert, domaine pour les trois approches, en orange BML et G-équation, et en bleu uniquement G-équation), en bas, modèle de flamme épaissie et LEM.*

- le modèle TFLES (modèle de flamme épaissie) peut être utilisé sur l'ensemble du domaine, mais uniquement dans un cadre LES/DNS (en dessous de la courbe $\Delta = l_t$). De plus, il n'est pas

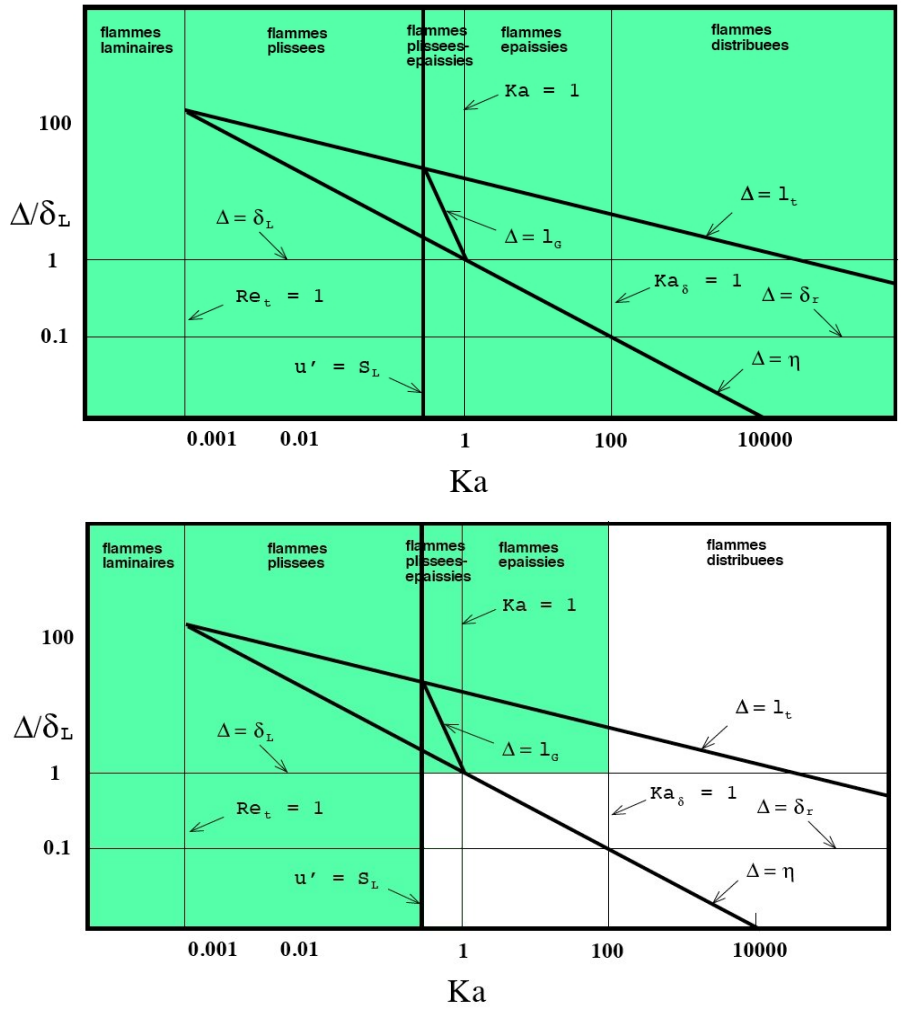

FIG. 3.5 – *Domaines de validité de différents modèles existants sur le diagramme de Dusing et al. [63]. En haut, modèles à PDF transportées et en bas, modèle à PDF présumées (avec β-PDF).*

capable de prendre en compte une chimie complexe ;

- avec le modèle à β-PDF, basé sur l'hypothèse de flammelettes, la zone de combustion distribuée n'est pas accessible. L'utilisation du modèle dans la zone correspondant aux flammes épaissies ou plissées épaissies, lorsque $\delta_r^0 < \eta < \delta_L^0$, n'est possible que si la flamme est entièrement contenue sous la maille[3]. Ce modèle permet la prise en compte directe d'une chimie complexe, dans le régime des flammelettes.

Le modèle à PDF présumées constitue un bon compromis parmi tous ces modèles. Comparé aux modèles de flammelettes (BML, FSD et G-équation) il permet de tenir compte des effets de chimie complexe pour un coût de calcul réduit. Au contraire, le modèle TFLES ne peut pas être couplé à une chimie complexe, et les modèles à PDF transportées restent extrêmement exigeants en ressources informatiques. Pour des raisons pratiques, les modèles à PDF présumées semblent également bien adaptés à une utilisation conjointe avec des tables chimiques FPI, comme cela sera montré dans la suite de ce chapitre.

[3] l'utilisation du modèle dans ces conditions est possible, mais elle n'est toutefois pas conseillée.

3.3 Modélisation de la turbulence avec CEDRE : équations filtrées/moyennées

Cette section a pour but d'introduire les équations filtrées résolues par le code CEDRE lors de la simulation d'écoulements turbulents réactifs. On se place ici dans un cadre général, applicable à la fois aux approches RANS (filtre temporel) et LES (filtre spatial). Les fermetures spécifiques de ces équations, utilisées au cours de ce travail, sont également présentées.

3.3.1 Equations filtrées

Les équations de Navier-Stokes filtrées résolues par CEDRE s'écrivent :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{Y_i}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{Y_i}\right) + \nabla.\overline{\boldsymbol{J}}_i - \overline{\rho}\widetilde{\dot{\omega}_i} = RHS_S, \tag{3.49}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}} \otimes \widetilde{\boldsymbol{u}}\right) - \nabla.\left(\overline{\boldsymbol{\tau}} - \overline{p}\boldsymbol{Id}\right) = RHS_M, \tag{3.50}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{e_t}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{e_t}\widetilde{\boldsymbol{u}}\right) - \nabla.\left[\left(\overline{\boldsymbol{\tau}} - \overline{p}\mathbf{I}\right)\widetilde{\boldsymbol{u}}\right] + \nabla.\overline{\boldsymbol{J_t}} = RHS_E, \tag{3.51}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{z}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{z}\right) + \nabla.\overline{\boldsymbol{J}}_z = RHS_z. \tag{3.52}$$

Par analogie au jeu d'équations laminaires présenté au chapitre précédent, une équation pour un scalaire passif z, nécessaire dans le cadre du modèle FPI, a été ajoutée. Ces équations sont fermées par la loi des gaz parfaits filtrée :

$$\overline{p} = \frac{\overline{\rho}R\widetilde{T}}{M\left(\widetilde{T}\right)}. \tag{3.53}$$

Les membres de droite intervenant dans ces équations sont fermés par les modèles de turbulence. Ils peuvent s'écrire (e_t étant l'énergie totale) :

$$RHS_S = \nabla.\left[\overline{\rho}\left(\widetilde{\boldsymbol{u}Y_i} - \widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{Y_i}\right)\right] = \boldsymbol{J}_i^t, \tag{3.54}$$

$$RHS_M = \nabla.\left[\overline{\rho}\left(\widetilde{\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}} - \widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{\boldsymbol{u}}\right)\right] = \boldsymbol{\tau}^t, \tag{3.55}$$

$$RHS_E = \nabla.\left[\overline{\rho e_t \boldsymbol{u} - \left(\boldsymbol{\tau} - p\boldsymbol{Id}\right)\boldsymbol{u}} - \overline{\rho}\widetilde{e_t}\widetilde{\boldsymbol{u}} + \left(\overline{\boldsymbol{\tau}} - \overline{p}\boldsymbol{Id}\right)\widetilde{\boldsymbol{u}}\right] = \boldsymbol{J_t}^t, \tag{3.56}$$

$$RHS_z = \nabla.\left[\overline{\rho}\left(\widetilde{\boldsymbol{u}z} - \widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{z}\right)\right] = \boldsymbol{J}_z^t. \tag{3.57}$$

Les flux de diffusion de quantité de mouvement, d'espèces et d'énergie sont classiquement modelisés par analogie avec les phénomènes de diffusion moléculaire :

$$\overline{\boldsymbol{\tau}} \approx -\mu\left(\widetilde{T}\right)\left[\nabla\widetilde{\boldsymbol{u}} + \left(\nabla\widetilde{\boldsymbol{u}}\right)^T - \frac{2}{3}\nabla.\widetilde{\boldsymbol{u}}\boldsymbol{Id}\right], \tag{3.58}$$

$$\overline{\boldsymbol{J}_i} \approx -\overline{\rho}D_i\left(\widetilde{T}\right)\nabla\widetilde{Y_i}, \tag{3.59}$$

$$\overline{\boldsymbol{J_t}} \approx -\kappa\left(\widetilde{T}\right)\nabla\widetilde{T} + \sum_{i=1}^{N_e}\overline{\boldsymbol{J}_i}\widetilde{h_i}, \tag{3.60}$$

$$\overline{\boldsymbol{J}_z} \approx -\overline{\rho}D_z\left(\widetilde{T}\right)\nabla\widetilde{z}. \tag{3.61}$$

Du fait de la non linéarité de ces flux , les expressions précédentes doivent en fait comporter certains termes supplémentaires. Il en va de même des coefficients de ces lois (diffusion moléculaire, viscosité

dynamique et conductivité thermique) que l'on évalue ici directement à partir de la valeur filtrée de la température.

De la même manière que dans le cas laminaire, l'évaluation du coefficient D_z peut se révéler problématique. On choisit souvent de fixer un nombre de Schmidt constant pour z fixé à 0,9.

3.3.2 Fermeture des équations

Dans le terme RHS_M, la grandeur $\overline{\rho}\left(\widetilde{\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u}}-\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{\boldsymbol{u}}\right)$, que l'on peut noter $\boldsymbol{\tau}^t$, représente les contraintes visqueuses turbulentes. En RANS, ce tenseur se réduit au tenseur de Reynolds :

$$\boldsymbol{\tau}^t = \overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}''\boldsymbol{u}''}. \tag{3.62}$$

En revanche, au sens LES, le tenseur des contraintes visqueuses de sous-maille comporte des termes supplémentaires induits par la non projectivité du filtre :

$$\boldsymbol{\tau}^t = \underbrace{\overline{\rho}\left(\widetilde{\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{\boldsymbol{u}}}-\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{\boldsymbol{u}}\right)}_{\boldsymbol{L}} + \underbrace{\overline{\rho}\left(\widetilde{\widetilde{\boldsymbol{u}}\boldsymbol{u}^{"}}+\widetilde{\boldsymbol{u}^{"}\widetilde{\boldsymbol{u}}}\right)}_{\boldsymbol{C}} + \underbrace{\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}^{"}\boldsymbol{u}^{"}}}_{\boldsymbol{R}}. \tag{3.63}$$

En plus du tenseur de Reynolds représentant les interactions entre les échelles de sous-maille, apparaissent deux nouveaux tenseurs : le tenseur de Léonard $\boldsymbol{L}$ associé aux interactions entre les grandes échelles résolues, et le tenseur croisé $\boldsymbol{C}$ représentant les interactions entre les petites échelles de sous-maille et les grandes échelles résolues. La modélisation du tenseur des contraintes turbulentes doit prendre en compte l'existence de cette décomposition triple. Toutefois, les modèles généralement utilisés ne s'intéressent qu'à la modélisation du seul tenseur de Reynolds.

Dans CEDRE, que l'on se trouve dans un contexte RANS ou LES, le tenseur $\boldsymbol{\tau}^t$ s'exprime suivant l'hypothèse de viscosité turbulente de Boussinesq. On écrit alors :

$$\boldsymbol{\tau}^t \approx \mu_t\left[\nabla\widetilde{\boldsymbol{u}}+(\nabla\widetilde{\boldsymbol{u}})^T-\frac{2}{3}\nabla.\widetilde{\boldsymbol{u}}\boldsymbol{Id}\right]-\frac{2}{3}\overline{\rho}k\boldsymbol{Id}, \tag{3.64}$$

où k représente l'énergie cinétique de la turbulence et μ_t le coefficient de viscosité turbulente. En général, la partie isotrope du tenseur n'est pas toujours prise en compte en LES.

Le coefficient de viscosité turbulente doit être modélisé afin de pouvoir évaluer le tenseur $\boldsymbol{\tau}_t$. Tous les calculs CEDRE présentés au sein de ce mémoire ont été réalisés à l'aide des mêmes modèles de turbulence (en RANS et en LES) :

- dans le cadre des simulations LES, c'est le modèle de Smagorinsky [201] qui a été utilisé :

$$\mu_t = \overline{\rho}\left(C_S\Delta\right)^2\sqrt{\widetilde{\boldsymbol{D}}:\widetilde{\boldsymbol{D}}}. \tag{3.65}$$

  La constante C_S est fixée à 0,1 dans CEDRE et la taille de coupure du filtre, correspondant dans notre cas à la taille de la maille, est évaluée à partir du rapport entre le volume de chaque cellule et la somme des aires des faces de celles-ci ;
- en RANS, on utilise un modèle $k-L$ qui nécessite la résolution de deux équations de transport pour les scalaires k et L [64]. Ces deux grandeurs peuvent ensuite être reliées à la viscosité turbulente via :

$$\mu_t = \overline{\rho}C_\mu^{1/4}\sqrt{k}L, \tag{3.66}$$

  où la constante C_μ vaut en général 0,09. L est une longueur caractéristique de la turbulence qui peut être assimilée à l'échelle intégrale.

Les flux de diffusion thermique et de masse turbulents doivent également être fermés (termes RHS_E, RHS_S et RHS_z). Les fermetures employées sont identiques en RANS et en LES et sont également fondées sur l'hypothèse de gradient :

$$\boldsymbol{J}_i^t = \overline{\rho}\left(\widetilde{\boldsymbol{u}Y_i}-\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{Y_i}\right) \approx -\overline{\rho}D_t\nabla\widetilde{Y_i}, \tag{3.67}$$

$$\boldsymbol{J_t}^t = \overline{\rho e_t \boldsymbol{u} - (\boldsymbol{\tau} - p\boldsymbol{Id})\,\boldsymbol{u}} - \overline{\rho}\widetilde{e_t}\widetilde{\boldsymbol{u}} + (\overline{\boldsymbol{\tau}} - \overline{p}\boldsymbol{Id})\,\widetilde{\boldsymbol{u}} \approx -\lambda_t \nabla \widetilde{T} + \sum_{i=1}^{N_e} \boldsymbol{J}_i^t \widetilde{h}_i, \tag{3.68}$$

$$\boldsymbol{J}_z^t = \overline{\rho}\,(\widetilde{\boldsymbol{u}z} - \widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{z}) \approx -\overline{\rho} D_t \nabla \widetilde{z}, \tag{3.69}$$

Les coefficients de conductivité thermique et de diffusion turbulents sont évalués respectivement à partir de nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents constants. On a ainsi :

$$\lambda_t = \frac{\mu_t c_p}{Pr_t} \quad \text{et} \quad D_t = \frac{\nu_t}{Sc_t}. \tag{3.70}$$

Les nombres Sc_t et Pr_t sont généralement fixés de l'ordre de 0,9.

3.4 Modélisation des interactions combustion/turbulence dans le cadre de l'utilisation de tables FPI

Les tables initialement créées avec PREMIX nous donnent accès à des grandeurs instantanées dépendant uniquement de z et c (ou uniquement de c lorsque l'on considère un prémélange parfait) :

$$Y_i^{tab}(z,c) \quad \text{et} \quad \dot{\omega}_i^{tab}(z,c)\,. \tag{3.71}$$

Par définition, les valeurs filtrées au sens de Favre de ces deux variables sont données par :

$$\widetilde{Y}_i = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} Y_i^{tab}(z^*,c^*)\,\widetilde{P}(z^*,c^*)\,dz^*dc^*, \tag{3.72}$$

$$\widetilde{\dot{\omega}}_i = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_i^{tab}(z^*,c^*)\,\widetilde{P}(z^*,c^*)\,dz^*dc^*. \tag{3.73}$$

Ces relations font intervenir une PDF bidimensionnelle dépendant à la fois de z et de c. L'approximation de cette PDF jointe par une fonction présumée est possible [96], mais il est souvent plus pratique de la décomposer de façon exacte en un produit de deux fonctions monodimensionnelles :

$$\widetilde{P}(z^*,c^*) = \widetilde{P}(c^*)\,\overline{P}(z^*|c=c^*)\,, \tag{3.74}$$

où $\overline{P}(z^*|c=c^*)$ est la PDF de z^* conditionnée à c^*. L'évaluation de cette dernière fonction introduit de nouvelles difficultés sachant que les valeurs de z conditionnées à c ne sont pas connues directement. Par conséquent, une nouvelle hypothèse est nécessaire. On suppose ainsi que les variables z et c sont statistiquement indépendantes, ce qui permet d'écrire :

$$\overline{P}(z^*|c=c^*) \approx \overline{P}(z^*)\,. \tag{3.75}$$

On trouve alors :

$$\widetilde{P}(z^*,c^*) \approx \widetilde{P}(c^*)\,\overline{P}(z^*)\,. \tag{3.76}$$

Suivant cette relation, la détermination de la PDF bidimensionnelle en z et c se réduit à l'évaluation de deux PDF monodimensionnelles dont la modélisation est plus simple. Les équations (3.72) et (3.73) peuvent alors être réécrites suivant :

$$\widetilde{Y}_i \approx \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} Y_i^{tab}(z^*,c^*)\,\widetilde{P}(c^*)\,\overline{P}(z^*)\,dz^*dc^*, \tag{3.77}$$

$$\widetilde{\dot{\omega}}_i \approx \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_i^{tab}(z^*,c^*)\,\widetilde{P}(c^*)\,\overline{P}(z^*)\,dz^*dc^*. \tag{3.78}$$

A partir de ces expressions, on peut définir deux niveaux de simplification supplémentaires [188] :

- dans un premier temps, l'évaluation des grandeurs filtrées via (3.77) et (3.78) peut être rendue indépendante de la valeur de z locale (respectivement c). Les intégrales sont alors réalisées suivant une unique direction, à savoir c (respectivement z). Pour ce faire, les grandeurs chimiques sont directement interpolées dans la table laminaire en fonction de $\widetilde{z}$ (respectivement $\widetilde{c}$). Cette hypothèse revient à supposer que la PDF $\overline{P}(z^*)$ (respectivement $\widetilde{P}(c^*)$) est approchée par un pic de Dirac centré sur la moyenne (dans le cas de z) :

$$\widetilde{Y}_i = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} Y_i^{tab}(c^*,z^*)\,\widetilde{P}(c^*)\,\overline{\delta}(z^*-\widetilde{z})\,dc^*dz^* \tag{3.79}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} Y_i^{tab}(c^*,\widetilde{z})\,\widetilde{P}(c^*)\,dc^*, \tag{3.80}$$

$$\widetilde{\dot{\omega}}_i = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_i^{tab}(c^*,z^*)\,\widetilde{P}(c^*)\,\overline{\delta}(z^*-\widetilde{z})\,dc^*dz^* \tag{3.81}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_i^{tab}(c^*,\widetilde{z})\,\widetilde{P}(c^*)\,dc^*. \tag{3.82}$$

  La PDF en c (respectivement z) est ensuite présumée par une fonction mathématique donnée. Dans cette approche, les fluctuations de la fraction de mélange (respectivement de la variable d'avancement) sont négligées ;
- en allant plus loin dans la simplification, il est également possible d'interpoler les grandeurs chimiques dans les tables FPI laminaires directement en fonction de $\widetilde{z}$ et $\widetilde{c}$. Ceci revient à approcher les PDF de z et de c par deux pics de Dirac respectivement centrés en $\widetilde{z}$ et $\widetilde{c}$. Il vient :

$$\widetilde{Y}_i = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} Y_i^{tab}(c^*,z^*)\,\widetilde{\delta}(c^*-\widetilde{c})\,\overline{\delta}(z^*-\widetilde{z})\,dc^*dz^* \tag{3.83}$$

$$= Y_i^{tab}(\widetilde{c},\widetilde{z}), \tag{3.84}$$

$$\widetilde{\dot{\omega}}_i = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_i^{tab}(c^*,z^*)\,\widetilde{\delta}(c^*-\widetilde{c})\,\overline{\delta}(z^*-\widetilde{z})\,dc^*dz^* \tag{3.85}$$

$$= \dot{\omega}_i^{tab}(\widetilde{c},\widetilde{z}). \tag{3.86}$$

  Cette approche peut être comparée au modèle quasi-laminaire (souvent appelé "no model"). Bien sûr, cette méthode connaît de nombreuses limitations, en particulier liées au fait que le mélange turbulent et les fluctuations turbulentes de c ne sont pas pris en compte.

3.5 Evaluation des PDF : les fonctions β

Parmi les différentes fonctions possibles pour approcher la forme des PDF de z et de c, l'utilisation de β-PDF a été retenue. Ces fonctions ne peuvent être employées que dans le régime des flammelettes.

Par ailleurs, il a également été envisagé la possibilité d'utiliser des PDF définies suivant le concept de densité de surface de flamme pour le scalaire c. La construction de telles PDF est décrite en annexes. Compte tenu des désavantages de ces fonctions, nous avons conservé au cours de ce travail les seules β-PDF.

La fonction β (Bradley *et al.* [27], Girimaji [96]) est la fonction mathématique la plus utilisée pour modéliser la forme des PDF de scalaires. Un des principaux avantages de celle-ci est qu'elle permet de définir la forme de la PDF à la fois de z et de c. Cette fonction a déja été introduite précédemment (équations (3.38) à (3.41)).

La PDF β est entièrement définie par la connaissance des deux premiers moments statistiques du scalaire considéré. Dans le cas où les données issues des tables FPI dépendent de z et de c, deux PDF doivent être évaluées. Le rôle du modèle de combustion turbulente implanté dans le code de CFD est donc de calculer les moments statistiques de ces deux grandeurs, soit : $\widetilde{c}$, $\widetilde{z}$, $\widetilde{c''^2}$ et $\widetilde{z''^2}$.

Différentes difficultés numériques peuvent apparaître lors de la construction des β-PDF. Ces difficultés nécessitent l'utilisation d'algorithmes spécifiques permettant de définir ces PDF avec précision sur l'ensemble de leur domaine de définition. La procédure retenue au cours de ce travail est exposée en annexe E.

3.6 Moments du premier ordre : $\widetilde{z}$ et $\widetilde{c}$

Les moments du premier ordre (correspondant aux grandeurs filtrées) peuvent être déterminés de façon directe par la résolution d'équations de transport obtenues après le filtrage des équations de z et c :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{z}}{\partial t} + \nabla.\left[\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{z} - \nabla.\left(\overline{\rho}D_z\nabla\widetilde{z}\right)\right] = -\nabla.\boldsymbol{\tau}_z^t, \tag{3.87}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{c}}{\partial t} + \nabla.\left[\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{c} - \nabla.\left(\overline{\rho}D_c\nabla\widetilde{c}\right)\right] = -\nabla.\boldsymbol{\tau}_c^t + \overline{\rho}\widetilde{\dot{\omega}_c}. \tag{3.88}$$

Ces deux équations font apparaître les flux de diffusion turbulente de sous-maille : $\boldsymbol{\tau}_z^t$ et $\boldsymbol{\tau}_c^t$. Ces flux sont fermés par une hypothèse de type gradient :

$$\boldsymbol{\tau}_z^t = -\overline{\rho}D_t\nabla\widetilde{z}, \tag{3.89}$$

$$\boldsymbol{\tau}_c^t = -\overline{\rho}D_t\nabla\widetilde{c}. \tag{3.90}$$

Le coefficient de diffusion turbulente est égal à : $D_t = \frac{\nu_t}{Sc_t}$, où ν_t est la viscosité turbulente donnée par le modèle de turbulence de sous-maille et Sc_t un nombre de Schmidt turbulent fixé à 0,9. L'évaluation des coefficients de diffusion D_z et D_c, qui reste délicate, a été discutée dans le chapitre précédent dans un contexte laminaire.

Le terme source filtré, apparaissant dans l'équation de transport de $\widetilde{c}$, est fermé grâce aux PDF présumées.

A noter que lorsque l'on se place dans le contexte d'une combustion partiellement prémélangée, c dépend de z, ce qui conduit à l'apparition de termes supplémentaires dans l'équation (3.88) (voir Bray *et al.* [32]). Ces termes ont également été explicités dans la section 2.4.5 (relation (2.74)). Au cours de cette étude, ces termes ont été négligés.

Dans le cadre du couplage du modèle FPI avec le code CEDRE, nous avons vu que le fait de transporter les espèces majoritaires présentes dans l'écoulement nous permettait d'éviter de résoudre l'équation de transport relative à c. En pratique, l'équation (3.88) n'est donc pas résolue et est remplacée par :

$$\widetilde{c} = \frac{\widetilde{Y_{CO_2}} + \widetilde{Y_{CO}}}{\widetilde{Y_{CO_2}^{eq}} + \widetilde{Y_{CO}^{eq}}}, \tag{3.91}$$

où $\widetilde{Y_{CO_2}^{eq}}$ et $\widetilde{Y_{CO}^{eq}}$ sont les valeurs à l'équilibre de Y_{CO_2} et Y_{CO} moyennées suivant z. Ces grandeurs peuvent être approchées dans les tables directement en fonction de $\widetilde{z}$, en utilisant des interpolations linéaires, soit :

$$\widetilde{Y_{CO_2}^{eq}} = Y_{CO_2}^{eq}\left(\widetilde{z}\right) \quad \text{et} \quad \widetilde{Y_{CO}^{eq}} = Y_{CO}^{eq}\left(\widetilde{z}\right). \tag{3.92}$$

De même que dans le cas laminaire, en raison des difficultés de l'approche à assurer la conservation des atomes, la résolution d'une équation de transport pour $\widetilde{z}$ s'impose, contrairement à $\widetilde{c}$. Ainsi, du

fait de la méthode de couplage indirecte imposée entre les tables et CEDRE, la relation (2.12) ne peut pas être utilisée directement étant donné que celle-ci présuppose que chaque élément est strictement conservé au sein de l'écoulement.

3.7 Moments du second ordre : $\widetilde{z''^2}$ et $\widetilde{c''^2}$

Le calcul des moments du second ordre de z et de c est plus délicat que celui des moments du premier ordre. Il est réalisé soit par la résolution d'équations de transport (méthode la plus précise mais numériquement plus lourde), soit grâce à des relations algébriques découlant de ces équations.

Avant de présenter ces méthodes, on rappelle simplement l'expression du moment d'ordre deux d'une grandeur quelconque Ψ :

$$\widetilde{\Psi''^2} = \widetilde{\left(\widetilde{\Psi} - \Psi\right)^2} \tag{3.93}$$

$$= \widetilde{\Psi\Psi} - \widetilde{\Psi}\widetilde{\Psi}. \tag{3.94}$$

Au sens LES, cette grandeur correspond à une variance de sous-maille, et est généralement appelée variance SGS.

En pratique, il est préférable d'utiliser la grandeur σ_Ψ (appelée facteur de ségrégation) définie comme une variance normalisée (pour Ψ variant de 0 à 1) :

$$\sigma_\Psi = \frac{\widetilde{\Psi''^2}}{\widetilde{\Psi}\left(1-\widetilde{\Psi}\right)}. \tag{3.95}$$

Des équations de transport pour les moments du second ordre de z et de c peuvent être dérivées directement des équations sur $\widetilde{z}$ et $\widetilde{c}$. Celles-ci peuvent s'écrire [57] :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{z''^2}}{\partial t} + \nabla.\left[\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{z''^2} - \nabla.\left(\overline{\rho}D_z\nabla\widetilde{z''^2}\right)\right] = -\nabla.\boldsymbol{\tau}^t_{zv} - 2\boldsymbol{\tau}^t_z.\nabla\widetilde{z} - 2\overline{\rho}\widetilde{s_{\chi_z}}, \tag{3.96}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{c''^2}}{\partial t} + \nabla.\left[\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{c''^2} - \nabla.\left(\overline{\rho}D_c\nabla\widetilde{c''^2}\right)\right] = -\nabla.\boldsymbol{\tau}^t_{cv} - 2\boldsymbol{\tau}^t_c.\nabla\widetilde{c} - 2\overline{\rho}\widetilde{s_{\chi_c}} + 2\overline{\rho}\left(\widetilde{\dot{\omega}_c c} - \widetilde{\dot{\omega}_c}\widetilde{c}\right). \tag{3.97}$$

Dans ces équations, $\boldsymbol{\tau}^t_{zv}$ et $\boldsymbol{\tau}^t_{cv}$ sont les flux de diffusion de sous-maille relatifs à $\widetilde{z''^2}$ et $\widetilde{c''^2}$, alors que $\widetilde{s_{\chi_z}}$ et $\widetilde{s_{\chi_c}}$ représentent les parties sous-maille des taux de dissipation scalaires de z et c.

De la même manière que pour les moments du premier ordre, la dépendance de c en z en écoulement partiellement prémélangé entraîne l'apparition de termes supplémentaires dans l'équation de conservation de $\widetilde{c''^2}$. Ces termes, permettant de tenir compte de la diffusion croisée entre c et z, ont été négligés dans la relation (3.97) et dans la suite de ce travail.

Les flux turbulents des moments du second ordre de z et de c sont modélisés à l'aide d'une fermeture de type gradient :

$$\boldsymbol{\tau}^t_{zv} = \boldsymbol{\tau}^t_{z^2} - 2\widetilde{z}\boldsymbol{\tau}^t_z = -\overline{\rho}\frac{\nu_t}{Sc_t}\nabla\widetilde{z''^2}, \tag{3.98}$$

$$\boldsymbol{\tau}^t_{cv} = \boldsymbol{\tau}^t_{c^2} - 2\widetilde{c}\boldsymbol{\tau}^t_c = -\overline{\rho}\frac{\nu_t}{Sc_t}\nabla\widetilde{c''^2}. \tag{3.99}$$

Les taux de dissipation scalaires de sous-maille sont donnés par la décomposition des taux de dissipation totaux :

$$\widetilde{\chi_z} = \underbrace{D_z\widetilde{|\nabla\widetilde{z}|^2}}_{\widetilde{\chi_{z_m}}} + 2D_z\widetilde{|\nabla z''||\nabla\widetilde{z}|} + \underbrace{D_z\widetilde{|\nabla z''|^2}}_{\widetilde{s_{\chi_z}}}, \tag{3.100}$$

$$\widetilde{\chi_c} = \underbrace{D_c\widetilde{|\nabla\widetilde{c}|^2}}_{\widetilde{\chi_{c_m}}} + 2D_c\widetilde{|\nabla c''||\nabla\widetilde{c}|} + \underbrace{D_c\widetilde{|\nabla c''|^2}}_{\widetilde{s_{\chi_c}}}. \tag{3.101}$$

En général, la partie moyenne du taux de dissipation scalaire est négligeable devant la partie fluctuante (voir Poinsot et Veynante [174]). Le second terme du membre de droite peut également être négligé (ce terme est d'ailleurs nul au sens RANS). Il en résulte que le taux de dissipation scalaire de sous-maille $\widetilde{s_{\chi_z}}$ est assimilable au taux de dissipation scalaire total $\widetilde{\chi_z}$ (même chose pour le scalaire c). Cette hypothèse dépend en fait de la résolution du maillage LES utilisé et peut, dans certains cas, ne pas être vérifiée.

Pour finir, étant donné que c est un scalaire réactif, l'équation de conservation de $\widetilde{c''^2}$ fait intervenir un terme de correlation croisé entre c et $\dot{\omega}_c$:

$$\overline{\rho}\left(\widetilde{\dot{\omega}_c c} - \widetilde{\dot{\omega}_c}\widetilde{c}\right) = -\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}. \tag{3.102}$$

De la même manière que le taux de dissipation scalaire, ce terme doit également être fermé.

3.7.1 Fermeture des taux de dissipation scalaires

Il est possible d'établir une équation de transport pour les taux de dissipation scalaire (Mantel et Borghi [134] ou Swaminathan et Bray [207]), mais celle-ci reste encore difficile à résoudre car faisant intervenir de nombreux termes nécessitant l'introduction de nouvelles hypothèses. Ainsi, il est souvent plus pratique d'utiliser des relations algébriques simples pour l'évaluation de ces grandeurs.

Modèle de relaxation linéaire :

La formulation la plus courante consiste à relier la dissipation scalaire à la variance SGS de la grandeur considérée via un temps caractéristique de relaxation, pris égal au temps turbulent (modèle de relaxation linéaire [164]) :

$$\overline{\rho}\widetilde{\chi_z} = \overline{\rho}C\frac{\nu_t}{Sc_t}\frac{\widetilde{z''^2}}{\Delta^2}, \tag{3.103}$$

$$\overline{\rho}\widetilde{\chi_c} = \overline{\rho}C\frac{\nu_t}{Sc_t}\frac{\widetilde{c''^2}}{\Delta^2}, \tag{3.104}$$

où Δ représente la taille du filtre, et C est la constante de dissipation généralement prise de l'ordre de 1. Le rapport $\frac{Sc_t\Delta^2}{\nu_t}$ représente un temps caractéristique de la turbulence noté τ_t.

En fait, la constante C dépend directement des caractéristiques locales de l'écoulement et est donc une fonction du temps et de l'espace. Ainsi, pour améliorer la précision du modèle, des approches dynamiques ont été développées, par exemple par Pierce et Moin [167].

Ce modèle fournit en général une bonne approximation du taux de dissipation scalaire de z. Il sera donc utilisé par la suite dans ce contexte. Il se révèle en revanche moins précis pour modéliser la dissipation de c. La variable d'avancement est en effet un scalaire réactif et le modèle de relaxation linéaire néglige les temps caractéristiques de la chimie devant le temps de mélange turbulent (hypothèse de mélange infiniment rapide).

Les modèles présentés ci-après permettent de pallier à cette limitation en tenant compte d'une chimie finie.

Modèle ITNFS :

De manière à tenir compte des interactions entre la chimie et les petites échelles de la turbulence, Meneveau et Poinsot [140] ont construit le modèle ITNFS basé sur une description intermittante de la turbulence. Ils définissent ainsi une échelle de temps moyenne caractéristique des interactions entre la flamme et la turbulence en corrigeant le temps intégral de la turbulence par une fonction Γ faisant intervenir les échelles caractéristiques de la chimie. Cette fonction a été déterminée à partir de calculs

DNS d'interactions flammes/tourbillons. Elle s'exprime de la manière suivante (Poinsot et Veynante [174]) :

$$\log_{10}(\Gamma) = -\frac{1}{s+0.4}\exp\left[-(s+0.4)\right] + (\sigma s - 0.11)\left[1-\exp\left[-(s+0.4)\right]\right], \tag{3.105}$$

avec :

$$s = \log_{10}\left(\frac{l_t}{\delta_L^0}\right) \text{ et } \sigma = \frac{2}{3}\left\{1-\frac{1}{2}\exp\left[-\left(\frac{u'}{S_L^0}\right)^{1/3}\right]\right\}. \tag{3.106}$$

On reconnait ici la vitesse de flamme laminaire non étirée S_L^0 qui peut être tabulée, ainsi que l'épaisseur de flamme δ_L^0 correspondante, que l'on peut définir à partir du gradient de température maximal. l_t est une échelle caractéristique de la turbulence. En LES, on peut l'assimiler à la taille de coupure du filtre, Δ.

La fluctuation de vitesse u' est beaucoup plus délicate à évaluer. Des fonctions complexes existent pour la calculer de façon précise [49]. Cependant, celles-ci font intervenir des dérivées d'ordre élevé qui sont difficiles à évaluer de façon consistante avec les schémas numériques disponibles dans CEDRE appliqués à des maillages non structurés généraux. Nous allons donc utiliser ici la relation (3.19), basée sur le modèle de Smagorinsky.

En utilisant la fonction ITNFS, on peut définir un temps caractéristique d'interaction chimie/turbulence de la manière suivante [174] :

$$\tau_t = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{l_t}{\delta_L^0}, \frac{u'}{S_L^0}\right)}\frac{Sc_t\Delta^2}{\nu_t}. \tag{3.107}$$

Ce temps peut ensuite être introduit dans la relation (3.104) pour une modélisation plus précise du taux de dissipation scalaire de c. Cette méthode de correction du temps intégral de la turbulence a été utilisée avec succès, conjointement au modèle BML, par Bailly *et al.* [8].

Modèle basé sur une approche BML :

Vervisch *et al.* [216] puis Fiorina *et al.* [76] ont proposé une méthode alternative pour le calcul du taux de dissipation lié à la variable d'avancement. Dans ce modèle, $\widetilde{\chi_c}$ est exprimé en fonction des grandeurs caractéristiques de la flamme, en suivant l'hypothèse BML.

Sous l'hypothèse de front de flamme infiniment mince, on peut établir une relation liant le taux de réaction de la variable d'avancement à son taux de dissipation scalaire (Veynante et Vervisch [219]) :

$$\widetilde{\dot{\omega}_c} = \frac{2}{2c_m - 1}\widetilde{\chi_c}, \tag{3.108}$$

soit :

$$\widetilde{\chi_c} = \frac{1}{2}(2c_m - 1)\,\widetilde{\dot{\omega}_c}, \tag{3.109}$$

où la grandeur c_m est définie de la façon suivante :

$$c_m = \frac{\int_0^1 c^*\dot{\omega}_c\widetilde{P}(c^*)\,dc^*}{\int_0^1 \dot{\omega}_c\widetilde{P}(c^*)\,dc^*} = \frac{\widetilde{c\dot{\omega}_c}}{\widetilde{\dot{\omega}_c}}. \tag{3.110}$$

La figure 3.6 présente les variations de c_m en fonction de c pour différentes valeurs de la variance SGS réduite de c. On peut vérifier que lorsque la PDF de c se rapproche d'une forme bimodale, c_m tend vers une valeur constante de l'ordre de 0,8 ; proche de la valeur prédite dans le cadre de la théorie BML ($\approx 0{,}75$). On remarque par ailleurs que c_m a tendance à évoluer de manière linéaire en fonction de $\widetilde{c}$, quelle que soit la valeur de la variance. Par la suite, c_m sera maintenu constant et égal à sa valeur prise dans la limite d'une PDF bimodale.

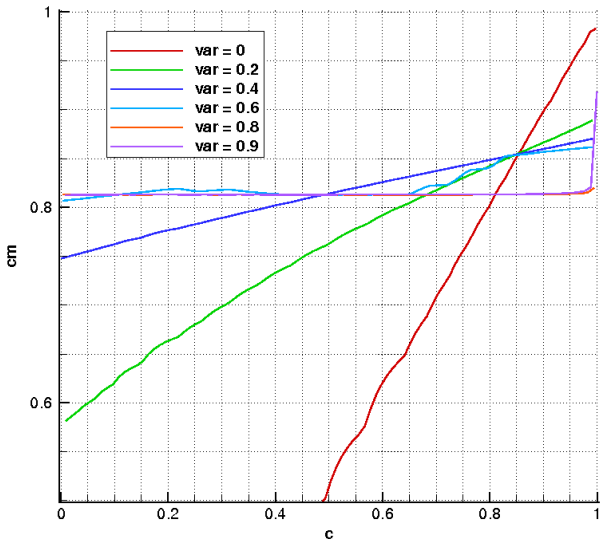

FIG. 3.6 – *Evolution de c_m en fonction de la variable d'avancement pour différentes valeurs de la variance réduite de c (flamme méthane/air atmosphériques à richesse 0,6).*

Vervisch *et al.* [216] proposent d'utiliser une relation très similaire à (3.109) pour modéliser le taux de dissipation de sous-maille de c :

$$\overline{\rho}\widetilde{\chi_c} = \frac{1}{2}\overline{\rho}\,(2c_m - 1)\,\widetilde{\dot{\omega}_c}\frac{\widetilde{c''^2}}{\widetilde{c}\,(1-\widetilde{c})}. \tag{3.111}$$

Le facteur $\sigma_c = \frac{\widetilde{c''^2}}{\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}$ a été introduit de manière à rester consistant avec l'équation d'évolution de $\widetilde{c''^2}$. Il permet de respecter les contraintes de réalisabilité suivantes :

$$\lim_{\sigma_c \to 1} \widetilde{\chi_c} = \widetilde{\chi_c}^{BML}, \tag{3.112}$$

$$\lim_{\sigma_c \to 0} \widetilde{\chi_c} = 0, \tag{3.113}$$

où $\widetilde{\chi_c}^{BML}$ est donné par l'expression (3.109). L'introduction du facteur σ_c permet d'étendre le domaine de validité de (3.115) au delà des limites fixées par l'hypothèse de chimie infiniment rapide. Le choix de σ_c comme facteur multiplicatif reste toutefois assez arbitraire.

Pour approcher la dissipation scalaire de manière à tenir compte des caractéristiques locales de l'écoulement, le taux de réaction $\widetilde{\dot{\omega}_c}$ dans (3.111) doit être modélisé. Une première possibilité consiste à utiliser la valeur de $\widetilde{\dot{\omega}_c}$ directement interpolée dans la table FPI. En procédant ainsi, on introduit une relation implicite entre la dissipation scalaire et le taux de réaction de c qui nécessiterait, pour sa résolution, l'utilisation d'une procédure numérique itérative. Pour contourner cette difficulté, une modélisation plus élaborée du taux de réaction filtré de c est nécessaire.

La méthode employée ici consiste à formuler $\widetilde{\dot{\omega}_c}$ suivant une approche à densité de suface de flamme, soit :

$$\overline{\rho}\widetilde{\dot{\omega}_c} \approx \overline{\rho S_L |\nabla c|} \approx \rho^0 S_L^0 \widetilde{|\nabla c|}, \tag{3.114}$$

avec $\widetilde{|\nabla c|} = \Sigma$. En combinant les relations (3.108) et (3.114), on obtient l'expression suivante :

$$\overline{\rho}\widetilde{\chi_c} = \frac{1}{2}\,(2c_m - 1)\,\rho^0 S_L^0 \Sigma \frac{\widetilde{c''^2}}{\widetilde{c}\,(1-\widetilde{c})}. \tag{3.115}$$

Une relation algébrique est ensuite choisie pour modéliser la densité de surface de flamme Σ. Deux méthodes peuvent être considérées :

- la première consiste à réécrire la densité de surface de flamme en fonction du facteur de plissement Ξ (Weller *et al.* [224]) :

$$\Sigma = \widetilde{|\nabla c|} = \Xi |\nabla \widetilde{c}|. \tag{3.116}$$

Le facteur Ξ peut ensuite être maintenu constant (généralement $\Xi \approx 5$), ou reévalué au cours du calcul à partir d'une loi algébrique comme par exemple celles de Zimont [235] ou de Peters [163] :

$$\Xi^{Zim} = 1 + C_1 \left(\frac{u'}{S_L^0}\right)^{3/4} \left(\frac{\Delta}{\delta_L^0}\right)^{1/4}, \tag{3.117}$$

$$\Xi^{Pet} = 1 - C_2 \left(\frac{\Delta}{\delta_L^0}\right) + \sqrt{\left(\frac{C_2 \Delta}{\delta_L^0}\right)^2 + C_3 \left(\frac{u' \Delta}{S_L^0 \delta_L^0}\right)}. \tag{3.118}$$

où les coefficients C_1, C_2 et C_3 sont des constantes égales à 0,52, 0,195 et 0,78. La formulation de Peters a été développée de manière à rester valide à la fois dans le régime de combustion des flammelettes et dans le régime des flammes épaissies. De plus, elle est fondée sur un raisonnement mathématique plus rigoureux que la formulation de Zimont.
Bien que ces lois aient été obtenues dans un cadre RANS, Pitsch [168] a montré qu'une relation très similaire à celle de Peters [163] pouvait être établie pour la LES : en développant la relation donnée par Pitsch, on obtient exactement l'expression de Ξ^{Pet} avec des constantes légèrement différentes : $C_2 = 0{,}25$ et $C_3 = 1$. Dans ce contexte, c'est la formulation donnée par Peters qui sera retenue dans la suite de ces travaux.
Une représentation de l'évolution de Ξ calculé en fonction des rapports $\frac{\Delta}{\delta_L^0}$ et $\frac{u'}{S_L^0}$ à l'aide de la formule de Peters est proposée figure 3.7 ;

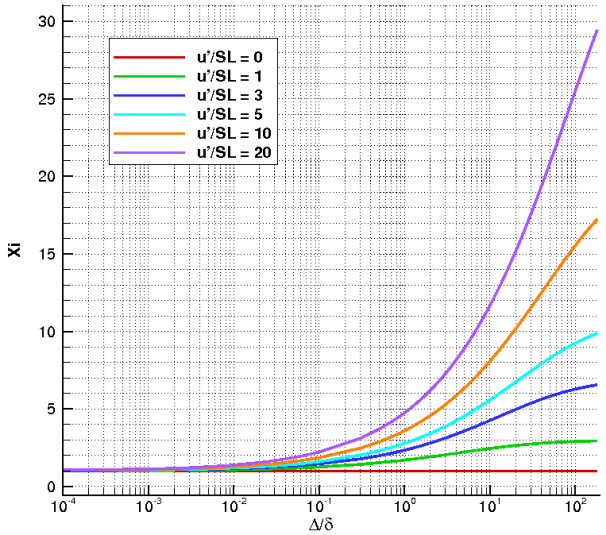

FIG. 3.7 – *Représentation de l'évolution de Ξ calculé à l'aide de la relation de Peters pour différentes valeurs des rapports $\frac{\Delta}{\delta_L^0}$ et $\frac{u'}{S_L^0}$.*

- la seconde méthode pour évaluer Σ repose sur la relation proposée par Boger *et al.* [17] :

$$\Sigma = K \frac{\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}{\Delta}, \tag{3.119}$$

où K est une constante que Boger *et al.* [17] estiment de l'ordre de $C\Xi$, avec $C \approx 5{,}527$ lorsque la taille du filtre est grande devant l'épaisseur de flamme.

Ces deux modèles conduisent à des résultats équivalents. Ainsi, par la suite, nous ne retiendront que le premier modèle faisant intervenir le facteur de plissement Ξ. Si on replace la relation (3.116) dans (3.115), on obtient le modèle de dissipation de c utilisé au cours de ce travail (Fiorina *et al.* [76]) :

$$\overline{\rho}\widetilde{\chi_c} = \frac{1}{2}\left(2c_m - 1\right)\rho_0 S_L^0 \Xi |\nabla \widetilde{c}| \frac{\widetilde{c''^2}}{\widetilde{c}\left(1-\widetilde{c}\right)}. \tag{3.120}$$

Notons que dans le cadre d'une combustion partiellement prémélangée, les grandeurs c_m et S_L^0 doivent être moyennées suivant z. Ces grandeurs sont en effet caractéristiques de chaque flamme élémentaire tabulée et dépendent directement de la richesse locale du mélange. Dans ce travail, $\widetilde{S_L^0}$ et $\widetilde{c_m}$ ont été évalués à l'aide de simples interpolations linéaires au sein des tables en fonction de z, soit :

$$\widetilde{S_L^0} = S_L^0\left(\widetilde{z}\right) \quad \text{et} \quad \widetilde{c_m} = c_m\left(\widetilde{z}\right). \tag{3.121}$$

Modèle dérivé de l'équation de transport de $\widetilde{\chi_c}$:

Un troisième modèle de type algébrique, proposé par Swaminathan et Bray [207], peut également être utilisé. Pour obtenir cette relation, les auteurs établissent préalablement l'équation exacte de conservation du taux de dissipation scalaire. En se basant ensuite sur une étude asymptotique de cette équation dans la limite des nombres de Damkhöler élevés, il est possible d'établir la relation suivante :

$$\widetilde{\chi_c} = \left(1 + \frac{2}{3}C_1\frac{S_L^0}{u'}\right)\left(C_2\frac{S_L^0}{\delta_L^0} + \frac{C_3}{\tau_t}\right)\widetilde{c''^2}, \tag{3.122}$$

où τ_t est le temps caractéristique de la turbulence défini précédemment. La constante C_1 est égale à 0,1. C_3 représente la constante du modèle de relaxation linéaire et doit être ajustée en fonction du cas de calcul. C_2 dépend de la chimie via le paramètre c_m mais également via la courbure de la flamme. Son expression exacte est :

$$C_2 = \frac{\beta\left(2c_m - 1\right)}{4K_c}, \tag{3.123}$$

avec $\beta = 4{,}2$ et :

$$K_c = \frac{\delta_L^0}{S_L^0}\frac{\int \rho D_c |\nabla c|^2 \nabla u \widetilde{P}\left(c\right) dc}{\int \dot{\omega}_c \widetilde{P}\left(c\right) dc}. \tag{3.124}$$

Les auteurs évaluent K_c de l'ordre de 0,1 dans le cas d'une chimie à une seule étape. Il est toutefois clair que sa valeur sera dépendante du mécanisme réactionnel considéré, même si elle reste certainement toujours proche de 0,1.

L'expression (3.122) permet de retrouver le modèle de relaxation linéaire initial si on suppose que le scalaire est non réactif (soit $S_L^0 = 0$).

3.7.2 Modélisation de la corrélation $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$

Les problèmes posés par la modélisation du taux de dissipation scalaire de c se retrouvent lorsque l'on considère la corrélation $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$. Dans les travaux précédent (Domingo *et al.* [57]), ce terme était directement évalué à partir des données interpolées dans la table. La grandeur $\widetilde{c\dot{\omega}_c}$ doit dans ce cas être calculée préalablement et tabulée :

$$\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c} = \overline{\rho}\left(\widetilde{c\dot{\omega}_c}^{tab} - \widetilde{\dot{\omega}_c}^{tab}\widetilde{c}\right). \tag{3.125}$$

En procédant ainsi, on introduit une relation implicite entre $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$ et la variance de c.

Il apparaît en fait plus approprié de proposer une modélisation alternative pour le terme $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$ (Domingo *et al.* [56]) en tenant compte à la fois de la turbulence de sous-maille et de la sous résolution

de la flamme. Dans le cadre de ce travail, une approche basée sur des hypothèses similaires au taux de dissipation de c est proposée.

On peut dans un premier temps écrire :

$$\widetilde{\dot{\omega}_c c} - \widetilde{\dot{\omega}_c}\widetilde{c} = \widetilde{\dot{\omega}_c}\left(c_m - \widetilde{c}\right). \tag{3.126}$$

Cette relation demeure exacte tant que c_m est déterminé de façon précise. Cependant, de même que pour $\widetilde{\chi}_c$, il est plus pratique de fixer c_m constant et égal à sa valeur prise sous l'hypothèse BML.

Par analogie avec le modèle de fermeture de $\widetilde{\chi}_c$, l'expression doit être multipliée par σ_c afin de s'assurer que $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$ tend vers sa limite BML lorsque σ_c tend vers 1 d'une part, et que $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$ tend vers 0 lorsque σ_c tend vers 0 d'autre part, soit :

$$\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c} = C_\omega \overline{\rho}\left(c_m^{BML} - \widetilde{c}\right)\widetilde{\dot{\omega}_c}\left(\frac{\widetilde{c''^2}}{\widetilde{c}\left(1-\widetilde{c}\right)}\right), \tag{3.127}$$

où C_ω est une constante.

La figure 3.8 compare deux représentations 2D des valeurs prises par $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$ en fonction de $\widetilde{c}$ et $\widetilde{c''^2}$ dans le cas d'une flamme méthane/air stœchiométrique. Dans le premier cas, la corrélation est évaluée directement à partir des données tabulées filtrées alors que dans le second cas, on utilise la relation (3.127) avec $C_\omega = 1$, et $\widetilde{\dot{\omega}_c} = \widetilde{\dot{\omega}_c}^{tab}$.

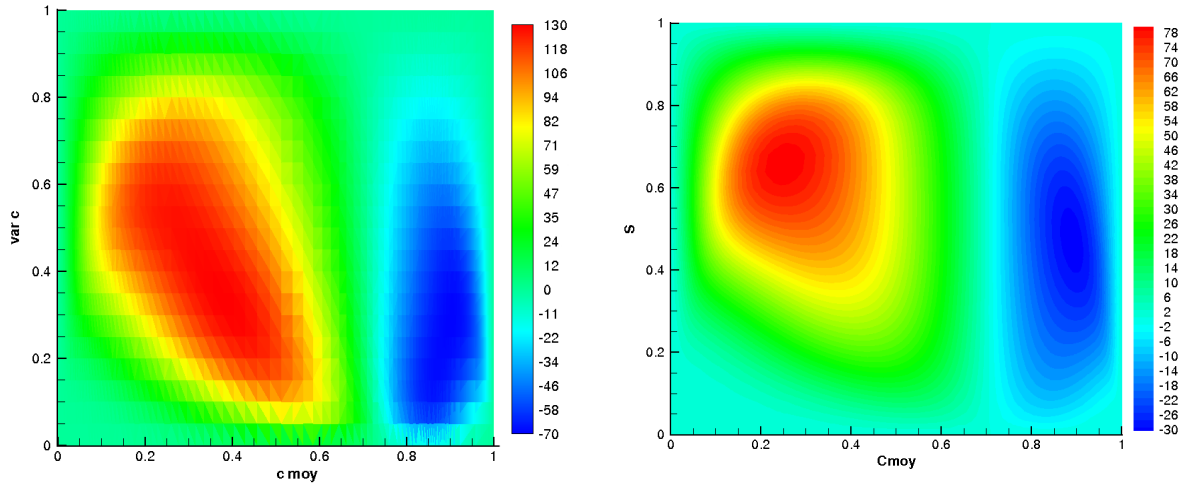

FIG. 3.8 – *Valeurs prises par $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$ en fonction de $\widetilde{c}$ et $\widetilde{c''^2}$ dans le cas d'une flamme méthane/air stoechiométrique. A gauche, valeurs obtenues à l'aide des PDF présumées et des données laminaires tabulées, à gauche, modèle donné par la relation (3.127).*

La relation (3.127) sous estime largement les niveaux de référence que l'on devrait obtenir. Pour corriger cette tendance, la formulation suivante est proposée :

$$\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c} = C_\omega \overline{\rho}\left(c_m^{BML} - \widetilde{c}\right)\widetilde{\dot{\omega}_c}\left(\frac{\widetilde{c''^2}}{\widetilde{c}\left(1-\widetilde{c}\right)}\right)^n, \tag{3.128}$$

où n est pris égal à 0,25. Le facteur de ségrégation est élevé à la puissance 0,25 de manière à tenir compte de la décroissance progressive de $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$ lorsque σ_c décroît, tout en conservant ses proprietés en $\sigma_c = 0$ et $\sigma_c = 1$.

Les valeurs prises par $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$ en utilisant cette relation sont présentées sur le graphique 3.9. En utilisant ce modèle, l'allure générale de la distribution de $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$ en fonction de $\widetilde{c}$ et $\widetilde{c''^2}$ est parfaitement

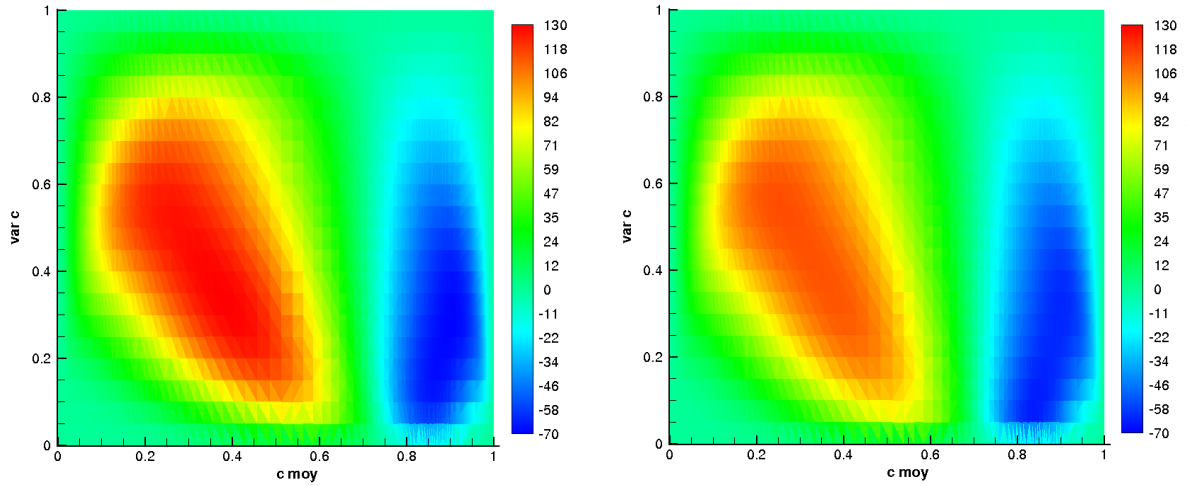

FIG. 3.9 – *Valeurs prises par* $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$ *en fonction de* $\widetilde{c}$ *et* $\widetilde{c''^2}$ *dans le cas d'une flamme méthane/air stoechiométrique. A gauche, valeurs obtenues à l'aide des PDF présumées et des données laminaires tabulées, à gauche, modèle donné par la relation (3.128).*

retrouvée. D'un point de vue quantitatif, le modèle (3.128) permet également de reproduire les niveaux corrects de $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$, à un facteur multiplicatif de l'ordre de 1,15 près.

Pour finir, en modélisant le taux de réaction $\overline{\rho}\widetilde{\dot{\omega}_c}$ par le concept de densité de surface de flamme, on trouve :

$$\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c} = C'_\omega \left(c_m - \widetilde{c}\right) \rho_0 S_L^0 \Xi |\nabla \widetilde{c}| \sigma_c^n, \tag{3.129}$$

avec C'_ω de l'ordre de 0,3 et $n = 0{,}25$.

En combustion partiellement prémélangée, c_m et S_L^0 doivent être moyennés suivant z. Ces grandeurs sont évaluées très simplement dans la table par interpolations linéaires suivant z.

3.7.3 Equations de transport fermées

Pour écrire les équations de transport fermées des moments d'ordre 2 de z et de c, on a choisi de modéliser le taux de dissipation scalaire de z via le modèle de relaxation linéaire (3.104), le taux de dissipation scalaire de c par le modèle fondé sur l'approche BML (3.120), et la corrélation $\overline{\rho}\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$ à partir des données issues de la table (3.125) :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{z''^2}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{z''^2}\right) - \nabla.\left[\overline{\rho}\left(D_{zv} + D_t\right)\nabla\widetilde{z''^2}\right] - 2\overline{\rho}D_t\left|\nabla\widetilde{z}\right|^2 + 2\overline{\rho}C\frac{\widetilde{z''^2}}{\tau_t} = 0, \tag{3.130}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{c''^2}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{c''^2}\right) - \nabla.\left[\overline{\rho}\left(D_{cv} + D_t\right)\nabla\widetilde{c''^2}\right] - 2\overline{\rho}D_t\left|\nabla\widetilde{c}\right|^2 + \left(2c_m - 1\right)\rho_0 S_L^0 \Xi |\nabla\widetilde{c}| \frac{\widetilde{c''^2}}{\widetilde{c}\left(1-\widetilde{c}\right)} + 2\overline{\rho}\left(\widetilde{\dot{\omega}_c c} - \widetilde{\dot{\omega}_c}\widetilde{c}\right)^{tab} = 0. \tag{3.131}$$

3.7.4 Relations algébriques pour l'évaluation des moments d'ordre 2

Le transport des variances de z et de c constitue toujours la solution la plus précise pour modéliser ces grandeurs. Cependant, cette méthode impose la résolution de deux équations de conservation supplémentaires par le code de CFD, ce qui peut se révéler pénalisant en terme de coût de calcul.

Des relations algébriques peuvent notamment être obtenues sous l'hypothèse d'équilibre local (Pierce et Moin [167], Peters [164]). En se basant sur les équations de transport des moments d'ordre

2, il est possible d'égaliser les termes de production (le tenseur des contraintes de sous-maille ainsi que le terme de production chimique pour c) et de dissipation (terme de dissipation scalaire). Quelques développements analytiques mènent alors à des relations algébriques simples pour les moments du second ordre de z et c.

En appliquant l'hypothèse d'équilibre aux équations (3.130) et (3.131), on obtient directement deux relations simples respectivement pour $\widetilde{z''^2}$ et $\widetilde{c''^2}$:

$$\widetilde{z''^2} = C\Delta^2 |\nabla \widetilde{z}|^2, \tag{3.132}$$

$$\widetilde{c''^2} = \frac{2C'}{2c_m - 1} \frac{\widetilde{c}\,(1-\widetilde{c})}{\rho_0 S_L^0 \Xi |\nabla \widetilde{c}|} \left[\frac{\mu_t}{Sc_t} |\nabla \widetilde{c}|^2 + \overline{\rho} \left(\widetilde{\dot{\omega}_c c} - \widetilde{\dot{\omega}_c} \widetilde{c} \right) \right]. \tag{3.133}$$

Cette dernière expression peut également être réécrite de la façon suivante :

$$\widetilde{c''^2} = \frac{2C''}{2c_m - 1} \frac{\Delta}{\rho_0 S_L^0 \Xi} \left[\frac{\mu_t}{Sc_t} |\nabla \widetilde{c}|^2 + \overline{\rho} \left(\widetilde{\dot{\omega}_c c} - \widetilde{\dot{\omega}_c} \widetilde{c} \right) \right], \tag{3.134}$$

où C, C' et C'' sont des constantes de l'ordre de 1 en LES.

La corrélation $\overline{\rho c'' \dot{\omega}_c}$ peut être modélisée par la relation (3.128) proposée dans ce mémoire, ou directement interpolée dans la table.

L'hypothèse d'équilibre peut en fait être remise en cause du fait des phénomènes induits par la chimie (production de turbulence par la flamme, expansion thermique des gaz, etc...). De plus, il faut noter que l'équilibre production/dissipation n'est plus vérifié lorsque l'écoulement est piloté par les grosses structures turbulentes anisotropes. Néanmoins, le gain en temps de calcul engendré par l'utilisation d'une relation algébrique reste appréciable.

3.8 Correction des termes sources interpolés par CEDRE

De la même manière que dans le cas laminaire, les termes sources filtrés extraits de la table FPI doivent être corrigés. Pour simplifier le problème, on se place ici dans le cadre de flammes prémélangées.

L'application du modèle de relaxation (validé dans le cadre laminaire) conduit à une relation du type :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_i (x,t) = \widetilde{\dot{\omega}}_i^{\,tab} (c) + \frac{\widetilde{Y}_i^{\,tab} (c) - \widetilde{Y}_i (x,t)}{\widetilde{\tau_{c,i}}}. \tag{3.135}$$

Le temps $\widetilde{\tau_{c,i}}$ est assimilable à un temps chimique filtré, correspondant théoriquement à l'inverse des termes diagonaux de la matrice jacobienne :

$$\widetilde{J_{ij}} = \left(\partial \widetilde{\dot{\omega}}_i / \partial \widetilde{Y}_i \right)^{tab}. \tag{3.136}$$

Différents niveaux de simplification peuvent être appliqués à l'évaluation de $\widetilde{\tau_{c,i}}$:

- à l'ordre 0, on peut attribuer au temps chimique de relaxation filtré sa valeur non filtrée obtenue à partir du minimum atteint à travers la flamme par $\max (J_{ii})^{-1}$. On pose donc en première approximation :

$$\widetilde{\tau_{c,i}} \approx \tau_{c,i}. \tag{3.137}$$

  C'est cette méthode qui a été retenue au cours des calculs présentés dans ce mémoire ;
- un modèle de relaxation tenant compte de la turbulence est proposé ici. Ce modèle se base directement sur les données disponibles dans les tables. Les temps chimiques turbulents sont

ainsi définis pour chaque espèce comme le minimum atteint à travers la flamme par l'inverse des termes diagonaux de la jacobienne des grandeurs filtrées, soit :

$$\widetilde{\tau_{c,i}}\left(\widetilde{c''^2}\right) = \frac{1}{\min\left(|\widetilde{J_{ii}}\left(\widetilde{c},\widetilde{c''^2}\right)|\right)}. \tag{3.138}$$

Cette matrice peut être évaluée par différences finies centrées en chaque point de la table :

$$\widetilde{J_{ii}}\left(\widetilde{c},\widetilde{c''^2}\right) = \frac{\widetilde{\dot{\omega}_i}\left(\widetilde{c}+\delta\widetilde{c},\widetilde{c''^2}\right) - \widetilde{\dot{\omega}_i}\left(\widetilde{c}-\delta\widetilde{c},\widetilde{c''^2}\right)}{\widetilde{Y_i}\left(\widetilde{c}+\delta\widetilde{c},\widetilde{c''^2}\right) - \widetilde{Y_i}\left(\widetilde{c}-\delta\widetilde{c},\widetilde{c''^2}\right)}. \tag{3.139}$$

Ces temps chimiques peuvent être calculés préalablement et regroupés dans les tables FPI turbulentes. La méthode reste cependant assez lourde et délicate à mettre en œuvre ;

- une solution différente a été proposée par Teraji *et al.* [210], conjointement à leur modèle de reconstruction des termes sources chimiques. Les auteurs proposent en fait de recalculer un temps de relaxation à partir d'une relation non linéaire simple faisant intervenir à la fois un temps chimique et le temps intégral de la turbulence. L'utilisation d'une telle relation pour $\widetilde{\tau_{c,i}}$ constitue également une voie à explorer, même si le choix de la relation liant les temps chimique et turbulent peut paraître arbitraire.

3.9 Construction et utilisation de tables turbulentes

3.9.1 Couplage de tables turbulentes avec le code CEDRE

En pratique, le calcul des termes sources et des fractions massiques filtrés peut être réalisé indépendamment du calcul de CFD. En effet, l'existence des tables chimiques permet de construire *a priori* de nouvelles tables dites "turbulentes", dans lesquelles sont présentes uniquement les données filtrées, calculées à partir de l'intégration des données de la table de référence.

Le nombre de degrés de liberté des tables "turbulentes" passe de 2 (z et c) à 4 dans le cas le plus général (les deux premiers moments statistiques de z et de c). Ces grandeurs sont évaluées par le code de CFD pour permettre l'interpolation des grandeurs thermochimiques dans la table. En combustion parfaitement prémélangée, où la table n'est indexée que par la seule variable d'avancement, le nombre de degrés de liberté passe de 1 à 2 (les deux premiers moments statistiques de c). L'augmentation de taille de la table dans un cadre turbulent est donc conséquente.

Le couplage entre les tables FPI turbulentes et le code CEDRE est réalisé de manière identique au cas laminaire. Ainsi, par analogie à la figure 2.38 schématisant le couplage entre les tables laminaires et le code de CFD, la figure 3.10 présente le même type de couplage réalisé dans un cadre turbulent. Le schéma correspond au cas de la simulation d'une flamme parfaitement prémélangée.

3.9.2 Exemple de construction d'une table FPI turbulente

Les éléments présentés précédemment sont ici appliqués à la construction d'une table "turbulente". Dans un premier temps, on ne présente que des tables correspondant à un prémélange pur, indexées uniquement par la variable d'avancement ($\widetilde{c}$ et $\widetilde{c''^2}$).

Les schémas 3.11, 3.12 et 3.13 présentent respectivement les valeurs filtrées du taux de réaction de CO, de la fraction massique de CO et de la fraction massique de OH. Les graphiques sont représentés dans un repère $(\widetilde{c},\sigma_c)$. On observe que les grandeurs laminaires en $\sigma_c = 0$ sont dégradées par la PDF jusqu'au cas extrême $\sigma_c = 1$. Dans ce cas, la PDF prend une forme bimodale (limite BML) et les évolutions des grandeurs filtrées en fonction de $\widetilde{c}$ deviennent linéaires.

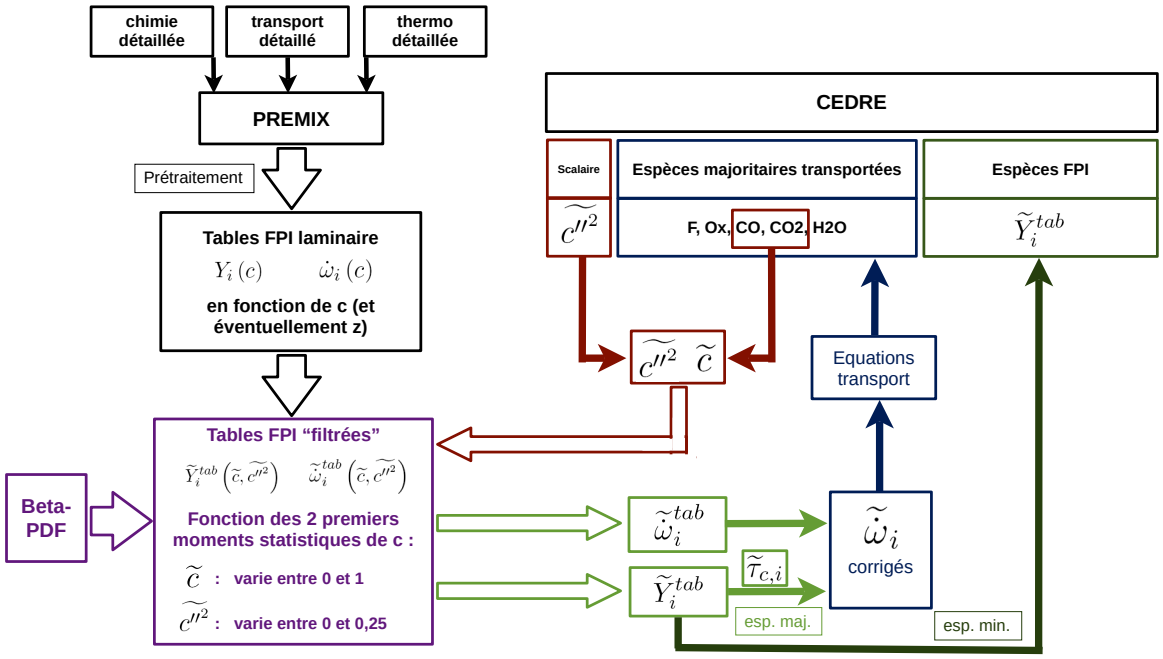

FIG. 3.10 – *Schématisation de la procédure de couplage réalisée entre les tables FPI turbulentes et le code CEDRE.*

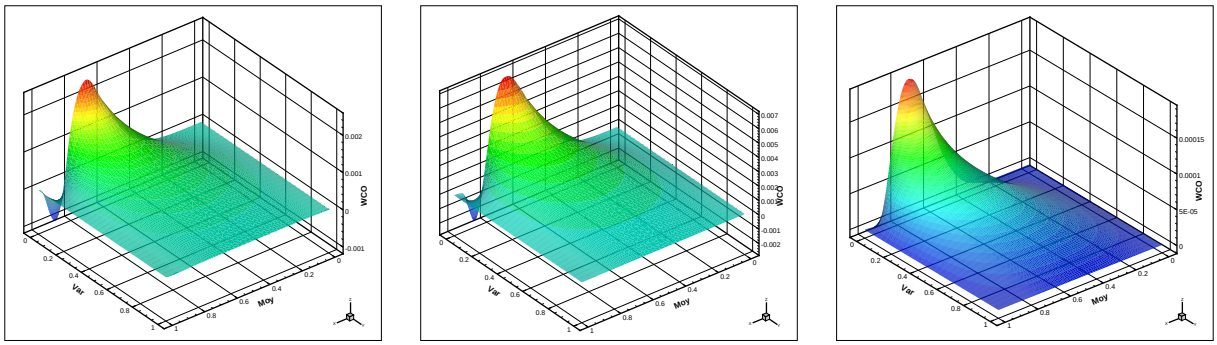

FIG. 3.11 – *Représentation du taux de réaction filtré de CO intégré à l'aide d'une β-PDF pour trois richesses différentes : 0,65, 1, 1,8. Le taux de réaction est représenté en fonction des deux premiers moments statistiques de c.*

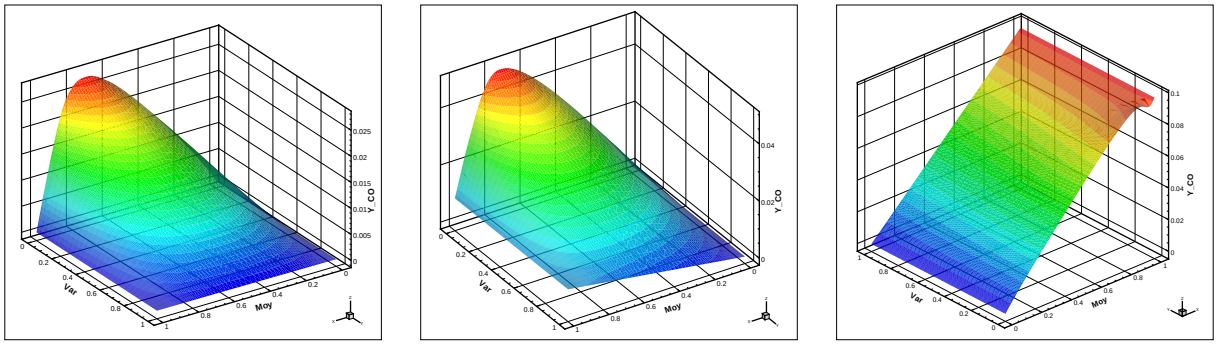

FIG. 3.12 – *Représentation de la fraction massique de CO filtrée intégrée à l'aide d'une β-PDF pour trois richesses différentes : 0,65, 1, 1,8. Le taux de réaction est représenté en fonction des deux premiers moments statistiques de c.*

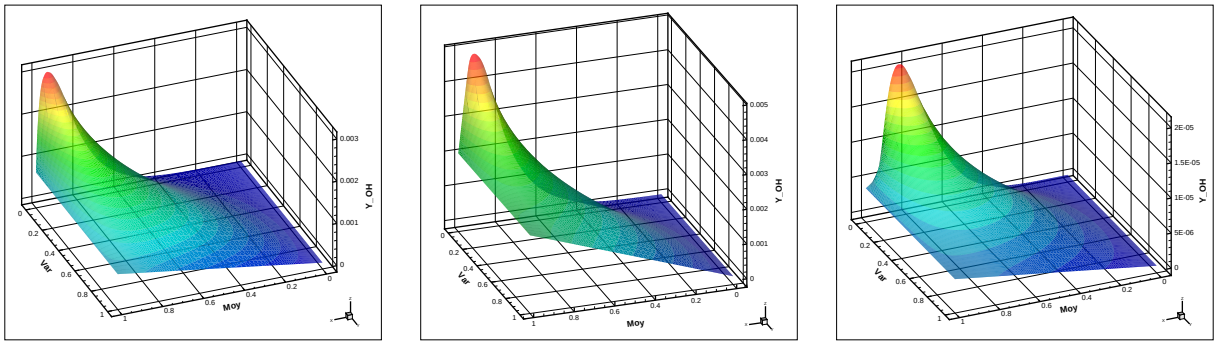

FIG. 3.13 – *Représentation de la fraction massique de OH filtrée intégrée à l'aide d'une β-PDF pour trois richesses différentes : 0,65, 1, 1,8. Le taux de réaction est représenté en fonction des deux premiers moments statistiques de c.*

En prémélange partiel, la variable z intervient. On sait par définition que z est une grandeur normalisée, donc variant entre 0 dans l'oxydant pur et 1 dans le carburant pur. Dans les flammes partiellement prémélangées, il est possible que z soit bornée par des valeurs supérieures à 0 et inférieures à 1 : z doit, dans ce cas, être renormalisée. On définit ainsi une nouvelle fraction de mélange suivant :

$$\widetilde{\mathcal{Z}} = \frac{\widetilde{z} - z_{min}}{z_{max} - z_{min}}. \tag{3.140}$$

Les figures 3.14 et 3.15 présentent les représentations 3D de tables "turbulentes" pour le prémélange partiel. Dans chaque cas, trois grandeurs chimiques ($\widetilde{\dot{\omega}_{CO}}$, $\widetilde{Y_{CO}}$ et $\widetilde{Y_{OH}}$) sont tracées en fonction de $\widetilde{\mathcal{Z}}$ et du facteur de ségrégation σ_z. Les tables ont été calculées pour z variant de 0,0284 ($\varphi \approx 0,4$) à 0,0742 ($\varphi \approx 2,5$).

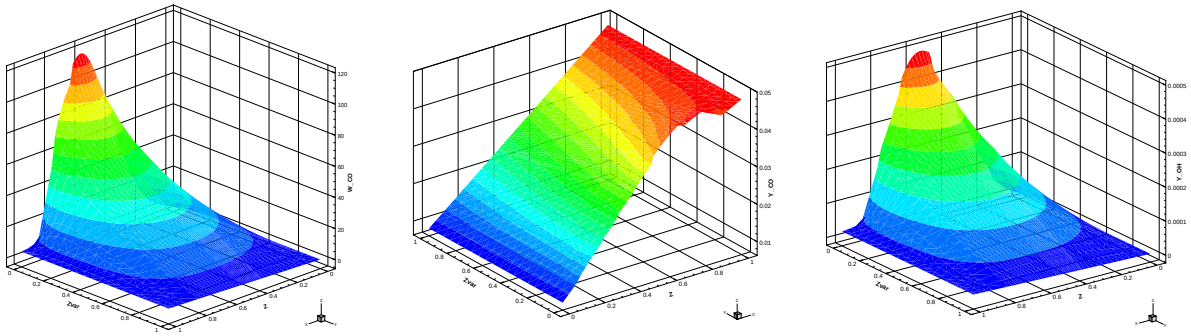

FIG. 3.14 – *Taux de production de CO (à gauche) et fractions massiques de CO et OH (au centre et à droite) issus d'une table filtrée pour le prémélange partiel, en fonction de $\widetilde{\mathcal{Z}}$ et s_z. Les données tracées correspondent à des valeurs constantes c = 0,52 et $\sigma_c = 0$.*

En $\sigma_z = 0$, on retrouve l'évolution des grandeurs tracées en fonction de la richesse, à une position $c = c^*$ donnée. A l'opposé, en $\sigma_z = 1$, on retrouve des courbes quasiment linéaires correspondant au cas où la PDF en z est représentée par deux pics de Dirac centrés sur les valeurs extrêmes de $\widetilde{z}$ (limite BML).

3.10 Conclusions et limitations du modèle

Le modèle de combustion turbulente utilisé au cours de ce travail est basé sur l'évaluation de PDF présumées pour fermer les taux de réaction chimiques filtrés des espèces transportées. Les fonctions β retenues pour approcher les PDF de z et de c permettent de modéliser correctement les distributions

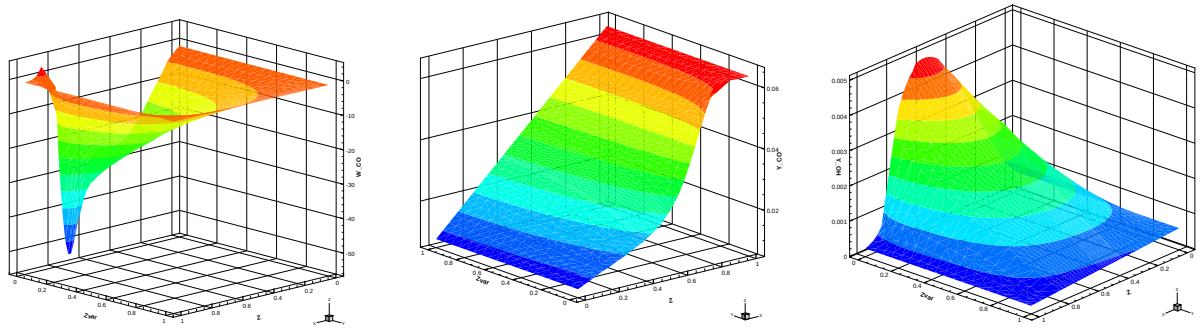

FIG. 3.15 – *Taux de production de CO (à gauche) et fractions massiques de CO et OH (au centre et à droite) issus d'une table filtrée pour le prémélange partiel, en fonction de* $\widetilde{\mathcal{Z}}$ *et* s_z*. Les données tracées correspondent à des valeurs constantes* $c = 0{,}9$ *et* $\sigma_c = 0$*.*

de ces deux scalaires en écoulement turbulent, mais restent réservées à une utilisation dans le régime des flammelettes. Cette approche permet de plus la construction préalable de tables FPI "turbulentes", qui facilitent la mise en oeuvre des calculs d'un point de vue numérique.

Ce modèle présente certaines limitations qu'il est important d'identifier :

- la modélisation du second moment statistique de c, et en particulier la modélisation du taux de dissipation scalaire de c, reste délicate. Certaines hypothèses introduites s'avèrent en effet très limitantes et parfois même en contradiction avec l'approche à PDF présumées. Ainsi, dans la fermeture du taux de dissipation de c retenue, l'hypothèse de front de flamme infiniment mince est posée, alors que le modèle à β-PDF est construit pour s'affranchir par ailleurs de cette contrainte ;
- en outre, l'utilisation d'une β-PDF pour c ne permet pas de modéliser correctement la vitesse turbulente de propagation du front de flamme. En particulier, lorsque le plissement de la flamme est entièrement résolu (notamment dans le cas 1D), la vitesse de flamme modélisée ne tend pas vers la vitesse attendue (Fiorina *et al.* [77]). Ceci est également le cas en régime laminaire puisque le modèle à β-PDF ne permet pas de retrouver une vitesse de propagation correcte lorsque la flamme est sous-résolue.

Ce dernier point peut s'avérer assez limitant puisqu'une mauvaise modélisation de la vitesse de propagation du front de flamme peut perturber fortement sa dynamique instationnaire. Pour surmonter cette difficulté, Fiorina *et al.* [77] ont très récemment développé une approche basée sur un filtrage explicite des tables FPI. De cette manière, on s'assure que lorsque la flamme est sous-résolue, sa vitesse turbulente de propagation tend bien vers sa valeur attendue (ceci est également le cas en régime laminaire où le modèle permet de retrouver la vitesse correcte de la flamme même lorsque celle-ci est sous-résolue). Pour tenir compte des effets de plissement du front de flamme, les termes sources chimiques filtrés explicitement sont corrigés en introduisant le facteur Ξ. Ce modèle semble très prometteur et a été validé avec succès par les auteurs sur la configuration PRECCINSTA.

Le modèle à PDF présumées détaillé ici est validé dans les chapitres 5 et 6 sur deux flammes turbulentes prémélangées pauvres.

Chapitre 4

Modélisation de la formation de NO dans le cadre du modèle FPI

Sommaire

4.1 Introduction : difficultés liées à la modélisation de la formation de NO en écoulements complexes . . . 108
4.2 Mécanismes de formation de NO . . . 110
4.2.1 Le "prompt-NO" . . . 110
4.2.2 Le "fuel-NO" . . . 110
4.2.3 Le "NO-reburning" . . . 111
4.2.4 Le "NO-thermique" . . . 111
4.2.5 Voies de formation de NO alternatives . . . 112
4.2.6 Mécanismes réactionnels détaillés et réduits . . . 113
4.3 Modèles de combustion turbulente pour la prise en compte du NO . . . 113
4.3.1 Utilisation de mécanismes réactionnels réduits . . . 113
4.3.2 Approches à flammelettes laminaires . . . 114
4.3.3 Modèles de post-traitement stationnaires . . . 114
4.3.4 Modèles basés sur une chimie tabulée . . . 115
4.4 Modélisation de la production de NO via l'utilisation de tables FPI étendues 116
4.4.1 Définition d'une nouvelle variable d'avancement . . . 116
4.4.2 Construction d'une table pour NO . . . 119
4.4.3 Validation des tables FPI-NOx sur une flamme laminaire de prémélange . . . 121
4.5 Couplage avec la turbulence . . . 124
4.5.1 Difficultés . . . 124
4.5.2 Définition de la PDF de η . . . 126
4.5.3 Détermination de $\widetilde{\eta}$ et $\widetilde{Y}_{NO}$ . . . 127
4.5.4 Détermination de $\widetilde{\eta''^2}$ . . . 128
4.5.5 Exemple de tables FPI-NOx filtrées . . . 130
4.6 Modèle cinétique de formation de NO . . . 130
4.6.1 Principe de la méthode . . . 130
4.6.2 Avantages et inconvénients . . . 132
4.6.3 Influence de la turbulence . . . 133
4.6.4 Un exemple : le mécanisme de Zel'dovich à trois équations . . . 133
4.7 Conclusion : avantages et limitations des modèles proposés . . . 134

4.1 Introduction : difficultés liées à la modélisation de la formation de NO en écoulements complexes

La prédiction de la formation du monoxyde d'azote est devenue un enjeu majeur dans le domaine de la modélisation de la combution turbulente. Outre ses effets directs sur la santé, NO joue également un rôle primordial dans la formation de polluants beaucoup plus nocifs tels que NO_2 et N_2O. Son émission par les systèmes énergétiques usuels (chambres de combustion aéronautiques, moteurs automobiles, turbines à gaz...) est, par conséquent, particulièrement réglementée et doit donc être réduite.

Les modèles de combustion actuels ne permettent pas de prédire avec précision la formation de NO au sein d'écoulements complexes, représentatif des problématiques industrielles. En effet, si la connaissance des différents facteurs capables d'influencer la formation de NO est aujourd'hui acquise, tous ne peuvent pas être modélisés facilement (voir par exemple Driscoll *et al.* [62] et les références associées). Parmi ces phénomènes, on distingue en particulier l'effet des pertes thermiques [221], de l'étirement (contraintes aérodynamiques) [60], [38], des niveaux d'oxygène atomique hors équilibre [61], [151], et l'importance de la voie du prompt-NO (influence de la richesse locale). Ces phénomènes sont résumés sur le schéma 4.1.

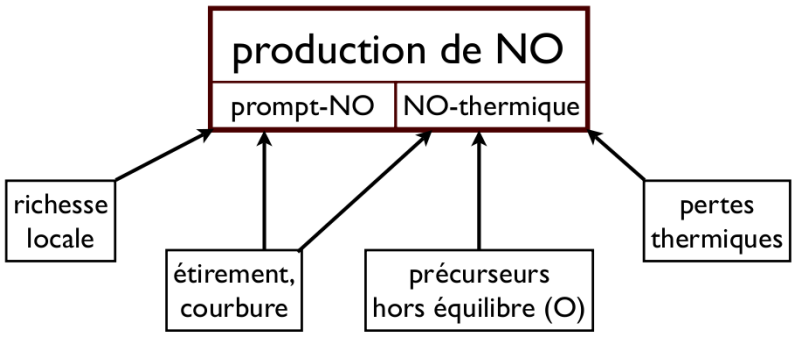

FIG. 4.1 – *Mécanismes physiques élémentaires agissant sur la production de NO.*

Les différents phénomènes influençant la production de NO en écoulement turbulent identifiés sur ce schéma sont décrits ci-dessous :

- La formation de NO est fortement dépendante de la température au travers de la loi non-linéaire d'Arrhenius. En particulier, à haute température (typiquement > 1900 K), une faible variation de T peut être responsable d'une variation importante de Y_{NO}. Ainsi, les pertes thermiques radiatives et les pertes par conduction aux parois, en diminuant la température des gaz, influencent sensiblement la production de NO au sein des flammes.
- L'étirement de la flamme, notamment en régime turbulent, peut être à l'origine d'une élévation locale de température ou d'une accumulation de produits de combustion (DNS de Bédat *et al.* [38]) pouvant conduire à l'apparition de pics de formation de NO.
- La production de NO est également fortement dépendante de ses précurseurs. Dans le front de flamme, des radicaux tels que CH, CH_2 ou NH jouent un rôle prépondérant. Derrière la flamme, les précurseurs intervenant sont principalement N, OH et O. Ainsi, des variations locales de concentration de ces espèces peuvent entraîner des variations importantes de production de NO. Ceci est notamment le cas avec le radical O qui peut être formé en quantités importantes hors équilibre dans les gaz brûlés et qui joue un rôle primordial dans le mécanisme de Zel'dovitch. De la même manière, des variations locales de richesse, peuvent conduire à l'apparition de pics de formation de NO (notamment via le mécanisme du "prompt-NO", très sensible à la richesse).
- Pour finir, d'un point de vue de la modélisation, la formation de NO ainsi que de ses précurseurs est directement conditionnée par le mécanisme réactionnel utilisé. Ainsi, certaines voies de

production et espèces précurseurs, ne sont pas encore parfaitement connues. Dans ce contexte, il est clair que les mécanismes réactionnels utilisés jusqu'à présent ne permettent pas de prédire avec précision la formation de NO dans de nombreuses situations.

La turbulence, en créant des fluctuations plus ou moins importantes de température et de composition dans l'écoulement, influencent largement la production de NO via certains mécanismes cités ci-dessus. Par exemple, en créant localement des maxima de température ou de richesse, les fluctuations turbulentes peuvent être à l'origine de la formation de pics de NO (via respectivement les mécanismes du "NO-thermique" et du "prompt-NO"), comme ceci est illustré sur la figure 4.2. Ces pics interviennent très souvent à l'échelle sous-maille, ce qui rend leur modélisation particulièrement délicate.

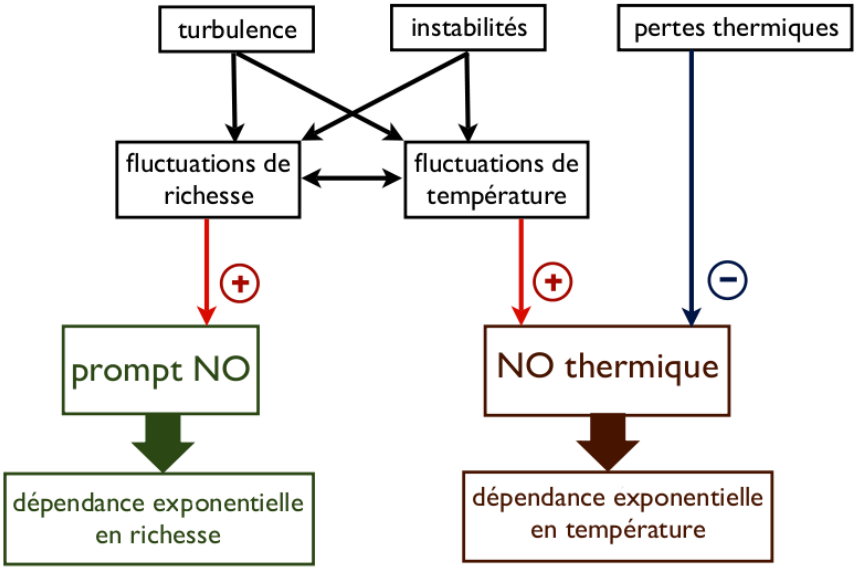

FIG. 4.2 – *Influence de phénomènes physiques sur la formation de NO dans le cas d'un écoulement de type industriel.*

En raison des difficultés évoquées précédemment, la prédiction de la formation de NO au sein de configurations réalistes est actuellement réalisée à l'aide de modèles très simplifiés, généralement adaptés à des conditions de fonctionnement bien particulières. On pourra citer dans ce domaine les travaux très récents de Schmitt *et al.* [195], Ihme et Pitsch [113] ou Biagioli et Güthe [13]. Ces travaux montrent que de gros efforts de modélisation sont encore nécessaires pour pouvoir prédire efficacement, sur une large plage de fonctionnement, la formation des NOx sur des cas industriels.

Le travail présenté ci-après propose d'appréhender ces problématiques en se basant sur les principes du modèle FPI introduits dans les chapitres précédents. Deux modèles sont ainsi proposés, devant permettre de faciliter la prédiction de la formation de NO au sein de configurations réalistes en combustion prémélangée :

- la première approche est fondée sur la construction de tables spécifiques pour l'espèce NO, indexées par une nouvelle variable d'avancement,
- la seconde est basée sur le couplage entre un mécanisme réactionnel détaillé dédié à la formation de NO avec les données chimiques interpolées dans la table (pour les précurseurs).

En raison des difficultés de modélisation évoquées, les simulations numériques permettant de tenir compte des nombreux phénomènes physiques influençant la formation de NO sont encore lourdes et difficiles à mettre en œuvre. Pour cette raison, nous focalisons notre travail uniquement sur la modélisation des interactions entre la turbulence et la chimie de NO, en négligeant par exemple l'effet des pertes thermiques. En outre, pour des raisons pratiques, les modèles proposés dans ce chapitre

n'ont été développés que dans le cadre de flammes parfaitement prémélangées. Les expressions qui y sont détaillées ne concernent donc que ce régime particulier de combustion (la fraction de mélange n'intervient pas).

Pour débuter ce chapitre, les principales sources de NO au sein d'un écoulement réactif sont identifiées. Un rapide état de l'art des modèles de combustion turbulente actuels permettant de tenir compte de la production de NO, est ensuite présenté. Le premier modèle proposé dans ce mémoire, basé sur l'utilisation de tables FPI spécifiques, est introduit dans la section suivante. Le modèle d'interaction entre la production chimique de NO et la turbulence, dans le cadre de l'utilisation des tables FPI spécifiques, est également présenté. Dans la section qui suit, nous introduisons le second modèle proposé. Celui-ci exploite la possibilité de déterminer, via le modèle FPI, la concentration des précurseurs de NO tabulés. En conclusion de ce chapitre, nous discutons des avantages et des limitations de ces deux approches.

4.2 Mécanismes de formation de NO

Nous allons nous intéresser ici aux quatre mécanismes de production du monoxyde d'azote les mieux connus actuellement. Une revue plus détaillée de ces mécanismes est donnée par Miller et Bowman [141] ou Hill et Smoot [110].

4.2.1 Le "prompt-NO"

Le "prompt-NO", ou NO rapide, est formé par la réaction de l'azote atmosphérique avec les radicaux issus de la décomposition du carburant. Ce mécanisme intervient particulièrement au sein du front de flamme, là où les radicaux sont les plus nombreux et dans le cadre de flammes riches. Il est cependant rarement utilisé en raison de sa complexité, ce qui ne porte pas à conséquences dans la plupart des cas étudiés.

Suivant Fenimore [73], la formation de prompt-NO est directement reliée à la production du radical HCN au sein de la flamme. Les principales réactions mises en jeu sont les suivantes [110] :

$$N_2 + CH_x \longleftrightarrow N + HCN + ... \tag{4.1}$$

$$HCN + R \longleftrightarrow NO + ... \tag{4.2}$$

Le produit majoritaire de la première de ces réactions est HCN. Par la suite, HCN est oxydé par les principaux radicaux (notés R) présents dans le front de flamme (O, OH en particulier), ce qui conduit directement à la formation de NO.

La validité de l'hypothèse suivant laquelle NO est formé via HCN est discutée en annexe H. Il a en effet été montré (Moskaleva et Lin [144] et Sutton *et al.* [206]) que le produit majoritaire issu de $N_2 + CH_x$ n'est pas HCN mais plutôt NCN.

4.2.2 Le "fuel-NO"

Comme son nom l'indique, le "fuel-NO" [141] est directement issu de l'azote contenu dans le carburant. On retrouve principalement ces espèces azotées en additifs (en général des amines, dont la formulation générale est RNH_2). La combustion du charbon peut également faire intervenir ce type de mécanisme.

Les deux espèces principales impliquées sont HCN et NH_3. Suivant les conditions de la flamme, la transformation de ces deux espèces conduit à la formation soit de NO (en régime pauvre), soit de N_2 (en régime riche). Ces deux processus peuvent être écrits de la façon suivante [141] :

$$HCN/NH_3 + NO \longleftrightarrow N_2 + ... \tag{4.3}$$

$$HCN/NH_3 + O_2 \longleftrightarrow NO + ... \tag{4.4}$$

Ce mécanisme est responsable de la formation de 80% du NO dans les flammes issues de carburants contenant de l'azote. Dans le cas de la combustion des hydrocarbures usuels (principalement des alcanes), ce mécanisme n'entre pas en compte.

4.2.3 Le "NO-reburning"

Le mécanisme dit du "NO-reburning" [141] n'est pas responsable de la formation d'oxydes d'azote mais de leur disparition. En effet, à haute température, le NO présent peut réagir avec le carburant, ou les radicaux hydrocarbonés issus de la décomposition de celui-ci, pour former différents produits :

$$CH_x + NO \quad \longleftrightarrow \quad HCN + ... \tag{4.5}$$

Ce mécanisme intervient en général à haute température, dans les gaz brûlés, et donc en présence d'hydrocarbures imbrûlés. Cette voie de disparition de NO n'intervient donc qu'en régime riche.

4.2.4 Le "NO-thermique"

Le mécanisme du "NO-thermique" (Zel'dovich [234]) est le principal responsable de la formation de NO lors de la combustion des hydrocarbures usuels. Il se déroule principalement au voisinage de la stœchiométrie, à haute température (typiquement $> 1900K$). La formation de NO thermique est d'ailleurs extrêmement sensible aux variations de température : il est ainsi admis généralement que le taux de production de NO double tout les $90K$, à partir de $2000K$. Il est important également de noter que la formation du NO thermique est indépendante du carburant considéré.

Contrairement au prompt-NO, qui est produit rapidement dans le front de flamme, le NO thermique est issu de réactions lentes favorisées par les hautes températures. Pour cette raison, le NO thermique continue à être produit derrière la flamme, dans les gaz brûlés, tant que la température reste suffisamment élevée. La figure 4.3, tirée de Gicquel *et al.* [91], permet de visualiser ce phénomène sur un cas simple. On remarque ainsi que la fraction massique de NO continue d'augmenter en aval de l'injection, sur l'axe de la flamme, alors que la température y diminue légèrement. Cette dynamique très lente rend sa modélisation délicate en écoulements turbulents.

La production de NO thermique est généralement modélisée par le mécanisme bien connu de Zel'dovich étendu (Bowman [22]) :

$$O + N_2 \quad \longleftrightarrow \quad NO + N, \tag{4.6}$$

$$N + O_2 \quad \longleftrightarrow \quad NO + O, \tag{4.7}$$

$$N + OH \quad \longleftrightarrow \quad NO + H. \tag{4.8}$$

Les paramètres relatifs à ces équations sont regroupés dans le tableau 4.1 et sont issus de [141]. Par la suite, le mécanisme de Zeld'ovich a été amélioré par différents auteurs pour tenir compte d'autres espèces azotées susceptibles de jouer un rôle dans la production de NO.

Le mécanisme de Zel'dovich étant relativement simple, on peut établir directement l'expression du taux de variation de la concentration de NO qu'il engendre. Ainsi, en posant l'hypothèse que l'atome N est à l'équilibre, il est possible d'établir la relation algébrique suivante (Bowman [22]) :

$$\frac{d\left[NO\right]}{dt} = 2k_{f1}\left[O\right]\left[N_2\right]\frac{1 - \frac{k_{b1}k_{b2}\left[NO\right]^2}{k_{f1}\left[N_2\right]k_{f2}\left[O_2\right]}}{1 + \frac{k_{b1}\left[NO\right]}{k_{f2}\left[O_2\right]+k_{f3}\left[OH\right]}}, \tag{4.9}$$

où k_{fj} et k_{bj} sont les vitesses de réaction directe et inverse liées à l'équation j.

En supposant que OH et NO ne sont présents qu'en faibles quantités dans le mélange au moment de la réaction, soit $[NO] \approx [OH] \approx 0$, la formulation du taux de production global se réduit à :

$$\frac{d\left[NO\right]}{dt} = 2k_{f1}\left[N_2\right]\left[O\right]. \tag{4.10}$$

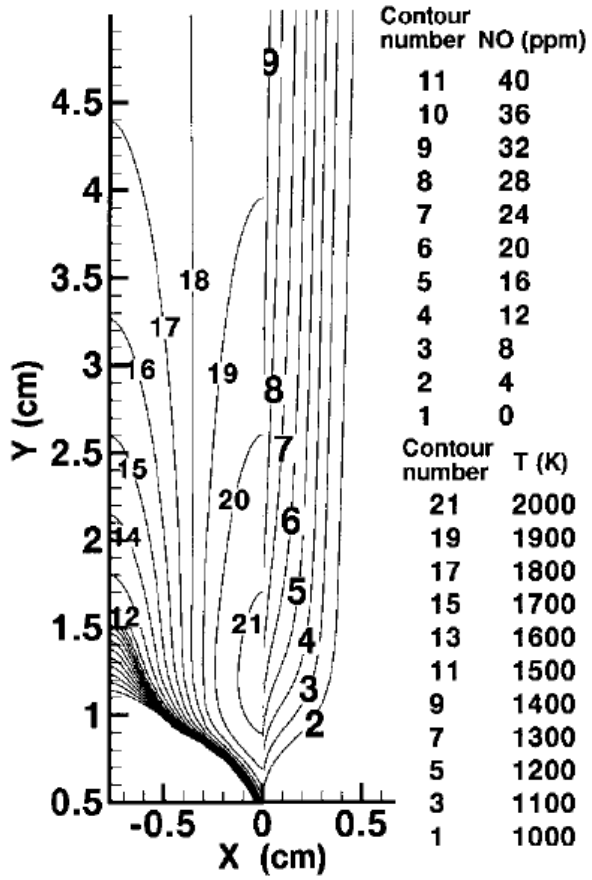

FIG. 4.3 – *Simulation d'une flamme laminaire stabilisée par un brûleur (Gicquel et al. [91]). A gauche, iso-surfaces de température, à droite, iso-surface de* Y_{NO}.

Il ressort que la concentration de l'atome O joue un rôle prépondérant dans la formation du NO thermique. Pour une modélisation correcte de ce sous-mécanisme il faut donc utiliser un schéma réactionnel suffisamment détaillé pour accéder à la concentration de O. C'est en raison de cette sensibilité à la présence de O que le NO thermique est également produit au sein de flammes pauvres.

numéro de réaction	A	b	Ea
1	1.8E+8	0	319000
2	6.4E+3	1	26300
3	3.8E+7	0	0

TAB. 4.1 – *Paramètres des lois d'Arrhenius pour le mécanisme de Zel'dovitch représenté par les équations (4.6) à (4.8) (unités SI :* $kg - mol - m - s - J - K$*).*

4.2.5 Voies de formation de NO alternatives

D'autres voies de production de NO peuvent être distinguées, faisant intervenir des précurseurs différents de ceux introduits ici (NNH, NO_2, NH_2...). Ces mécanismes, bien que parfois considérés comme marginaux, peuvent, sous certaines conditions, contribuer significativement à la formation de NO.

Dans les schémas cinétiques détaillés utilisés généralement (GRI-Mech 3.0 [202] par exemple), ces voies ne sont pas correctement modélisées. Pour cette raison, on propose, en annexe H, une discussion à

propos de ces sous-mécanismes secondaires (essentiellement en régime pauvre). Ce travail est fondé sur une étude bibliographique approfondie et il conduit à la construction d'un schéma réactionnel détaillé tenant compte, avec la meilleure précision possible, de tous les mécanismes introduits. Ce travail est particulièrement important en vue d'une meilleure compréhension et modélisation des mécanismes chimiques liés à la production de NO.

4.2.6 Mécanismes réactionnels détaillés et réduits

Plusieurs mécanismes réactionnels détaillés regroupant les différents sous-mécanismes présentés ici, et incluant également d'autres sources secondaires de formation de NO, ont été proposés. Ces schémas permettent, en outre l'évaluation d'autres oxydes d'azote tels que NO_2 ou N_2O. On peut retrouver de tels mécanismes complets dans Hewson et Williams [108] ou Glarborg *et al.* [97]. Cependant, du fait de leur complexité, ceux-ci ne peuvent pas être utilisés directement lors de simulations numériques de configurations réalistes.

Pour contourner cette difficulté, différents auteurs ont proposé des schémas réactionnels réduits permettant de modéliser la formation de NO.

Ces mécanismes réduits peuvent être obtenus de deux manières distinctes. La première consiste à ajouter directement le mécanisme de Zel'dovich étendu, ou d'autres mécanismes connus, à des schémas réactionnels simplifiés existants (Sung *et al.* [204] ou Ishii et al [115]). La seconde, beaucoup mieux adaptée à la simulation d'écoulements complexes, consiste à créer un schéma réactionnel semi-global via une approche systématique de réduction. Dans ce cas, la production de NO est généralement modélisée via une réaction unique (voir Sanchez *et al.* [191] ou Mallampalli *et al.* [133]). L'exemple présenté ci-dessous est tiré de Schmitt *et al.* [195] :

$$C_xH_y + \left(\frac{x}{2} + \frac{y}{4}\right) \longrightarrow xCO + \frac{y}{2}H_2O \tag{4.11}$$

$$CO + \frac{1}{2}O_2 \longrightarrow CO_2 \tag{4.12}$$

$$N_2 + O_2 \longrightarrow NO. \tag{4.13}$$

Le taux de réaction de la dernière étape peut être déduit du mécanisme de Zel'dovich ou calibré à partir d'un schéma plus détaillé.

Ce type de mécanisme est assez limité dans la mesure où il ne permet pas de prédire correctement la formation des précurseurs de NO. De plus, la prise en compte d'un nombre réduit d'espèces a tendance à largement surestimer la température de fin de combustion. En conséquence, les concentrations de NO que l'on retrouve par ce type d'approche sont, elles aussi, largement surestimées.

4.3 Modèles de combustion turbulente pour la prise en compte du NO

4.3.1 Utilisation de mécanismes réactionnels réduits

La modélisation de la formation de NO à l'aide d'approches algébriques est possible, notamment via une méthode pseudo laminaire ou grâce au modèle TFLES [195]. Toutefois, l'utilisation de tels modèles avec une chimie détaillée[1] sur des configurations complexes, n'est aujourd'hui pas accessible pour des raisons évidentes de coût de calcul. Ainsi, ce type de modèle est très souvent utilisé conjointement à des mécanismes réactionnels réduits tel que celui présenté ci-dessus.

[1] ce qui est nécessaire pour modéliser la formation des précurseurs de NO.

4.3.2 Approches à flammelettes laminaires

Les modèles basés sur l'hypothèse de flammelettes laminaires sont actuellement bien connus et très utilisés. Pouvoir prédire la formation de NO à l'aide de ces modèles constituerait donc un avantage conséquent. Cependant, la principale difficulté réside ici dans le fait que ces modèles sont généralement développés dans un cadre stationnaire, alors que la formation de NO est un phénomène très lent et donc instationnaire. Ainsi, les modèles à flammelettes instationnaires semblent mieux adaptés à la prédiction de la formation de NO (Pitsch [169]), mais restent encore aujourd'hui trop lourds pour pouvoir être utilisés sur des configurations complexes.

On pourra noter toutefois les travaux de Chou *et al.* [43], Sanders *et al.* [192] ou plus récemment ceux de Ihme et Pitsch [113] (dans un cadre LES) qui ont appliqué avec plus ou moins de succès l'approche à flammelettes stationnaires pour les flammes de diffusion, à la prédiction de la formation de NO au sein de flammes jets. Dans ces modèles, le taux de réaction de NO, ou la fraction massique de NO, sont reliés directement aux variables de l'espace des phases du problème (généralement la fraction de mélange z et la dissipation scalaire χ_z).

Les grandeurs chimiques filtrées sont ensuite obtenues à l'aide d'une approche à PDF présumées. Les taux de production de NO sont par exemple évalués suivant :

$$\widetilde{\dot{\omega}_{NO}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_{NO}\left(z^*, \chi_z^*\right) \widetilde{P}\left(z^*, \chi_z^*\right) dz^* d\chi_z^*. \tag{4.14}$$

Dans tous les cas, il apparait nécessaire de transporter l'espèce NO en plus des variables du problème. L'équation à résoudre prend la forme :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{Y}_{NO}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{\mathbf{u}}\widetilde{Y}_{NO} + \overline{\rho} D_{NO} \nabla \widetilde{Y}_{NO}\right) = -\nabla.\boldsymbol{\tau}_{NO}^t + \overline{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{NO}, \tag{4.15}$$

où le taux de production chimique de NO est évalué suivant la relation (4.14). Notons que les travaux de Chou *et al.* et de Ihme et Pitsch tiennent compte des pertes thermiques, ce qui peut apparaitre nécessaire dans le cadre de la modélisation de la production de NO.

4.3.3 Modèles de post-traitement stationnaires

Sachant que les réactions chimiques impliquant NO ont une évolution très lente comparées aux autres réactions, une approche possible consiste à découpler ces équations élémentaires du reste de la cinétique. Du fait des temps caractéristiques très longs, la rétroaction de ces réactions sur le reste de l'écoulement peut également être négligée. Suivant ces hypothèses, des méthodes de post-traitement pour la prédiction de NO peuvent être envisagées (Glarborg *et al.* [99], Eggels et De Goey [68] ou Gicquel *et al.* [91]).

Les modèles de post-traitement sont utilisés généralement à partir de champs moyens convergés issus de calculs réalisés avec une chimie simplifiée (ou avec une méthode de type FPI, comme c'est le cas pour Gicquel *et al.* [91]). Ensuite, partant de ces champs figés, il est possible de modéliser la formation de NO en résolvant dans chaque cellule les équations de transport stationnaires pour les espèces azotées intervenant dans la production de NO. Les taux de production de ces espèces peuvent alors être évalués suivant un mécanisme relativement détaillé. La figure 4.4 présente le mode de fonctionnement d'une méthode de post-traitement classique.

Ces méthodes ont prouvé leur efficacité pour prédire la formation de NO. Toutefois, il existe de nombreuses difficultés qui limitent leur utilisation. En particulier, le champ initial à partir duquel le modèle de post-traitement est appliqué doit être suffisamment détaillé. Il est notamment nécessaire que la température soit prédite de manière précise.

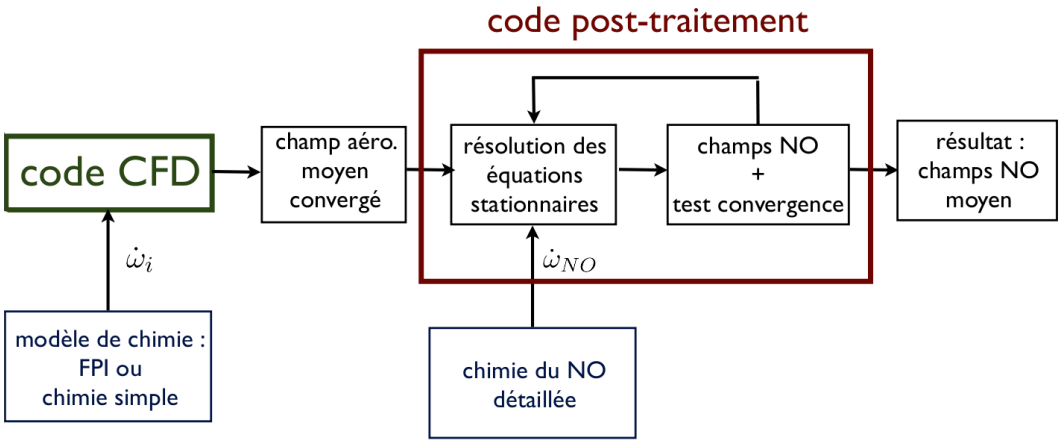

FIG. 4.4 – *Schema de fonctionnement d'un logiciel de post-traitement pour le calcul de la production de NO.*

4.3.4 Modèles basés sur une chimie tabulée

Récemment, différents travaux ont visé à appliquer des modèles basés sur une chimie tabulée à la prédiction de la formation de NO au sein d'écoulements réactifs turbulents. On citera en particulier les travaux de Godel *et al.* [100] qui se basent sur une approche FPI avec PDF présumées et les travaux de Wang *et al.* [222] où les taux de production chimiques interpolés dans une table sont fermés par le modèle CMC. Ces deux méthodes ont été développées dans le cadre de flammes de diffusion.

Pour la combustion prémélangée, Bradley *et al.* [26] ont utilisé un modèle très similaire à FPI, basé sur la construction de tables à partir de calculs de flammes de prémélange laminaires et une approche à PDF présumées. Plus récemment, Van Oijen et De Goey [159] ont étendu l'approche FGM à la prédiction de la formation de NO au sein de flammes de prémélange laminaires.

Dans tous ces modèles, il est nécessaire de définir une variable d'avancement capable de tenir compte de l'évolution de la concentration de NO dans les gaz brûlés. Dans les exemples proposés par Godel *et al.* ou Van Oijen et De Goey, une seule variable d'avancement est utilisée, incluant Y_{NO} dans sa définition. De cette manière, la variable d'avancement continue à évoluer dans les gaz brulés lorsque NO est formé. Des tables chimiques sont ensuite créées, indexées par cette nouvelle variable d'avancement. Dans ces approches, les interactions chimie turbulence sont traitées à l'aide d'un modèle à PDF présumées, par exemple le modèle PCM de Vervisch *et al.* [220]. Les PDF de ces nouvelles variables d'avancement sont toujours approchées par des β-PDF.

Ces approches comportent de nombreuses limitations :

- une première difficulté concerne la définition de la variable d'avancement. Différents cas de figures peuvent être envisagés (Bradley *et al.* [26]), avec par exemple une variable d'avancement unique, ou plusieurs variables d'avancement représentant respectivement l'évolution des grandeurs majoritaires et des espèces lentes comme NO ;
- ensuite, l'application de la β-PDF ne peut se faire que sous l'hypothèse de flammelettes, lorsque la zone des gaz frais et la zone des gaz brulés peuvent être clairement identifiées. NO étant une espèce hors équilibre ne suivant pas parfaitement l'évolution des espèces majoritaires, les β-PDF ne peuvent pas être appliquées.

4.4 Modélisation de la production de NO via l'utilisation de tables FPI étendues

Le monoxyde d'azote nécessite un traitement particulier car cette espèce continue à être formée là où les espèces majoritaires peuvent être considérées à l'équilibre. Ainsi, les tables FPI initiales, dont la construction a été décrite dans le chapitre 2, ne sont pas adaptées à la modélisation de la formation de NO :

- en premier lieu, la variable d'avancement c, telle qu'elle a été définie précédemment, n'évolue plus et reste égale à 1 dans les gaz brûlés. De ce fait, l'évolution de NO derrière la flamme ne peut pas être représentée par la seule variable c. Dans l'espace des phases, la trajectoire $Y_{NO}(c)$ possède une pente infinie, soit :
$$\left.\frac{\partial Y_{NO}}{\partial c}\right|_{c=1} = +\infty; \tag{4.16}$$
- en second lieu, les tables FPI construites initialement couvrent un domaine de l'espace des phases ne correspondant qu'à la zone de flamme, entre $c = 0$ et $c = 1$. Ainsi, l'évolution de NO plus en aval de la flamme n'est pas prise en compte et doit donc être *a priori* extrapolée.

Par la suite, une nouvelle variable d'avancement permettant de suivre l'évolution lente de NO est introduite, puis une méthode permettant d'extrapoler les données FPI dans leses gaz brûlés est proposée.

4.4.1 Définition d'une nouvelle variable d'avancement

Choix de la nouvelle variable d'avancement :

Différentes possibilités existent pour définir une variable d'avancement capable de suivre l'évolution lente de NO. Le tableau 4.2 résume quelques unes des définitions possibles :

- la première possibilité consiste à définir deux zones distinctes : la zone de flamme, qui peut être caractérisée par la variable c classique, et une zone derrière la flamme pour tenir compte de l'évolution de la concentration de NO. Dans cette seconde zone, une variable d'avancement supplémentaire, indépendante de c, est définie à partir de Y_{NO}. Ce type de découpage a été utilisé par Nafe et Maas [148] avec ILDM ;
- la seconde consiste à définir une variable d'avancement indépendante de c et ne servant qu'à l'interpolation des données concernant NO [26]. Cette nouvelle variable d'avancement est alors directement proportionnelle à Y_{NO} et est définie sur l'ensemble du domaine comprenant le front de flamme et la zone post-flamme. Les données concernant les espèces majoritaires sont évaluées en fonction de c alors que les données concernant NO sont évaluées en fonction de la nouvelle variable ;
- finalement, on peut construire une variable d'avancement unique à travers la flamme pour toutes les espèces. Dans ce cas, la nouvelle variable peut être définie comme une combinaison linéaire ou non-linéaire de c et de Y_{NO}.

Lorsque la première méthode est utilisée, des problèmes de raccordement entre les deux zones peuvent apparaître. Il est en effet nécessaire que la séparation entre celles-ci soit parfaitement identifiée et assez progressive pour limiter les difficultés d'interpolations.

Bradley *et al.* [26] montrent par ailleurs que la seconde méthode peut conduire à une inconsistance entre les champrs de Y_{NO} et de température. Etant donné que la formation de NO au sein du front de flamme dépend fortement de T, cette séparation conduit à des profils de NO erronés.

Pour ces raisons, les travaux les plus récents de Godel *et al.* [100] ou Van Oijen et De Goey [159] ne tiennent compte que d'une variable d'avancement unique définie à partir de c et Y_{NO} (troisième méthode).

référence	définition	principaux inconvénients
Nafe et Maas [148]	$c_1 = Y_{CO_2}$ dans la flamme puis $c_2 = Y_{NO}$ pour $c_1 = c_1^{eq}$	difficultés d'interpolations au raccordement entre les deux variables
Bradley *et al.* [26]	$c_1 = Y_{CO_2}$ et $c_2 = Y_{NO}$, variable indépendente pour NO	séparation des iso-surfaces de Y_{NO} et de tempérautre
Godel *et al.* [100]	$c = Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O} + Y_{NOx}$ unique sur tout le domaine	la pente de $Y_{NO}\,(c)$ peut être encore importante
Van Oijen et De Goey [159]	$c = Y_{CO_2} + Y_{CO} + \kappa Y_{NO}$, unique, $\kappa =$ cte sur tout le domaine	*a priori* pas de désavantage majeur

TAB. 4.2 – *Tableau récapitulatif des différentes variables d'avancement précédemment définies dans la littérature pour suivre l'évolution de NO (les définitions données ici sont volontairement simplifiées).*

Définitions :

Suivant une première définition donnée par Bradley et al. [26], on peut définir η, la nouvelle variable d'avancement, de la façon suivante :

$$\eta = Y_{NO}. \tag{4.17}$$

Pour les raisons évoquées précédemment, cette définition ne conduit pas à des résultats satisfaisants, ce que confirment les résultats obtenus dans la section 1.4.3.

Godel *et al.* [100] définissent la nouvelle variable d'avancement, en sommant simplement Y_{NO}, Y_{NO_2} et Y_{N_2O} aux fractions massiques de CO et de CO_2 (définissant la variable d'avancement c). De manière à diminuer encore la pente de Y_{NO} dans l'espace des phases, Van Oijen et De Goey [159] additionnent à la variable d'avancement de référence la fraction massique de Y_{NO} multipliée par un facteur κ. En suivant cette approche, on peut écrire :

$$\eta = c + \kappa Y_{NO}, \tag{4.18}$$

où la constante multiplicative κ doit être fixée. Ici, c est la variable d'avancement classique définie au chapitre 2 et variant entre 0 et 1.

En suivant cette définition, dans les gaz brûlés, la pente dans l'espace des phases de Y_{NO} est donnée par :

$$\left.\frac{\partial Y_{NO}}{\partial \eta}\right|_{c=1} = \frac{1}{\kappa}. \tag{4.19}$$

Ainsi, plus κ est grand, plus la pente de la fonction $Y_{NO}\,(\eta)$ est faible, ce qui améliore la précision des interpolations.

D'un point de vue pratique, la variable définie par la relation (4.18) permet une évaluation indépendante de c et de η, ce qui implique une grande facilité d'implémentation dans le code CEDRE.

Les figures 4.5 présentent une comparaison de profils de Y_{NO} et $\dot{\omega}_{NO}$ à travers une flamme méthane/air stoechiométrique (calculée avec GRI-Mech 3.0), tracés en définissant η suivant 4.18. A cette richesse, le coefficient κ doit être pris au moins égal à 100 pour garantir une précision suffisante des interpolations des grandeurs liées à NO dans les des gaz brûlés.

Traitement particulier en régime riche :

L'évolution de Y_{NO} à travers la flamme peut présenter un point de retournement sous certaines conditions, en particulier en régime riche. Dès lors, lorsque l'on applique les définitions précédentes, la nouvelle variable d'avancement perd sa proprieté principale de monotonicité.

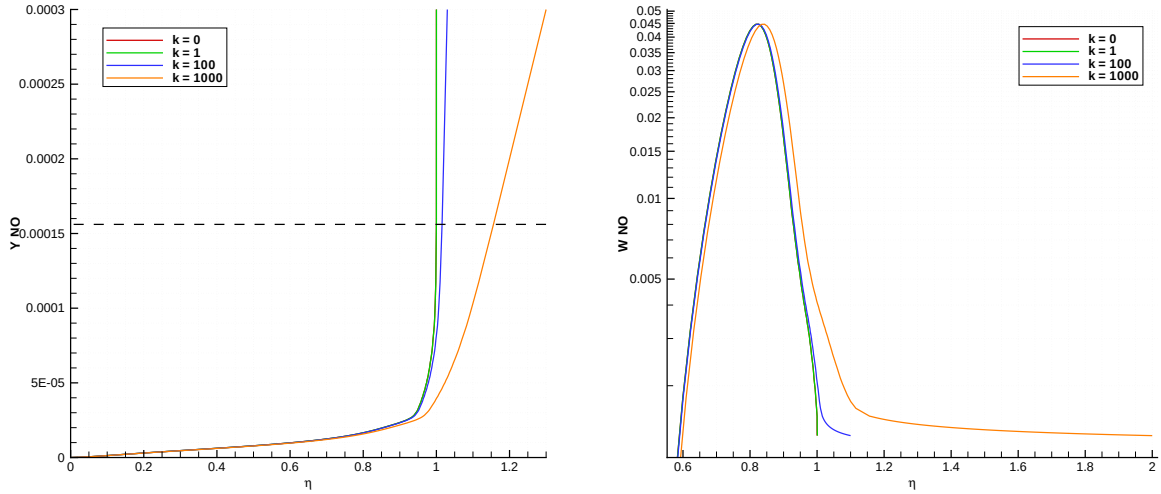

FIG. 4.5 – *Profils de Y_{NO} (à gauche) et de $\dot{\omega}_{NO}$ (à droite, sur échelle logarithmique) en fonction de η, défini par (4.18) avec différentes valeurs du coefficient multiplicatif κ (flamme méthane/air à richesse 1). Les tirets représentent le niveau de NO atteint en $c = 1$.*

Pour répondre à ce problème, il est possible de remplacer la coordonnée de l'espace des phases Y_{NO} par son abscisse curviligne (Giovangigli et Smooke [95]) notée s_{NO}. Par définition, on définit cette grandeur de la façon suivante :

$$\frac{\partial Y_{NO}}{\partial s_{NO}} \Delta Y_{NO} = \Delta s_{NO}, \tag{4.20}$$

où Δ représente une petite variation.

En partant d'une position Y^0_{NO} (l'origine), on peut retrouver, par construction, l'ensemble des valeurs prises par s_{NO} sur le domaine. Ainsi, si la variable d'avancement η est définie par la relation (4.18), il est préférable d'utiliser s_{NO} plutôt que Y_{NO} pour conserver la monotonie de η sur l'ensemble de la plage de richesse située entre les limites d'inflammabilité du mélange.

Suivant la définition de s_{NO}, il est également possible d'établir une équation de conservation pour cette grandeur à partir de l'équation de Y_{NO} :

$$\frac{\partial \rho Y_{NO}}{\partial t} + \nabla.(\rho \boldsymbol{u} Y_{NO} - \rho D_{NO} \nabla Y_{NO}) = \rho \dot{\omega}_{NO}, \tag{4.21}$$

soit :

$$\frac{\partial \rho s_{NO}}{\partial t} + \nabla.(\rho \boldsymbol{u} s_{NO} - \rho D_{NO} \nabla s_{NO}) = \rho \left(\frac{\partial Y_{NO}}{\partial s_{no}} \right)^{-1} \dot{\omega}_{NO}, \tag{4.22}$$

où $1/\frac{\partial Y_{NO}}{\partial s_{no}}$ vaut soit 1, soit -1 suivant que l'on se trouve dans une partie croissante ou décroissante de l'évolution de Y_{NO}.

Sur la figure 4.6 est tracée l'évolution de Y_{NO} et s_{NO} en fonction de x ainsi que le taux de formation de NO, en fonction de Y_{NO} et de s_{NO} pour une flamme méthane/air à richesse 1,8. Pour une meilleure lisibilité des graphiques, les grandeurs représentées dépendent directement de Y_{NO} et de s_{NO} et non de η.

Dans le cas où Y_{NO} est utilisée comme variable d'avancement, plusieurs valeurs de $\dot{\omega}_{NO}$ peuvent être atteintes pour les mêmes valeurs de Y_{NO} (présence de points de retournement). En revanche, lorsque s_{NO} définit la variable d'avancement, de tels points ne sont plus observés.

Couplage et correction des taux de réaction de NO

Sachant qu'une équation de conservation pour NO (ou η) doit nécessairement être résolue, les tables FPI étendues à NO (que nous appelerons par la suite FPI-NOx) doivent contenir les taux de réaction

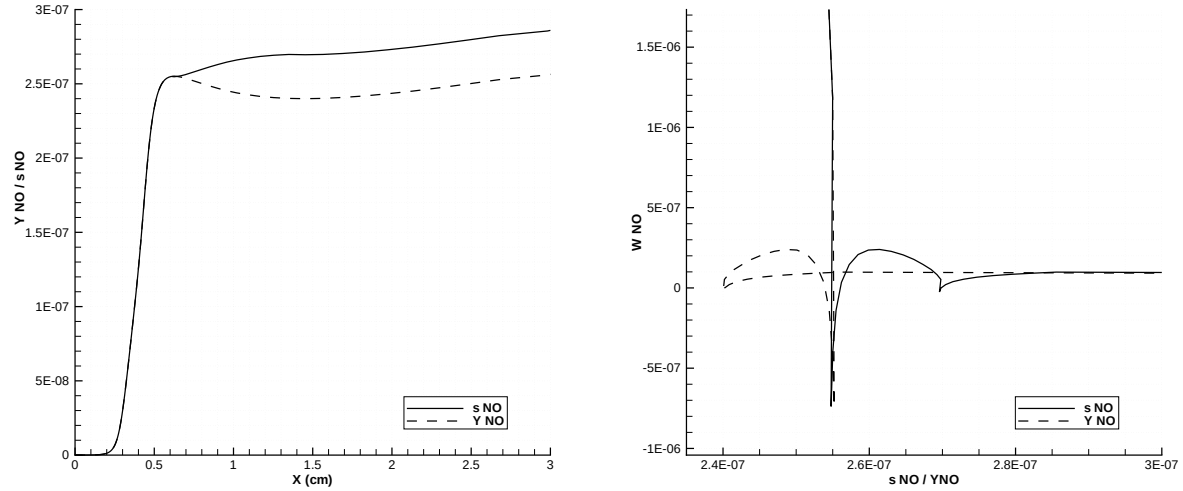

FIG. 4.6 – *Utilisation de l'abscisse curviligne s_{NO} et de Y_{NO} comme variables d'avancement au sein d'une flamme méthane/air à richesse 1,8.*

$\dot{\omega}_{NO}$ (ou $\dot{\omega}_{\eta}$). Ceux-ci sont ensuite interpolés par le code de CFD et introduits dans l'équation de transport correspondante. Dans ce cas, η n'est employée que pour l'interpolation des données relatives à NO et c reste utilisée dans le code pour l'interpolation des données concernant les autres espèces.

Suivant ce mode de couplage, un modèle de relaxation des termes sources de NO interpolés peut s'avérer nécessaire. De manière analogue aux espèces majoritaires, cette relaxation permet à l'espèce NO transportée de suivre précisément sa trajectoire tabulée et indexée par η. Suivant la procédure décrite dans le chapitre 2, on peut écrire :

$$\dot{\omega}_{NO} = \dot{\omega}_{NO}^{tab} + \frac{Y_{NO}^{tab} - Y_{NO}}{\tau_c^{NO}}, \tag{4.23}$$

où τ_c^{NO} est un temps caractéristique chimique relatif à l'espèce NO. Il est déterminé de la même manière que précédemment, en considérant l'inverse du maximum en valeur absolue atteint par le terme diagonal de la matrice jacobienne $\frac{\partial \dot{\omega}_{NO}}{\partial Y_{NO}}$, soit :

$$\tau_c^{NO} = \min\left(1/\left|\frac{\partial \dot{\omega}_{NO}}{\partial Y_{NO}}\right|\right). \tag{4.24}$$

4.4.2 Construction d'une table pour NO

Nous avons vu que de nouvelles tables spécifiques à NO doivent être construites par extrapolation des données disponibles, dans le domaine des gaz brûlés. Les calculs FPI tenant compte de la formation de NO doivent donc faire intervenir deux tables : la table FPI d'origine, indexée par c, et une table FPI-NOx, contenant les fractions massiques et taux de production de NO indexés par η. Cette section décrit la façon dont les tables FPI-NOx sont construites.

Différentes méthodes d'extrapolation peuvent être employées. Par exemple, Godel *et al.* [100] ont choisi de conserver constante la valeur de $\dot{\omega}_{NO}$ dans les gaz brulés, soit :

$$\dot{\omega}_{NO}\,(c > 1) = \dot{\omega}_{NO}\,(c = 1) = cte. \tag{4.25}$$

Suivant cette définition, la concentration de NO présente une évolution linéaire dans les gaz brûlés.

Sachant que les phénomènes chimiques sont fortement non linéaires, il a été choisi dans ce travail de procéder à des extrapolations non linéaires, à partir d'une définition plus complexe des taux de production de NO dans les gaz brûlés. Pour ce faire, on décompose $\dot{\omega}_{NO}$ en un terme de production

qui dépend essentiellement des espèces O_2, O et N_2 et un terme de disparition dépendant fortement de $[NO]$ (Chou *et al.* [43]) :

$$\dot{\omega}_{NO} = \dot{P}_{NO} - \dot{D}_{NO}\left(Y_{NO}\right). \tag{4.26}$$

Les termes de production et de disparition de NO sont décrits ci-dessous. La concentration et la fraction massique de NO sont reliées par la relation simple suivante :

$$[NO] = \frac{\rho Y_{NO}}{M_{NO}} \tag{4.27}$$

Production :

On suppose que, dans le domaine où $\dot{\omega}_{NO}$ est extrapolé, la voie de production principale de NO est la voie du NO thermique décrite par le mécanisme de Zel'dovich (voir équations (4.6) à (4.8)). En supposant que l'atome N n'est présent qu'en faibles quantités, nous avons montré précédemment que (4.10) :

$$\dot{P}_{NO} = 2k_{f1}\left[O\right]\left[N_2\right]. \tag{4.28}$$

La vitesse de réaction directe liée à la réaction (4.6) est évaluée suivant une loi d'Arrhénius dont les constantes ont été fixées par Hanson et Salimian [103] (en unités SI) :

$$k_{f1} = 1,8 \times 10^{+08} e^{-\frac{38370}{T}}. \tag{4.29}$$

La relation (4.28) nécessite la connaissance de la concentration de O. Cette grandeur peut être facilement évaluée en supposant que O et O_2 sont à l'équilibre. On écrit alors :

$$[O] = k_{eq}\left[O_2\right]^{1/2}. \tag{4.30}$$

L'équilibre O_2/O peut être décrit en tenant compte des effets de troisième corps, à savoir :

$$O_2 + M \quad \longleftrightarrow \quad O + O + M. \tag{4.31}$$

La loi correspondante s'écrit (Warnatz and al. [223]) :

$$[O] = 36,64 T^{1/2}\left[O_2\right]^{1/2} e^{-\frac{27123}{T}}. \tag{4.32}$$

En combinant les équations (4.32) et (4.29), il vient :

$$\dot{P}_{NO} = 6,5952 \times 10^{+09} T^{1/2} e^{-\frac{65493}{T}}\left[O_2\right]^{1/2}\left[N_2\right]. \tag{4.33}$$

Il faut souligner ici que l'hypothèse d'équilibre partiel entre O et O_2 est une hypothèse relativement limitante. Il a en effet été montré, via des calculs de flammes laminaires méthane/air (Missaghi *et al.* [142]), que l'hypothèse d'équilibre pour O pouvait être responsable d'une sous-estimation de plus de 25% du niveau de NO produit.

En pratique, on suppose que les concentrations de O_2 et de N_2, ainsi que la température, n'évoluent plus dans les gaz brulés et sont à l'équilibre. Ainsi, le terme $\dot{P}_{NO}$ est supposé constant dans les gaz brulés, et les variations de $\dot{\omega}_{NO}$ ne sont prises en compte que via le terme de disparition.

Disparition :

Le terme de disparition $\dot{D}_{NO}$ est évalué en extrapolant de façon non-linéaire les résultats présents dans la table de référence. Cette extrapolation est réalisée en utilisant une loi de type Arrhenius :

$$\dot{D}_{NO} = AT^b e^{-\frac{Ta}{T}}\left[NO\right]^{\alpha}, \tag{4.34}$$

où l'exposant α de la concentration de NO n'est pas un coefficient stœchiométrique.

Le paramètre α ainsi que les constantes de la loi d'Arrhenius sont évalués à l'aide d'une régression aux moindres carrés, appliquée aux termes sources de NO présents dans la table de référence. La régression est réalisée à partir d'états proches de l'équilibre, typiquement pour c >0,98, là où les espèces majoritaires peuvent être considérées dans un état quasi-stationnaire. La température apparaissant dans la relation (4.34) peut être assimilée à la température d'équilibre.

A richesse 1, les paramètres d'Arrhenius obtenus après extrapolation sont les suivants :

$$\dot{D}_{NO} = 42,38T^{-3,4}e^{-\frac{33639}{T}}\,[NO]^{-0,55624}\,. \tag{4.35}$$

Au final, on approche donc le taux de production de NO dans les gaz brûlés (pour $c > 1$) par la relation suivante :

$$\dot{\omega}_{NO} = 6,5952\times 10^{+09}T^{1/2}e^{-\frac{65493}{T}}\,[O_2]^{1/2}\,[N_2] - AT^{b}e^{-\frac{Ta}{T}}\,[NO]^{\alpha}\,, \tag{4.36}$$

où les paramètres α, b et T_a sont à déterminer suivant les conditions du calcul. De cette manière, $\dot{\omega}_{NO}$ ne dépend plus que de Y_{NO} et des valeurs à l'équilibre de la température, de Y_{O_2} et de Y_{N_2}.

La figure 4.7 représente l'évolution du taux de réaction de NO extrapolé pour une flamme méthane/air stœchiométrique atmosphérique. L'erreur avec le taux de réaction exact donné par PREMIX est également représentée. Celle-ci ne dépasse pas 3% dans les gaz brûlés, et semble se stabiliser par la suite.

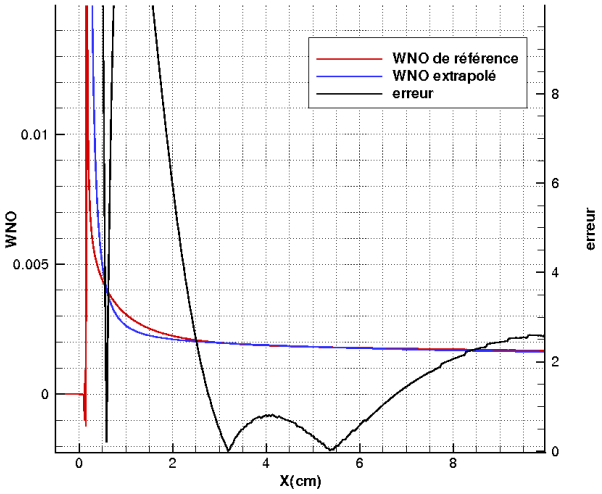

FIG. 4.7 – *Comparaison des taux de réaction de NO réel et extrapolé pour une flamme méthane/air stœchiométrique. L'erreur en % entre les deux courbes est également représentée.*

La figure 4.8 présente les évolutions de Y_{NO} et $\dot{\omega}_{NO}$ extrapolés, comparées aux résultats issus de la table d'origine, pour trois flammes à richesses différentes (0,75, 1 et 1,8). Les profils de Y_{NO} ont été extrapolés en supposant les variations de NO en aval de la flamme uniquement pilotées par la chimie. Ceux-ci ne sont présentés qu'à titre indicatif et ne sont pas réellement utilisés lors des calculs.

4.4.3 Validation des tables FPI-NOx sur une flamme laminaire de prémélange

On se propose ici de valider succintement la méthode de création des tables FPI-NOx, précédemment décrite. Pour cela, on choisit de simuler une flamme laminaire de prémélange librement propagative à richesse 1 avec le code CEDRE. Les paramètres numériques choisis (pas de temps, maillage, schémas...) sont les mêmes que ceux employés pour la validation de la méthode FPI d'origine (voir chapitre 2). On s'intéresse en particulier dans cette section à la concentration de l'espèce NO évaluée en utilisant les tables FPI-NOx. Ces tables ont été créées avec le mécanisme GRI-Mech 3.0.

Trois cas de calculs ont été effectués :

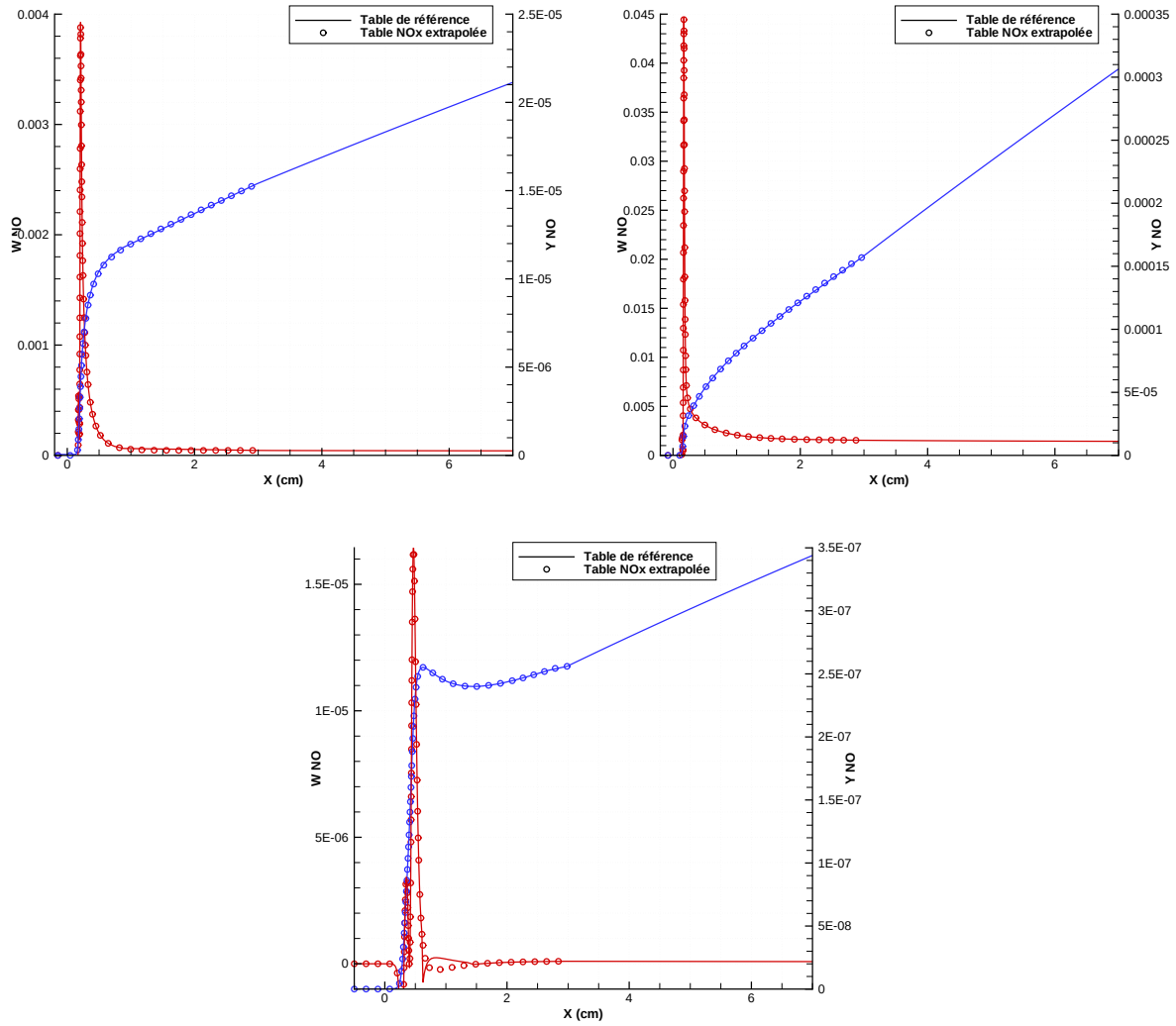

FIG. 4.8 – *Evolution de Y_{NO} (bleu) et $\dot{\omega}_{NO}$ (rouge) à travers trois flammes de prémélange laminaires méthane/air à richesses différentes. En haut à gauche, φ =0,75, en haut à droite, φ =1, en bas φ =1,8. Les données extrapolées sont comparées aux données issues des tables FPI.*

- le premier a été réalisé en utilisant une variable d'avancement indépendante de c pour suivre l'évolution de NO. Cette variable d'avancement est simplement définie par la relation (4.17) ;
- le second utilise une variable d'avancement η définie par la relation (4.18) avec $\kappa = 100$;
- le troisième utilise également la relation (4.18), avec $\kappa = 1000$.

La figure 4.9 compare les profils de c et de η obtenus par le calcul CEDRE. Alors que c tend rapidement vers 1, η continue à évoluer dans les gaz brûlés. Cette évolution se fait avec une pente beaucoup plus importante dans le cas où le coefficient multiplicatif dans (4.18) est choisi égal à 1000 plutôt qu'à 100. Ainsi, on peut s'attendre à une meilleure précision des interpolations lorsque η est défini avec un coefficient $\kappa = 1000$.

La figure 4.10 présente les profils de Y_{CO_2} et de Y_{NO} obtenus sur la flamme stœchiométrique par le calcul CEDRE et comparés aux données PREMIX. Les profils de CO_2 sont issus de la résolution de l'équation de transport sur cette espèce : ils ne sont présentés que pour vérifier la convergence des simulations. Le second graphique montre l'évolution de Y_{NO} obtenue loin derrière la flamme par le modèle implanté dans CEDRE, comparée aux données contenues dans la table FPI de référence. Les profils de Y_{NO} présentés ici correspondent aux données interpolées dans les tables FPI-NOx en

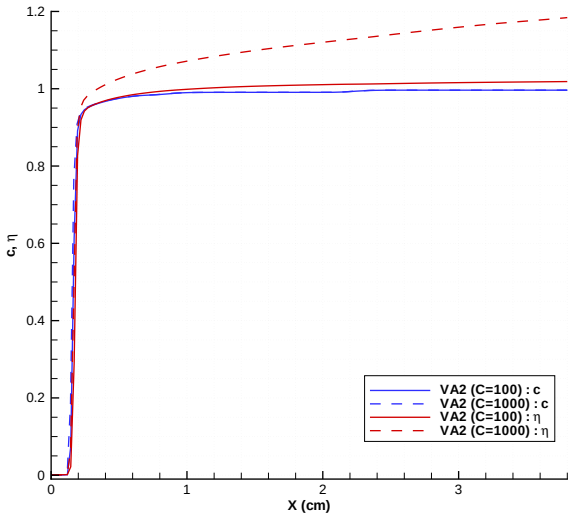

FIG. 4.9 – *Profils de c et η à travers la flamme laminaire stoechiométrique. η est ici défini par la relation (4.18) avec $\kappa = 100$ et $\kappa = 1000$.*

fonction de η.

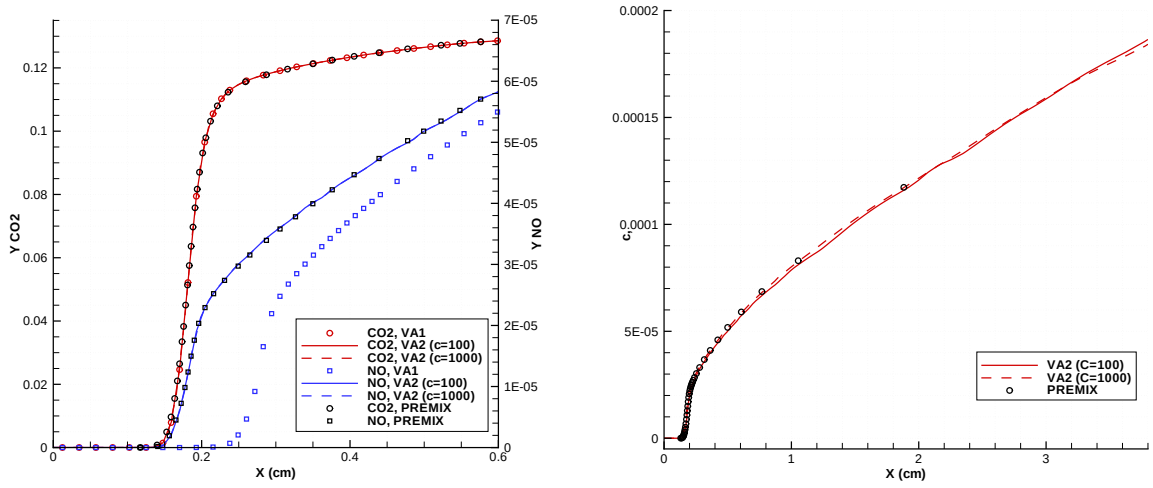

FIG. 4.10 – *Profils de Y_{CO_2} et Y_{NO} à travers la flamme laminaire stœchiométrique obtenus à l'aide de CEDRE et du modèle de tabulation pour NO. VA1 désigne le cas où η est définie suivant (4.17) et VA2 le cas où η est obtenue via (4.18).*

Un décalage important au niveau du profil de Y_{NO} obtenu à partir de (4.17) est observé sur le tracé de gauche. Ce résultat concorde avec les conclusions données par Bradley *et al.* [26], à savoir que l'utilisation d'une variable d'avancement complètement indépendante pour suivre l'évolution de NO entraîne un découplage important entre les champs de température et de Y_{NO}. Cette méthode ne peut donc pas être utilisée dans ce cadre.

Il apparaît en outre que, dans la zone de flamme (pour $c < 1$), κ n'a que peu d'influence sur la précision des interpolations. En effet, dans cette zone, η dépend fortement de c. En revanche, loin derrière la flamme, des écarts plus importants apparaissent entre les deux cas. Ainsi, les données obtenues pour $\kappa = 100$ semblent osciller légèrement alors que les données tirées du cas $\kappa = 1000$ montrent une évolution beaucoup plus régulière de Y_{NO}. Sur ce cas, une valeur de κ proche de 100 est donc insuffisante pour garantir des interpolations précises de $\dot{\omega}_{NO}$ dans la table.

La figure 4.10 valide également le fait que, loin de la flamme, le modèle permet de prédire Y_{NO} de façon satisfaisante. En effet, les données du calcul semblent prolonger naturellement les résultats obtenus par PREMIX.

4.5 Couplage avec la turbulence

Nous avons retenu ici un modèle à PDF présumée pour modéliser l'effet de la turbulence sur la production de NO. De même que dans le cas du modèle FPI d'origine, ce modèle autorise la construction d'une table "turbulente" rassemblant l'ensemble des paramètres chimiques filtrés en fonction des deux premiers moments statistiques de la variable η et éventuellement de la fraction de mélange. Ainsi, le calcul du terme source filtré de NO peut être complètement découplé du calcul CEDRE, et réalisé de façon préalable. Le couplage avec CEDRE se fait ensuite par de simples interpolations linéaires dans les tables FPI-NOx.

4.5.1 Difficultés

NO est une espèce hors équilibre dans les gaz brûlés, ce qui empêche l'utilisation effective de modèles de turbulence basés sur une hypothèse de flammelettes. Pour illustrer cette proposition, on se place dans la limite BML, où le front de flamme est supposé infiniment mince.

Suivant la théorie BML, on peut considérer le front de flamme comme une interface séparant deux états distincts du mélange (voir figure 4.11). De cette manière, si on place un capteur $\mathcal{C}$ dans l'écoulement, au niveau de la flamme, on verra passer alternativement soit des gaz frais, soit des gaz brûlés (voir les travaux de Bray, Moss et Libby [34], [33]). On obtient ainsi un signal de température en échelons [174] (figure 4.12) représentatif d'un mouvement intermittant.

On se propose ici de réaliser une analyse similaire pour la formation de NO dans le régime des flammelettes.

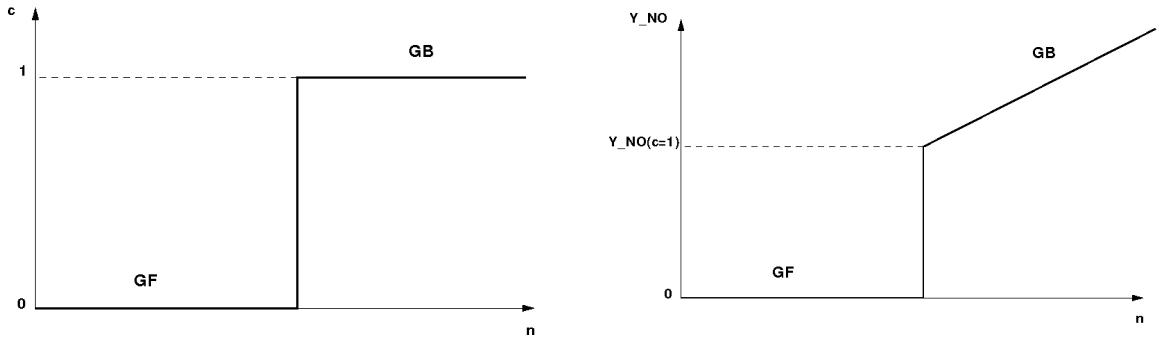

FIG. 4.11 – *Profils de variable d'avancement et de fraction massique de NO relevés dans la direction normale au front de flamme, dans la limite BML.*

Le profil type de Y_{NO} que l'on peut relever à travers une flamme dans le régime des flammelettes est tracé figure 4.11. NO étant produit en aval du front de flamme, dans les gaz chauds (via le mécanisme de Zel'dovich), la pente de la droite $Y_{NO}(n)$ est positive dans cette région. Par conséquent, lorsque l'on relève le signal de Y_{NO} au niveau du capteur $\mathcal{C}$, le signal prend une forme différente de celui de c. De nombreux états atteints par Y_{NO} seront en effet accessibles du côté des gaz brûlés et le signal type que l'on pourrait observer est représenté figure 4.12.

Alors que la PDF de c est représentée par une fonction bimodale dans la limite BML, la PDF de Y_{NO} doit plutôt prendre une forme proche de celle proposée figure 4.13. Cette PDF est formée par un pic de Dirac centré en $Y_{NO} = 0$ et d'un segment de droite de pente négative, partant de $Y_{NO}^{eq} = Y_{NO}(c = 1)$. Ce segment représente le fait que la probabilité d'atteindre une valeur Y_{NO}^{*} située

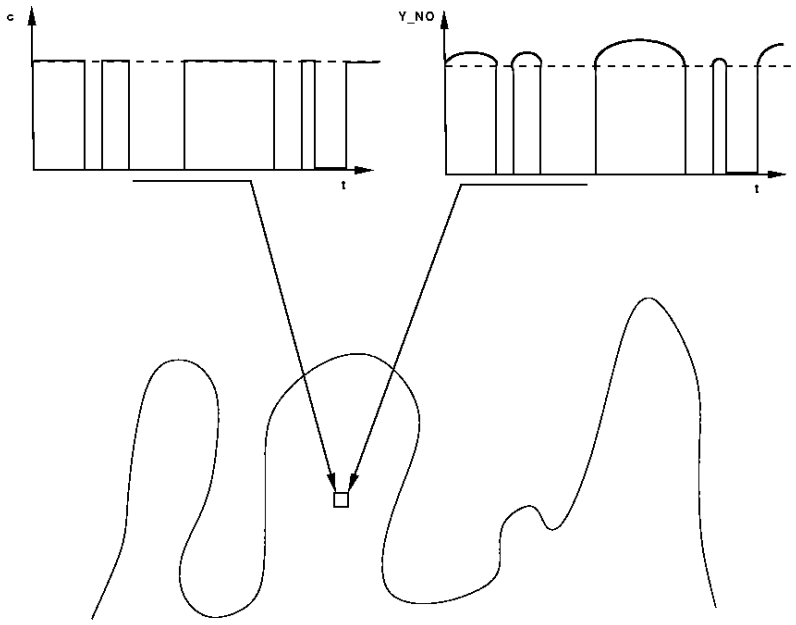

FIG. 4.12 – *Signaux de variable d'avancement et de fraction massique de NO relevés à partir d'un capteur situé au niveau du front de flamme turbulent dans la limite BML.*

dans les gaz brûlés, est inversement proportionnelle à l'éloignement par rapport au front de flamme. Ainsi, plus l'amplitude des battements de la flamme seront importants, plus la valeur maximale de Y_{NO} visible par le capteur $\mathcal{C}$ sera élevée, ce qui aura pour effet de diminuer la pente du segment de droite de la PDF.

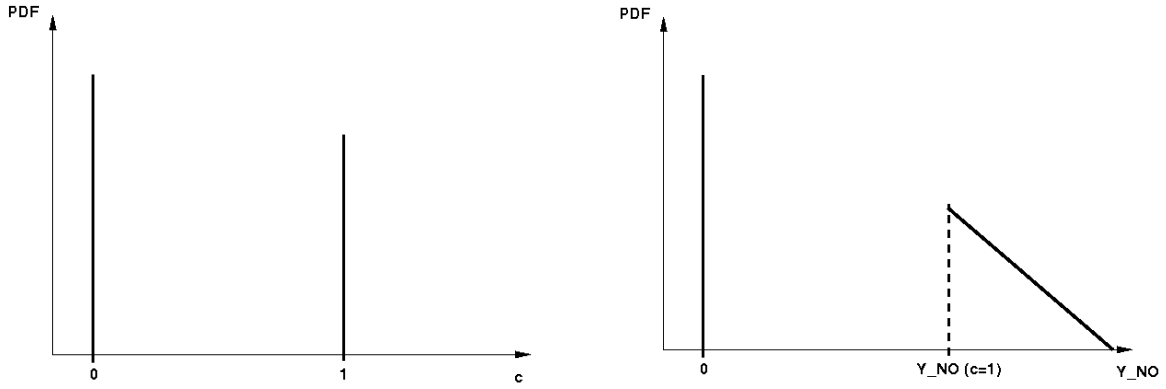

FIG. 4.13 – *PDF de c et PDF de Y_{NO} dans la limite BML.*

Bradley *et al.* [26] ainsi que Godel *et al.* [100] utilisent une fonction β pour estimer la PDF de la nouvelle variable d'avancement (quelle que soit sa définition). Cette fonction tend cependant vers une limite bimodale lorsque les fluctuations sont importantes, ce qui implique que le taux de production de NO derrière la flamme turbulente est maintenu constant. Compte tenu des remarques précédentes, cette fonction ne peut pas être retenue pour représenter la PDF de NO.

En supposant que les temps chimiques d'évolution de NO derrière la flamme sont grands devant les temps turbulents, c'est à dire que le mélange turbulent est plus rapide que les processus chimiques, on peut supposer que NO se comporte comme un scalaire passif. Si l'on considère le mélange turbulent d'un scalaire en THI (turbulence homogène isotrope), la PDF de ce scalaire peut être représentée par

une loi gaussienne.

En première approximation, nous considérons par la suite que la PDF de Y_{NO}, et par extension la PDF de η, peuvent être caractérisées par une PDF gaussienne.

4.5.2 Définition de la PDF de η

Pour simplifier les notations, nous considérons dans cette section que les grandeurs chimiques ne dépendent que de la variable d'avancement η.

De même que pour les espèces majoritaires, l'évaluation des valeurs filtrées (ou moyennes) de Y_{NO} et $\dot{\omega}_{NO}$ à l'aide de PDF présumées est réalisée suivant :

$$\widetilde{Y}_{NO} = \int_0^{\eta^{max}} Y_{NO}\left(\eta^*\right) \widetilde{P}\left(\eta^*\right) d\eta^*, \tag{4.37}$$

$$\widetilde{\dot{\omega}}_{NO} = \int_0^{\eta^{max}} \dot{\omega}_{NO}\left(\eta^*\right) \widetilde{P}\left(\eta^*\right) d\eta^*. \tag{4.38}$$

Des fonctions gaussiennes tronquées ont par le passé été utilisées pour modéliser la PDF de la température, par exemple par Gerlinger *et al.* [86]. Ces PDF sont définies par une fonction gaussienne sur l'ensemble du domaine, sauf à proximité des bornes. Des fonctions de Dirac centrées sur les bornes du domaine sont ajoutées à la fonction gaussienne de façon à conserver une intégrale de la PDF égale à 1.

Cette PDF peut être définie de la façon suivante [86] :

$$\widetilde{P}\left(\eta\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\widetilde{\eta''^2}}} e^{-\frac{\eta-\widetilde{\eta}}{2\eta''^2}} \left[H\left(\eta\right) - H\left(\eta - \eta_{max}\right)\right] + A_1\delta\left(\eta\right) + A_2\delta\left(\eta - \eta_{max}\right). \tag{4.39}$$

La détermination des paramètres A_1 et A_2 nécessite l'utilisation des contraintes suivantes :

$$\int_0^{\eta_{max}} \widetilde{P}\left(\eta^*\right) d\eta^* = \underbrace{\int_0^{\eta_{max}} \widetilde{P}_G\left(\eta^*\right) d\eta^*}_{C} + A_1 + A_2 = 1, \tag{4.40}$$

$$\int_0^{\eta_{max}} \eta^* \widetilde{P}\left(\eta^*\right) d\eta^* = \underbrace{\int_0^{\eta_{max}} \eta^* \widetilde{P}_G\left(\eta^*\right) d\eta^*}_{B} + A_2\eta_{max} = \widetilde{\eta}. \tag{4.41}$$

La fonction $\widetilde{P}_G$ correspond à une gaussienne. Les intégrales C et B peuvent être déterminées numériquement ou bien analytiquement. L'expression analytique de C peut être établie sachant que la fonction de répartition d'une gaussienne s'exprime suivant une fonction erreur, et l'expression de B peut être déterminée en réalisant une intégration par parties.

Au final, en combinant les contraintes (4.40) et (4.41), on obtient la valeur des paramètres A_1 et A_2 définissant la hauteur des pics de Dirac :

$$A_1 = 1 - C - \frac{\widetilde{\eta} - B}{\eta_{max}}, \tag{4.42}$$

$$A_2 = \frac{\widetilde{\eta} - B}{\eta_{max}}, \tag{4.43}$$

où η_{max} représente la valeur maximale que η peut prendre au sein de la table. Cette grandeur est généralement fixée par l'utilisateur et doit être suffisamment grande pour que la probabilité de l'atteindre au cours du calcul soit faible.

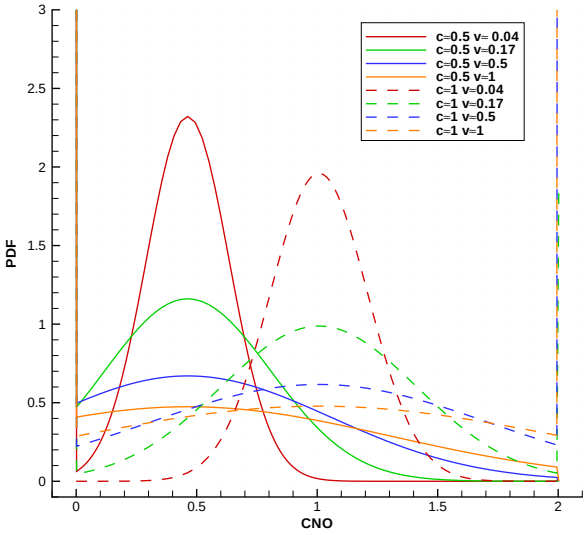

FIG. 4.14 – *Formes prises par la PDF gaussienne tronquée en fonction de différentes valeurs de $\widetilde{\eta}$ et de la variance réduite de η.*

La figure 4.14 présente différentes formes prises par la PDF définie suivant (4.39) en fonction des deux premiers moments statistiques de la variable η.

Le fait de définir deux PDF différentes pour η et pour c peut s'avérer source de problèmes lors de l'évaluation des moments statistiques de η, d'autant plus que les deux grandeurs sont étroitement liées.

4.5.3 Détermination de $\widetilde{\eta}$ et $\widetilde{Y}_{NO}$

Le premier moment statistique de η peut être obtenu par la résolution d'une équation de transport spécifique :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{\eta}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{\eta} + \overline{\rho}D_{\eta}\nabla\widetilde{\eta}\right) = -\nabla.\boldsymbol{\tau}_{\eta}^{t} + \overline{\rho}\widetilde{\dot{\omega}_{\eta}}, \tag{4.44}$$

avec $\boldsymbol{\tau}_{\eta}^{t}$ le terme diffusion turbulente de η, exprimé suivant une relation de type gradient :

$$\boldsymbol{\tau}_{\eta}^{t} = -\overline{\rho}D_{t}\nabla\widetilde{\eta}. \tag{4.45}$$

Le terme $\widetilde{\dot{\omega}_{\eta}}$ représente les sources chimiques filtrées relatives à η. En intégrant directement la valeur exacte de $\widetilde{\dot{\omega}_{\eta}}$, on trouve :

$$\widetilde{\dot{\omega}_{\eta}} = \int_{0}^{\eta_{max}} \left[\dot{\omega}_{c} + \kappa\dot{\omega}_{NO}\right]\widetilde{P}\left(\eta^{*}\right)d\eta^{*}. \tag{4.46}$$

Ce terme peut être calculé au préalable et tabulé dans les bases de données FPI-NOx.

En pratique, sachant que les grandeurs c et Y_{NO} sont accessibles dans le code par la résolution d'équations de conservation spécifiques, il est possible d'utiliser directement la relation (4.18) filtrée pour recalculer $\widetilde{\eta}$. Une difficulté apparaît toutefois du fait que les formes fonctionnelles des PDF de c et de η sont différentes :

$$\begin{aligned}
\widetilde{\eta} &= \int_{0}^{\eta_{max}} \eta^{*}\widetilde{P}\left(\eta^{*}\right)d\eta^{*} \\
&= \int_{0}^{\eta_{max}} \left[c\left(\eta^{*}\right) + \kappa Y_{NO}\left(\eta^{*}\right)\right]\widetilde{P}\left(\eta^{*}\right)d\eta^{*} \\
&= \int_{0}^{\eta_{max}} c\left(\eta^{*}\right)\widetilde{P}\left(\eta^{*}\right)d\eta^{*} + \kappa\widetilde{Y}_{NO}.
\end{aligned} \tag{4.47}$$

Ce qui conduit à l'inégalité suivante :

$$\int_0^{\eta_{max}} c\left(\eta^*\right) \widetilde{P}\left(\eta^*\right) d\eta^* = \widetilde{e} \neq \widetilde{c}. \tag{4.48}$$

La valeur de $\widetilde{e}$ n'est pas connue *a priori* dans le calcul. Il est toutefois possible de précalculer $\widetilde{e}$ lors de la construction de la base de donnée FPI-NOx, puis de la tabuler.

La difficulté liée à l'évaluation de $\widetilde{\eta}$ montre clairement les limitations de l'approche présentée. En particulier, le fait de choisir des fonctions différentes pour estimer les PDF de η et de c, ne permet pas de déterminer de manière consistante la valeur de $\widetilde{\eta}$ à partir des données transportées. Le recalcul exact de $\widetilde{\eta}$ ne peut être envisagé que si les PDF de c et η sont étroitement liées. Une amélioration possible du modèle consiste donc à définir une forme de PDF unique capable de représenter à la fois les variations de c et de η.

En considérant les limitations énoncées ici, les calculs présentés par la suite ont été réalisés en utilisant la méthode consistant à transporter la variable d'avancement $\widetilde{\eta}$.

4.5.4 Détermination de $\widetilde{\eta''^2}$

La variance de η est définie par :

$$\eta''^2 = \widetilde{\eta\eta} - \widetilde{\eta}\widetilde{\eta}. \tag{4.49}$$

En pratique, il est plus aisé de travailler avec une variance de η réduite. On définit cette grandeur suivant :

$$\sigma_\eta = \frac{\widetilde{\eta''^2}}{\widetilde{\eta}\left(\eta_{max} - \widetilde{\eta}\right)}. \tag{4.50}$$

La grandeur σ_η pouvant être directement déterminée à partir de $\widetilde{\eta''^2}$, les modèles considérés ci-dessous ne concernent que cette dernière.

Modèle basé sur une équation de transport :

Les modèles et méthodes proposés sont déduits par analogie avec le scalaire réactif c. Les expressions données ci-dessous sont donc les mêmes que celles écrites pour c, appliquées au scalaire η. Leurs formes restent globalement inchangées.

De même que pour la variable d'avancement c, une équation de transport pour le second moment statistique de η peut être écrite. Celle-ci s'obtient en combinant linéairement les équations de conservation pour $\widetilde{\eta\eta}$ et $\widetilde{\eta}\widetilde{\eta}$ [219]. On trouve :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{\eta''^2}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{\eta''^2} - \overline{\rho}D_\eta \nabla\widetilde{\eta''^2}\right) = -\nabla.\boldsymbol{\tau}^t_{\eta''^2} - 2\boldsymbol{\tau}^t_\eta.\nabla\widetilde{\eta} - 2\overline{\rho}\widetilde{s_{\chi_\eta}} + 2\overline{\rho}\left(\widetilde{\dot{\omega}_\eta\eta} - \widetilde{\dot{\omega}_\eta}\widetilde{\eta}\right). \tag{4.51}$$

Le tenseur $\boldsymbol{\tau}^t_{\eta''^2}$ peut être fermé via une hypothèse de gradient :

$$\boldsymbol{\tau}^t_{\eta''^2} = -\overline{\rho}\frac{\nu_t}{Sc_t}\nabla\widetilde{\eta''^2}. \tag{4.52}$$

Le terme de corrélation $\widetilde{\dot{\omega}_\eta\eta} - \widetilde{\dot{\omega}_\eta}\widetilde{\eta}$ peut être directement interpolé par CEDRE dans la table FPI-NOx. Cette méthode nécessite le stockage préalable de la grandeur $\widetilde{\dot{\omega}_\eta\eta}$.

Pour finir, le taux de dissipation scalaire de sous-maille, $\widetilde{s_{\chi_\eta}}$, que l'on peut assimiler à la dissipation scalaire filtrée $\widetilde{\chi}_\eta$, doit être modélisé. Ici, deux modèles sont proposés, basés sur les approches communément employées pour la dissipation des scalaires z et c :

- il est d'abord possible d'appliquer le modèle de relaxation linéaire classique [164] :

$$\widetilde{s_{\chi_\eta}} = C\frac{\widetilde{\eta''^2}}{\tau_t}. \tag{4.53}$$

Le temps de relaxation τ_t est un temps caractéristique de la turbulence défini en LES par :

$$\tau_t = \frac{Sc_t\Delta^2}{\nu_t}, \tag{4.54}$$

où C est la constante du modèle prise généralement de l'ordre de l'unité. Ce temps caractéristique peut également être corrigé par le modèle ITNFS de manière à tenir compte des interactions chimie/turbulence ;

- par analogie avec c, il est également possible de déterminer un modèle de dissipation scalaire de η tenant compte de la structure de la flamme. Pour c, on a écrit :

$$\overline{\rho}\widetilde{\chi_c} = \frac{1}{2}\left(2c_m - 1\right)\rho_0 S_L^0 \Sigma \frac{\widetilde{c''^2}}{\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}. \tag{4.55}$$

La densité de surface de flamme peut être définie par :

$$\Sigma = K\frac{\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}{\Delta}, \tag{4.56}$$

où K est une constante de l'ordre de 5.
En introduisant ce modèle dans la relation (4.55), on peut réécrire $\widetilde{\chi_c}$ indépendamment de $\widetilde{c}(1-\widetilde{c})$. En appliquant enfin cette relation à η, il vient :

$$\overline{\rho}\widetilde{\chi_\eta} = \frac{K}{2\Delta}\left(2c_m - 1\right)\rho_0 S_L^0 \widetilde{\eta''^2}, \tag{4.57}$$

où S_L^0 et c_m permettent de relier $\widetilde{\chi_\eta}$ aux caractéristiques de la flamme. Ce modèle est similaire au modèle de relaxation linéaire à la différence près que le temps de relaxation imposé est un temps caractéristique de la flamme au lieu d'être un temps turbulent.

En supposant l'équilibre entre production et dissipation dans l'équation (4.51) [167], il est possible de définir une relation algébrique permettant de calculer facilement $\widetilde{\eta''^2}$. Ainsi, en approchant le terme de dissipation par le modèle de relaxation linéaire on trouve :

$$\widetilde{\eta''^2} = C\left[\Delta^2|\nabla\widetilde{\eta}|^2 + \left(\widetilde{\dot{\omega}_\eta\eta} - \widetilde{\dot{\omega}_\eta}\widetilde{\eta}\right)^{tab}\frac{\Delta^2}{\nu_t/Sc_t}\right], \tag{4.58}$$

avec C de l'ordre de $0,1$.

Modèle exploitant la relation entre η, c et Y_{NO} :

Sachant que η dépend linéairement de c et de Y_{NO}, il est possible d'exprimer $\widetilde{\eta''^2}$ en fonction des seconds moments statistiques de ces deux grandeurs :

$$\widetilde{\eta''^2} = \left(c + \widetilde{\kappa Y_{NO}}\right)''^2 = \widetilde{c''^2} + \kappa^2\widetilde{Y_{NO}''^2} + 2\kappa\widetilde{c''Y_{NO}''}, \tag{4.59}$$

avec $\widetilde{c''Y_{NO}''} = \widetilde{cY_{NO}} - \widetilde{c}\widetilde{Y_{NO}}$ la corrélation croisée entre c et Y_{NO}. Les modèles d'évaluation de la grandeur $\widetilde{c''^2}$ ont été décrits dans le chapitre 3.

La variance de Y_{NO} doit être modélisée. En supposant que Y_{NO} ne varie que faiblement au cours du calcul (les gradients de Y_{NO} restent toujours très faibles), on peut modéliser sa variance de la même

manière que la variance d'un scalaire passif. Suivant cette hypothèse, un modèle de relaxation peut être utilisé, soit :

$$\widetilde{Y_{NO}''^2} = C\Delta^2 |\nabla \widetilde{Y}_{NO}|^2, \tag{4.60}$$

où la constante C est choisie de l'ordre de l'unité. Cette expression peut être considérée correcte dans la mesure où Y_{NO} ne varie que faiblement comparé à c.

Trois niveaux de simplifications peuvent alors être distingués pour exprimer $\widetilde{\eta''^2}$:

- en première approximation, on peut négliger les fluctuations de Y_{NO}. Etant donné qu'il y a plusieurs ordres de grandeur d'écart entre c et Y_{NO}, on peut écrire :

$$\widetilde{\eta''^2} \approx \widetilde{c''^2}; \tag{4.61}$$

- dans un deuxième temps, il est possible de considérer les fluctuations suivant Y_{NO} mais de négliger la corrélation croisée $\widetilde{c''Y_{NO}''}$. On trouve :

$$\widetilde{\eta''^2} \approx \widetilde{c''^2} + \kappa^2 \widetilde{Y_{NO}''^2}; \tag{4.62}$$

- pour être plus précis, la corrélation entre c et Y_{NO} doit être modélisée. Pour ce faire, la solution la plus simple consiste à calculer préalablement cette grandeur à partir des données contenues dans la table FPI-NOx, puis de la tabuler. On obtient :

$$\widetilde{\eta''^2} = \widetilde{c''^2} + \kappa^2 \widetilde{Y_{NO}''^2} + 2\kappa \left(\widetilde{cY_{NO}} - \widetilde{c}\widetilde{Y}_{NO} \right)^{tab}. \tag{4.63}$$

Pour des raisons pratiques, nous avons retenu, dans ce travail, la première hypothèse négligeant les fluctuations de Y_{NO}. De cette manière, l'évaluation de la variance de η est directe et ne nécessite pas de modèle supplémentaire.

4.5.5 Exemple de tables FPI-NOx filtrées

Si la PDF de η est évaluée suivant une gaussienne et en considérant que la variance de η est assimilable à la variance de c, le comportement de la PDF est différent selon que l'on se trouve dans la zone de flamme ou en aval de la flamme :

- dans la flamme, la PDF de η possède une forme gaussienne. Lorsque la variance de la variable d'avancement est maximale, alors que la β-PDF ne considère le mélange turbulent qu'entre les gaz frais et les gaz brûlés à l'équilibre (forme bimodale), la fonction gaussienne permet de représenter le mélange turbulent en tenant compte d'états situés loin derrière la flamme. Ce type de PDF est donc adapté à l'espèce NO qui peut être créée hors équilibre ;
- derrière la flamme, la variance de η est très petite, la PDF de η se réduit donc à un pic de Dirac centré sur $\widetilde{\eta}$. Ce type de PDF correspond à une hypothèse de mélange homogène. Cette situation se retrouve en conditions réelles sachant que derrière la flamme, où l'espèce NO évolue très lentement, les temps caractéristiques de la turbulence peuvent être considérés comme faibles devant les temps chimiques liés à NO. Ceci se traduit par le fait que le mélange turbulent à l'échelle de la maille s'effectue plus rapidement que les réactions chimiques de formation de NO.

Les figures 4.15 présentent des exemples de tables FPI-NOx filtrées obtenues pour deux flammes à richesse 0,75 et 1.

4.6 Modèle cinétique de formation de NO

4.6.1 Principe de la méthode

L'un des principaux avantages des tables FPI est qu'elles donnent accès, en tout point de l'écoulement, à la composition détaillée des gaz. Ainsi, les concentrations des espèces majoritaires sont

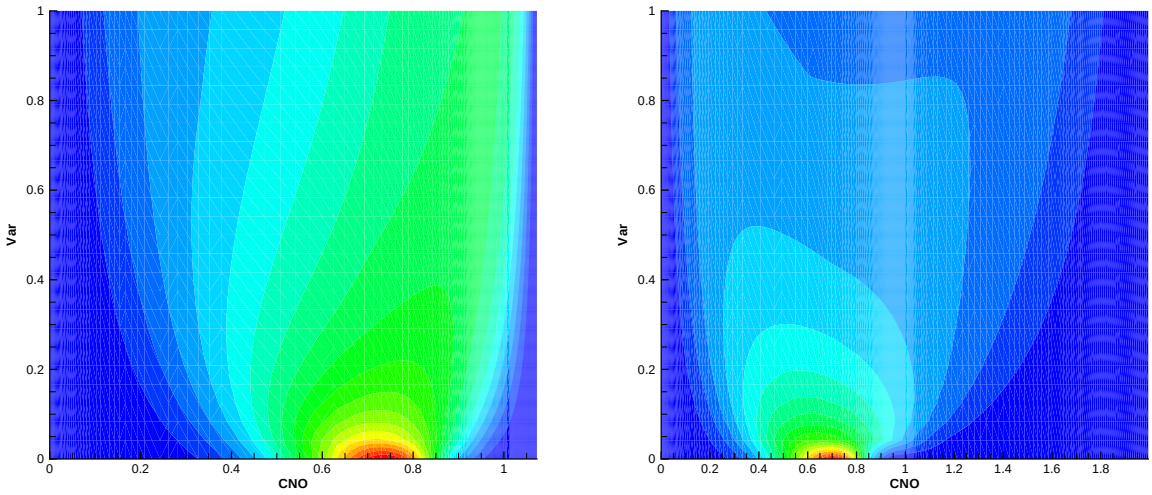

FIG. 4.15 – *Exemple de tables FPI-NOx. Taux de production de NO filtré à richesse 0,75 (gauche) et 1 (droite) en fonction de la variable d'avancement η et de la variance réduite.*

accessibles facilement de même que les concentrations des espèces minoritaires, à conditions que ces espèces apparaissent dans les tables. Si ce schéma est suffisamment complet, de nombreux radicaux précurseurs de NO sont donc disponibles. Il est alors possible d'exploiter ces données de manière à déterminer le taux de production de NO en tout point du domaine de calcul.

L'approche proposée ici consiste à modéliser la production de NO en utilisant un schéma réactionnel détaillé spécifiquement pour cette espèce, où les concentrations des autres espèces impliquées sont interpolées dans les tables. Les taux de réaction ainsi calculés sont ensuite introduits dans une équation de conservation pour Y_{NO} afin de déterminer l'évolution chimique de cette espèce. Un cycle de calcul complet se déroule donc en trois phases :

- dans un premier temps, les interpolations sont réalisées dans la table FPI en fonction de la variable d'avancement c, ce qui donne accès à la composition complète des gaz. Les fractions massiques des espèces minoritaires et majoritaires apparaissant dans le sous-mécanisme représentant l'évolution chimique de NO sont alors retenues ;
- les fractions massiques des précurseurs issues des tables sont utilisées pour calculer le taux de réaction de NO. Celui-ci est déterminé à partir des lois d'Arrhenius données par le modèle cinétique retenu. Dans ces relations, on utilise les valeurs de Y_{NO} et de la température présentes localement dans le champ résolu par le code de CFD ;
- les taux de réaction des espèces majoritaires, déterminés via la table FPI, ainsi que le taux de réaction de l'espèce NO, calculé à partir du sous-mécanisme détaillé, sont introduits dans les équations de transport correspondantes pour la progression en temps.

Le sous-mécanisme spécifique à NO n'est constitué que de réactions faisant intervenir directement cette espèce. On peut par exemple choisir le sous-mécanisme détaillé proposé par Hewson et Williams [108] ou par Hewson et Bollig [107].

De manière à conserver une certaine consistance dans le calcul, il est important que le sous-mécanisme pour NO utilisé soit inclu au mécanisme détaillé servant à la construction de la table. De cette manière, la composition locale tabulée des gaz, et en particulier la composition des précurseurs de NO, suit l'évolution de Y_{NO} à travers la flamme.

L'approche proposée peut être apparentée à une méthode de post-traitement instationnaire suivant un schéma de couplage "one-way", pour traiter la formation de NO. Ce mode de couplage peut être schématisé par le graphique 4.16.

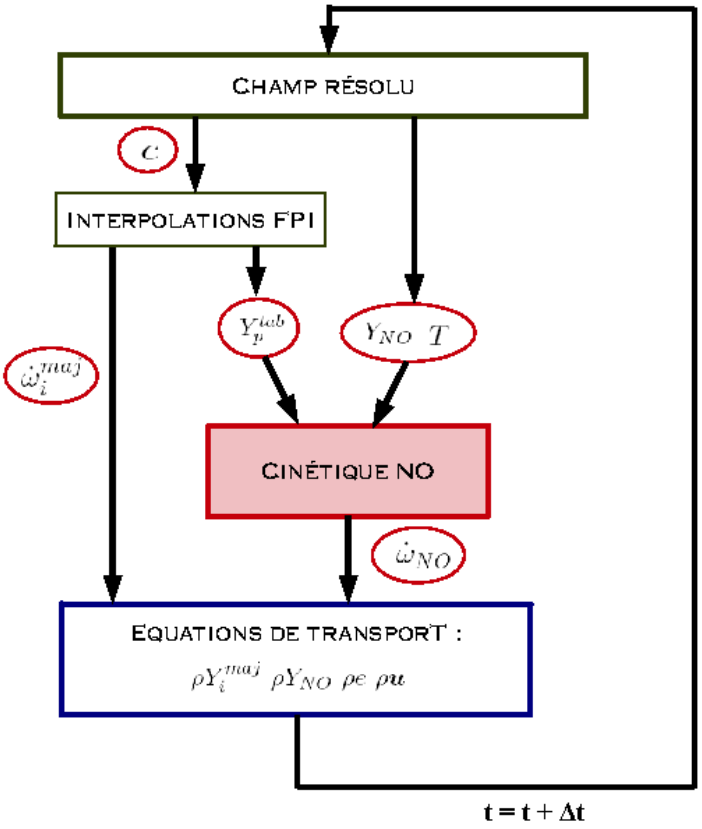

FIG. 4.16 – *Schéma de fonctionnement du modèle cinétique de formation de NO couplé aux tables FPI.*

4.6.2 Avantages et inconvénients

Les avantages et les inconvénients du modèle sont fortement liés à ceux d'une telle méthode de post-traitement :

- le calcul de $\dot{\omega}_{NO}$ par une méthode purement cinétique permet de tenir compte de l'aspect instationnaire de la production de NO. Cette méthode est donc bien adaptée à une approche LES. De même, l'utilisation de la cinétique permet de tenir compte directement de l'évolution de NO hors équilibre (via le mécanisme du NO thermique) ;
- le nombre de réactions considérées dans le sous-mécanisme cinétique est réduit du fait d'une restriction aux seules réactions élémentaires faisant intervenir NO. De plus, seule l'espèce NO doit être transportée, les autres précurseurs étant interpolés ;
- cependant, il faut noter que le couplage "one-way" n'autorise pas la rétroaction de la formation de Y_{NO} sur l'état thermochimique complet des gaz. Le modèle suppose ainsi implicitement que NO est découplé des autres espèces mises en jeu. De ce fait, comme mentionné ci-dessus, il est important que le sous-mécanisme cinétique pour NO soit inclu au schéma réactionnel détaillé utilisé pour la construction des tables.

D'un point de vue pratique, une seule équation de conservation supplémentaire doit être résolue, pour Y_{NO} (voir relation (4.19)).

4.6.3 Influence de la turbulence

En régime turbulent, l'équation de conservation de $\widetilde{Y_{NO}}$ s'écrit :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{Y}_{NO}}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\widetilde{Y}_{NO} + \rho D_{NO}\nabla\widetilde{Y}_{NO}\right) = -\boldsymbol{\tau}^t_{NO} + \overline{\rho}\widetilde{\dot{\omega}_{NO}}^{cin}, \tag{4.64}$$

où le flux de diffusion turbulente $\boldsymbol{\tau}^t_{NO}$ est évalué suivant une hypothèse de type gradient.

Dans la relation (4.64), le taux de réaction filtré $\widetilde{\dot{\omega}_{NO}}$ est évalué directement par la loi d'action de masse. Aucun modèle n'est appliqué à ce terme. Toutefois, étant donné qu'il est calculé à partir des données tabulées, il dépend directement des fractions massiques filtrées des précurseurs de NO. De même, il dépend directement de la température filtrée. On peut donc écrire :

$$\widetilde{\dot{\omega}_{NO}}^{cin} = \dot{\omega}^{cin}_{NO}\left(\widetilde{T}, \widetilde{Y_{NO}}, \widetilde{\boldsymbol{Y_p}}^{tab}\right), \tag{4.65}$$

où $\widetilde{Y_{NO}}$ est la fraction massique de NO locale dans l'écoulement turbulent. $\widetilde{\boldsymbol{Y_p}}^{tab}$ représente les fractions massiques filtrées de l'ensemble des précurseurs de NO considérés, directement issues des tables FPI turbulentes.

Cette approche, consistant à évaluer directement le taux de production de NO filtré par la loi d'action de masse, suppose que le mélange turbulent est infiniment rapide devant l'évolution chimique de NO. Ceci revient à poser que la formation/disparition de NO intervient dans chaque cellule après que le mélange turbulent à l'échelle de sous-maille ait eu lieu. Chaque maille peut donc être considérée comme un réacteur homogène parfaitement mélangé.

Lorsque l'on s'intéresse à l'espèce NO, on peut considérer que l'hypothèse de mélange infiniment rapide est vérifiée dans les gaz brûlés. On sait en effet que la dynamique chimique de NO est très lente dans cette zone et qu'elle intervient généralement avec des temps caractéristiques supérieurs aux temps de la turbulence. Au niveau du front de flamme, l'hypothèse n'est généralement pas vérifiée.

Suivant cette approche, lorsque le front de flamme est sous-résolu (ce qui est le cas la plupart du temps), le modèle ne permet pas de prédire correctement la formation de NO dans la flamme. Les précurseurs qui interviennent dans certains mécanismes rapides (prompt-NO) étant formés et consommés au sein d'une zone très mince, l'approche pseudo-laminaire ne permet pas de tenir compte des fluctuations de ces espèces dans la flamme sur la formation de NO (on ne considère que leurs moyennes).

4.6.4 Un exemple : le mécanisme de Zel'dovich à trois équations

Pour illustrer le fonctionnement de la méthode, on propose ici un exemple où la formation de NO est modélisée via les trois réactions du mécanisme de Zel'dovich d'origine [141]. Les trois réactions élémentaires que comporte ce sous-mécanisme ont été données au début de ce chapitre (voir relations (4.6) à (4.8)), et les paramètres des lois d'Arrhenius de ces réactions sont précisées dans le tableau 4.1.

Suivant l'approche proposée, les taux de réaction associés aux équations 1, 2 et 3 du mécanisme sont donnés par :

$$\dot{\omega}_I = k_{f1}(T)\,[O]^{tab}\,[N_2]^{tab} - k_{b1}(T)\,[NO]\,[N]^{tab}, \tag{4.66}$$

$$\dot{\omega}_{II} = k_{f2}(T)\,[N]^{tab}\,[O_2]^{tab} - k_{b2}(T)\,[NO]\,[O]^{tab}, \tag{4.67}$$

$$\dot{\omega}_{III} = k_{f3}(T)\,[N]^{tab}\,[OH]^{tab} - k_{b3}(T)\,[NO]\,[H]^{tab}. \tag{4.68}$$

Les fractions massiques des espèces O, N, H, OH, O_2 et N_2 sont directement interpolées dans les tables FPI. En revanche, Y_{NO} est obtenu par résolution d'une équation de transport dans le code de CFD.

Compte tenu des relations précédentes, le taux de formation de NO est donné par :

$$\dot{\omega}_{NO}\left(T, Y_{NO}, \boldsymbol{Y_p}^{tab}\right) = \dot{\omega}_I + \dot{\omega}_{II} + \dot{\omega}_{III}. \tag{4.69}$$

Ainsi, le taux de production de NO peut être facilement et rapidement calculé à partir de deux grandeurs issues du champ résolu par le code, à savoir la température et Y_{NO}, et de six autres grandeurs obtenues par interpolation dans les tables.

En régime turbulent, on trouve :

$$\dot{\omega}_{NO}\left(\widetilde{T}, \widetilde{Y_{NO}}, \widetilde{\boldsymbol{Y_p}}^{tab}\right) = \widetilde{\dot{\omega}_I} + \widetilde{\dot{\omega}_{II}} + \widetilde{\dot{\omega}_{III}}, \tag{4.70}$$

avec :

$$\widetilde{\dot{\omega}_I} = k_{f1}\left(\widetilde{T}\right)\overline{[O]}^{tab}\overline{[N_2]}^{tab} - k_{b1}\left(\widetilde{T}\right)\overline{[NO][N]}^{tab}, \tag{4.71}$$

$$\widetilde{\dot{\omega}_{II}} = k_{f2}\left(\widetilde{T}\right)\overline{[N]}^{tab}\overline{[O_2]}^{tab} - k_{b2}\left(\widetilde{T}\right)\overline{[NO][O]}^{tab}, \tag{4.72}$$

$$\widetilde{\dot{\omega}_{III}} = k_{f3}\left(\widetilde{T}\right)\overline{[N]}^{tab}\overline{[OH]}^{tab} - k_{b3}\left(\widetilde{T}\right)\overline{[NO][H]}^{tab}. \tag{4.73}$$

4.7 Conclusion : avantages et limitations des modèles proposés

Les deux modèles proposés pour la prise en compte de la formation de NO à l'aide de tables FPI sont comparés ci-dessous. Les avantages et inconvénients des deux approches sont ainsi mis en évidence.

- Avec le premier modèle, la formation de NO est prise en compte via la création d'une table spécifique, contenant les données chimiques relatives à NO, indexées par une nouvelle variable d'avancement. Dans ce cas, la combustion turbulente est prise en compte par l'introduction d'une PDF présumée pour cette nouvelle variable d'avancement, prenant la forme d'une gaussienne.

  Avantages : l'utilisation de tables dans lesquelles les données concernant NO sont tabulées permet une évaluation rapide des termes sources de cette espèce[2]. De plus, étant donné que les espèces majoritaires sont déja évaluées à partir de tables, l'implémentation du modèle dans CEDRE et sa mise en œuvre sont facilitées.

  Inconvénients : la définition de la PDF de η reste imprécise et peut donc être améliorée. En effet, le fait que les PDF de c et de η soient ici définies de façon différentes peut entraîner un découplage des champs de c et de Y_{NO} (ce qui peut être problématique au sein du front de flamme). La difficulté d'évaluation de la PDF de η est liée au fait que l'évolution de l'espèce NO n'est pas compatible avec l'hypothèse de flammelettes.

- Le second modèle est basé sur l'introduction d'un schéma réactionnel détaillé pour tenir compte de la formation de NO. Les concentrations des espèces majoritaires et minoritaires intervenant dans ce schéma (hormis NO) sont alors interpolées dans les tables FPI.

  Avantages : le fait que NO soit produit hors équilibre dans les gaz chauds est pris en compte via son taux de production chimique, modélisé par une approche purement cinétique. De même, l'influence du caractère instationnaire de l'écoulement sur la production de NO est directement prise en compte par le modèle.

  Inconvénients : les concentrations des précurseurs de NO étant estimées au sein des tables FPI, ces grandeurs sont supposées être à l'équilibre dans les gaz chauds, ce qui n'est pas représentatif de la réalité. D'autre part, l'approche pseudo-laminaire utilisée pour fermer

[2] d'une part parce qu'il n'est nécessaire de transporter que l'espèce NO et d'autre part parce que les interpolations linéaires réalisées dans les tables sont plus rapides qu'un calcul des termes sources via un schéma réactionnel détaillé.

les sources chimiques filtrées ne permet pas de modéliser les effets de la sous-résolution du front de flamme sur la production globale de NO (les mécanismes rapides intervenant dans le front de flamme sont négligés).

De manière générale, il faut garder à l'esprit que les modèles développés ici ne prennent pas en compte certains phénomènes, tel que les pertes thermiques, nécessaires à une modélisation appropriée de la formation de NO (voir en introduction). De plus, il est clair que la prédiction de la formation de NO ainsi que de ses précurseurs est directement conditionnée par le mécanisme réactionnel choisi. Par exemple, le mécanisme GRI-Mech 3.0 utilisé au cours de ces travaux ne permet pas de prédire des niveaux corrects de NO en régimes pauvre ou sur stœchiométrique. Cette problématique est discutée en annexe H et une solution est proposée.

En résumé, plusieurs axes principaux d'amélioration peuvent être dégagés. Ils concernent :

- la prise en compte des pertes thermiques,
- la définition d'une PDF appropriée pour NO,
- l'amélioration des mécanismes réactionnels détaillés utilisés.

Les deux modèles proposés ici sont testés sur la configuration PRECCINSTA dans le chapitre 6. Cependant, aucune donnée expérimentale concernant NO n'étant disponible sur ce cas test, les résultats de calculs ne pourront qu'être comparés entre eux.

Chapitre 5

Validation : flamme turbulente prémélangée pauvre de Nandula

Sommaire

5.1 Introduction . . . 138
5.2 Description du banc expérimental . . . 138
5.3 Présentation des simulations RANS . . . 140
5.3.1 Domaine de calcul et conditions limites . . . 140
5.3.2 Méthodes numériques . . . 140
5.3.3 Modèles et cas de calcul . . . 141
5.4 Résultats des simulations RANS . . . 141
5.4.1 Comparaison des modèles de variance algébriques . . . 142
5.4.2 Résultats de calculs avec variance transportée . . . 145
5.4.3 Conclusion . . . 146
5.5 Présentation des simulations LES . . . 147
5.5.1 Domaine de calcul et conditions limites . . . 147
5.5.2 Méthodes numériques . . . 148
5.5.3 Modèles et cas de calcul . . . 149
5.6 Résultats des simulations LES . . . 150
5.6.1 Structure instantanée de la flamme . . . 150
5.6.2 Comparaison des profils des grandeurs thermochimiques moyennes . . . 150
5.6.3 Aérodynamique de la chambre . . . 151
5.6.4 Conclusions . . . 153
5.7 Analyse qualitative des résultats et interprétations . . . 154
5.7.1 Espèces majoritaires et température . . . 154
5.7.2 Concentrations de CO . . . 155
5.7.3 Régime de combustion . . . 156
5.8 Conclusions . . . 157

5.1 Introduction

Le modèle à PDF présumées introduit précédemment doit être validé sur une flamme turbulente de prémélange académique. Les campagnes de mesures réalisées sur ce type d'expérience ne portent généralement que sur la caractérisation des champs de vitesses. Parmi ces flammes, on peut citer l'expérience de Volvo [200], le banc ORACLES [153], des brûleurs swirlés [112], ou bien des configurations de marches descendantes [143]. Toutefois, l'approche FPI ayant pour but de modéliser les processus chimiques via la réduction de schémas cinétiques détaillés, une validation approfondie de ce modèle requière la connaissance de profils expérimentaux des concentrations de différentes espèces. Ainsi, les expériences citées précédemment ne se prêtent pas à une validation approfondie de FPI.

Au cours de ce travail, nous avons retenu la configuration expérimentale étudiée par Nandula *et al.* [149], [150], qui consiste en une flamme de prémélange pauvre méthane/air, stabilisée par un accroche flamme de forme conique. Une base de données expérimentales détaillée est disponible, constituée notamment de mesures sur les fractions massiques de O_2, CH_4, H_2O, CO_2, CO, NO et OH. Ce cas a par le passé été étudié numériquement à l'aide de différentes approches (voir Cannon *et al.* [41], Vicente *et al.* [220] ou Fueyo *et al.* [78]).

Des simulations RANS et LES ont été menées sur cette configuration à l'aide du modèle FPI adapté au code CEDRE. L'approche RANS autorise la réalisation d'études paramètriques 2D des modèles pour un coût d'exploitation réduit. Ainsi, les différents modèles de dissipation de c ainsi que les approches à variance transportée et algébrique ont pu être comparés. Par la suite, des simulations LES ont également été réalisées dans des conditions similaires afin d'évaluer le comportement du modèle dans un contexte instationnaire.

Pour débuter ce chapitre, une brève présentation du banc expérimental étudié par Nandula *et al.* [150] est proposée. Les simulations RANS sont ensuite introduites et les résultats obtenus sont comparés aux données expérimentales. Les modèles de dissipation/variance les mieux adaptés aux calculs LES sont alors retenus. Les résultats obtenus sur ces derniers sont ensuite présentés et comparés à l'expérience et aux données RANS. Pour conclure, un bref résumé des résultats marquants tirés de ces simulations est proposé.

5.2 Description du banc expérimental

La figure 5.1 présente schématiquement le banc expérimental étudié par Nandula *et al.* [150]. Le méthane et l'air sont mélangés loin en amont de l'entrée de la chambre (environ 3 m). Ce mélange est injecté radialement à la base du montage. Il traverse ensuite différents dispositifs (nids d'abeille, grilles) ayant pour but d'uniformiser le mélange et la turbulence.

Un accroche flamme conique en acier inoxydable est monté coaxialement dans la chambre. Son diamètre à la base est de 44,45 mm et il possède un angle au sommet de 45°. La chambre de combustion possède une section carrée de 79 mm x 79 mm avec les coins arrondis, et possède une longueur totale de 284 mm (voir figure 5.3). Les parois de la chambre sont essentiellement constituées de fenêtres en quartz autorisant la réalisation de diagnostics optiques. La figure 5.2 présente une photo de la configuration de Nandula en cours de fonctionnement.

Les conditions de l'écoulement en entrée de chambre sont résumées sur le schéma 5.3. Les gaz sont injectés sous les conditions atmosphériques (p=1 atm et T=286 K), avec une vitesse axiale moyenne $U_0 = 15$ m.s^{-1}. Le taux de turbulence mesuré dans l'écoulement, juste en entrée de chambre, est de l'ordre de 24%. La richesse moyenne du mélange est de 0,59 ; ce qui conduit, par un calcul d'équilibre, à une température adiabatique de flamme de 1650 K.

Sur la figure 5.3 sont également localisées les différentes stations de mesure utilisées par la suite pour les comparaisons avec le calcul.

La base de données expérimentales contient des relevés sur les fractions massiques de O_2, CH_4,

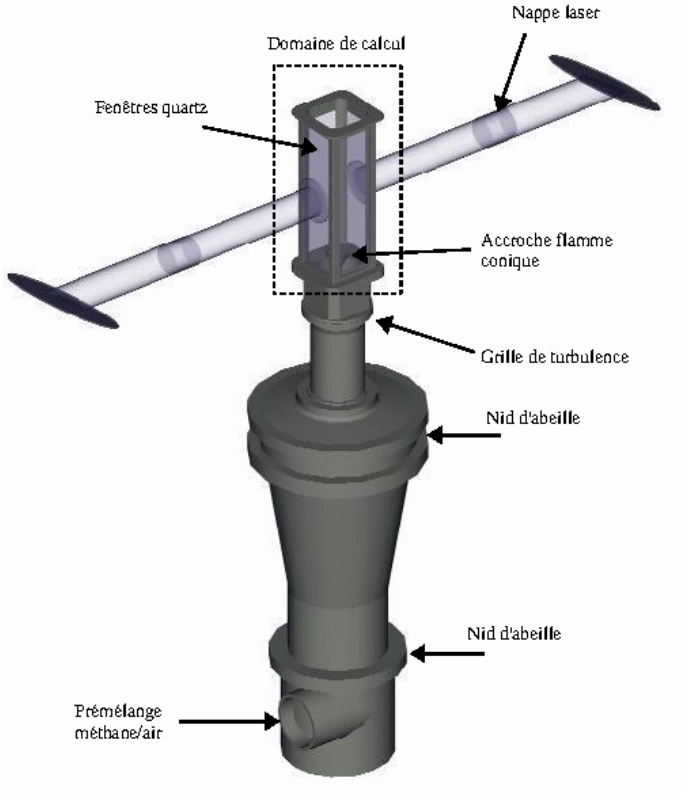

FIG. 5.1 – *Schéma simplifié du dispositif expérimental utilisé par Nandula et al. [150] (www.vuse.vanderbilt.edu/combust/images.htm).*

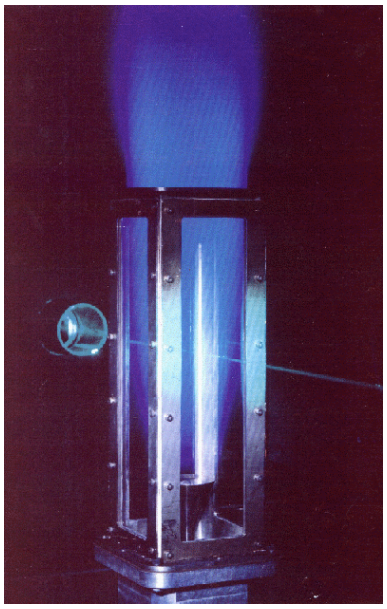

FIG. 5.2 – *Photo prise lors du fonctionnement du banc d'essai (www.vuse.vanderbilt.edu/combust/images.htm).*

H_2O, CO_2, CO, NO et OH. Les incertitudes sur les mesures des grandeurs thermochimiques sont résumées dans le tableau 5.1.

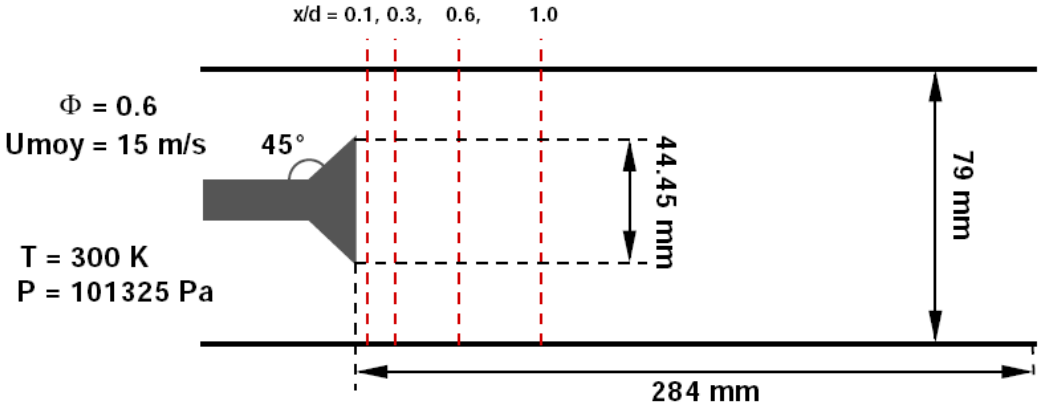

FIG. 5.3 – *Représentation en coupe simplifiée du brûleur de Nandula : domaine de calcul et conditions limites.*

Quantité	Incertitudes
Y_{CH_4}	$\pm 3,3\%$
Y_{O_2}	$\pm 7,5\%$
Y_{CO_2}	$\pm 5,1\%$
Y_{CO}	$\pm 18\%$
Température	$\pm 1\%$

TAB. 5.1 – *Incertitudes de mesures sur la chambre Nandula [152].*

5.3 Présentation des simulations RANS

5.3.1 Domaine de calcul et conditions limites

Pour les simulations RANS, le domaine de calcul est supposé 2D axisymétrique, et possède une longueur identique à la chambre réelle. En entrée, on injecte un prémélange méthane/air à richesse 0,59 à une température de 300 K. La vitesse de l'écoulement est uniforme (profil plat) et égale à 15 m.s^{-1}. En sortie, la pression est imposée à p=101 325 Pa.

La limite supérieure du domaine est constituée par une paroi glissante adiabatique, alors que l'accroche flamme est modélisé par une paroi non glissante, également adiabatique. La limite inférieure du domaine est modélisée par une condition de symétrie.

Un maillage unique a été utilisé pour toutes les simulations RANS. Il comporte environ 3 800 cellules (soit environ 7 700 faces) et est entièrement structuré. La figure 5.4 présente un apperçu de ce maillage.

5.3.2 Méthodes numériques

Tous les calculs ont été executés avec un schéma explicite de Runge-Kutta à deux étapes (précis à l'ordre 2). La limite de stabilité du schéma nous impose de choisir un pas de temps tel que $CFL \leq 0,5$. Cette contrainte nous impose de prendre un pas de temps maximal de l'ordre de $\Delta t = 8.10^{-7}$ s.

Cette valeur est très faible pour une simulation RANS. Une augmentation significative de Δt pourrait être obtenue par implicitation des termes sources chimiques. Ce point, déja discuté dans le chapitre 2, sort du cadre de l'étude proposée dans ce mémoire.

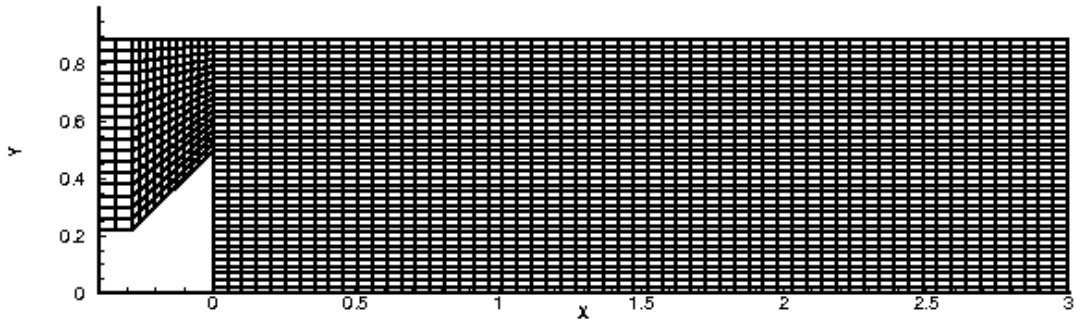

FIG. 5.4 – *Aperçu du maillage utilisé pour les calculs RANS.*

5.3.3 Modèles et cas de calcul

On utilise un modèle $k-l$ à deux équations développé à l'ONERA [64]. Celui-ci est couplé à une loi de parois de type Couette turbulent.

L'approche RANS a été utilisée pour valider et comparer les différents modèles de dissipation scalaire (modèles de Vervisch et ITNFS) et de variance (transportée ou algébrique). Ceci a permis de sélectionner le modèle de dissipation le plus pertinent, mais également de déterminer les valeurs optimales des constantes dans chaque approche. Le tableau 5.2 résume les différents calculs effectués dans ce cadre.

	variance	diss. scal.	const. modèle	autre
cas R1	algébrique	Verv.	0,065	
cas R1bis	algébrique	Verv.	0,065	$\widetilde{c''\dot{\omega}_i}$ algébrique, $C = 0{,}3$
cas R1ter	algébrique	Verv.	0,065	$\widetilde{\dot{\omega}_i}$ non corrigés
cas R2	algébrique	Verv.	0,15	
cas R3	algébrique	Verv.	0,4	
cas R4	algébrique	ITNFS	0,005	
cas R5	algébrique	ITNFS	0,01	
cas R6	algébrique	ITNFS	0,015	
cas R7	transport	Verv.	20	
cas R8	transport	Verv.	40	
cas R9	transport	Verv.	60	
cas R10	transport	ITNFS	100	
cas R11	transport	ITNFS	150	

TAB. 5.2 – *Récapitulatif des différents cas de calculs RANS.*

Notons que les tables employées par la suite ne contiennent qu'une seule richesse $(0,59)$, et que la discrétisation suivant la variable d'avancement c comprend 250 points et 25 points suivant la variance $\widetilde{c''^2}$.

5.4 Résultats des simulations RANS

Dans cette section, seuls les profils de fractions massiques de CO_2 et de CO sont présentés. Des profils supplémentaires concernant l'évolution de la température et de la fraction massique de O_2 sont disponibles dans l'annexe I pour chaque cas étudié. L'évolution de ces deux grandeurs est en effet comparable à l'évolution de Y_{CO_2}.

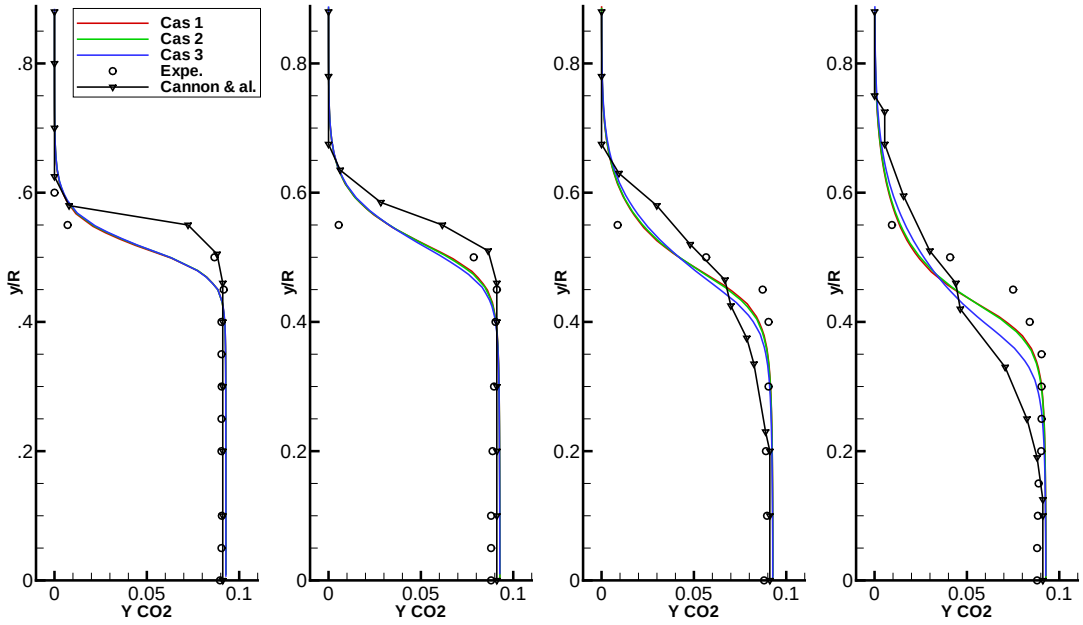

FIG. 5.5 – *Profils de fraction massique de CO_2 : calculs RANS avec variance algébrique et dissipation scalaire modélisée via l'approche de Vervisch.*

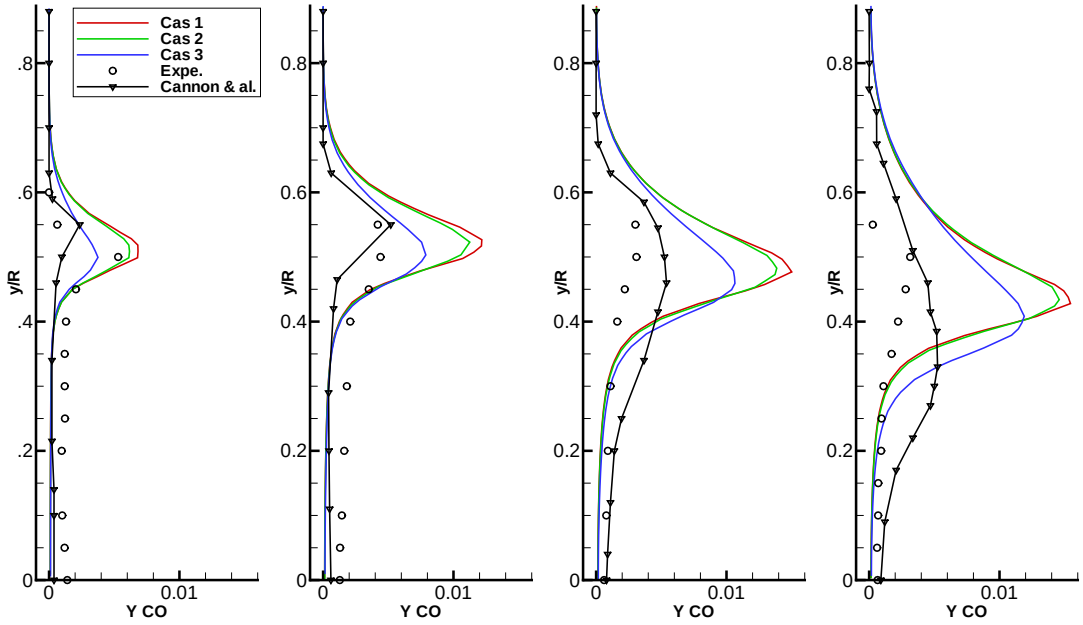

FIG. 5.6 – *Profils de fraction massique de CO : calculs RANS avec variance algébrique et dissipation scalaire modélisée via l'approche de Vervisch.*

5.4.1 Comparaison des modèles de variance algébriques

Dissipation scalaire de Vervisch :

Les figures 5.5 et 5.6 présentent respectivement les profils de fractions massiques de CO_2 et de CO à travers la chambre, pour les cas R1, R2 et R3. La dissipation scalaire de c a été évaluée suivant le modèle de Vervisch proposé dans [220], avec différentes valeurs de la constante.

Lorsque l'on considère les profils de Y_{CO_2} et des autres grandeurs regroupées en annexe, les cas

R1 et R2 (correspondant à des constantes de 0,065 et 0,1) présentent des résultats comparables, très proches de ceux obtenus expérimentalement (en particulier à proximité de l'accroche flamme).

Le cas R3 -correspondant à une constante de 0,4- ne permet pas de reproduire correctement la forme et la position de la flamme telle qu'elle est donnée par l'expérience. Les profils obtenus pour ce calcul présentent une pente plus faible, en particulier en $x/d = 1$, ce qui traduit la surestimation de l'épaisseur moyenne de la flamme turbulente.

En effet, lorsque la constante du modèle, et par conséquent la variance de la variable c, est augmentée, les fluctuations du front de flamme s'intensifient, ce qui a tendance à accroître l'épaisseur moyenne de la flamme turbulente. Les mauvais résultats obtenus sur le cas R3 sont donc liés à une mauvaise estimation de la constante du modèle.

Les différences entre les cas étudiés sont beaucoup plus marquées sur les profils de CO présentés figure 5.6. La surestimation de l'épaisseur de la flamme dans le cas R3 est particulièrement mise en évidence ici. On note en outre que le pic de CO atteint est moins important dans ce dernier cas que pour les autres calculs. Toutefois, mis à part en $x/d = 0,1$, les niveaux maximum simulés sont toujours largement supérieurs l'expérience (avec un facteur proche de 4).

Lorsque la variance de c prend des valeurs élevées, on se rapproche de la limite BML où le front de flamme est supposé être une discontinuité séparant les gaz frais des gaz brûlés. L'influence de la structure interne du front de flamme sur la composition moyenne de l'écoulement est donc réduite puisque seuls les états situés dans les gaz frais et les gaz brûlés sont mélangés. Par conséquent, le pic de CO simulé est amoindri lorsque la valeur de $\widetilde{c''^2}$ augmente.

Sachant que la position de la flamme ne peut pas être correctement retrouvée par le cas R3, il ressort que la constante du modèle algébrique proposé par Vervisch doit être fixée de l'ordre de 0,1. Le cas R2 sera conservé par la suite comme cas de référence.

Dissipation scalaire ITNFS :

Les figures 5.7 et 5.8 correspondent aux simulations RANS avec variance algébrique et dissipation scalaire modélisée via le modèle ITNFS.

L'utilisation du modèle ITNFS n'a que peu d'influence sur la qualité des résultats en comparaison au modèle de Vervisch. En particulier, les profils de Y_{CO_2} issus des cas R2 et R4 sont très similaires. Les profils de Y_{CO} obtenus avec le modèle ITNFS de dissipation montrent également de grandes similarités avec le cas R2. On notera toutefois en $x/d = 1$ un léger décalage du pic de CO obtenu dans le cas R6.

De très faibles écarts sont observés lorsque l'on fait varier la valeur de la constante du modèle. Celle-ci ne semble donc pas avoir une grande influence sur les résultats lorsque le modèle ITNFS est employé.

La figure 5.9 présente les profils de variance à travers la chambre. Celle-ci décroît plus rapidement avec l'approche ITNFS qu'avec celle de Vervisch. En effet, avec le modèle ITNFS, $\widetilde{c''^2}$ est proportionnelle à $|\nabla\widetilde{c}|^2$, qui évolue de façon plus raide que $\widetilde{c}(1-\widetilde{c})\,|\nabla\widetilde{c}|$, dont dépend la relation de Vervisch. A noter que, mis à part le décalage observé, les niveaux atteints dans les cas R2 et R6 restent comparables.

Autres calculs :

On compare ici les résultats correspondant aux calculs R1, R1bis et R1ter (voir tableau 5.2). Les paramètres du modèle de variance sont identiques dans les trois cas. Cependant, dans le cas R1bis, la corrélation $\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$ est modélisée suivant la loi algébrique proposée dans le chapitre 3. Dans le cas R1ter, les taux de réaction interpolés sont utilisés sans correction. On ne compare ici que les profils de température (figure 5.10).

Les cas R1 et R1bis ne présentent que très peu de différences. La figure 5.11 montre en effet que les profils de $\widetilde{c''^2}$ obtenus à l'aide des deux méthodes restent comparables. Ainsi, la relation proposée

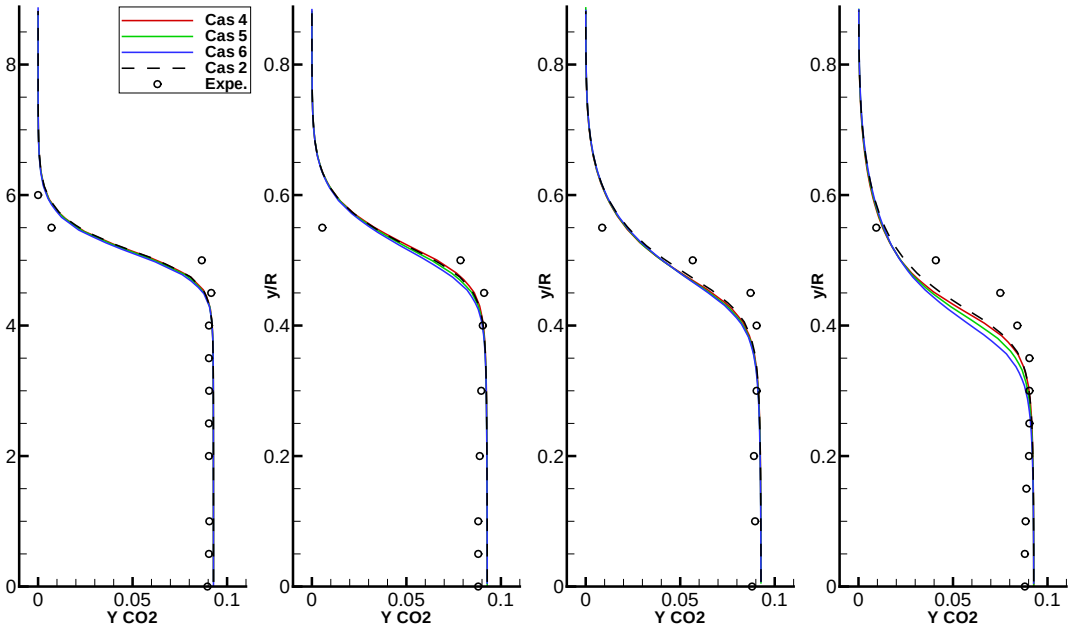

FIG. 5.7 – *Profils de fraction massique de CO_2 : calculs RANS avec variance algébrique et dissipation scalaire modélisée via l'approche ITNFS.*

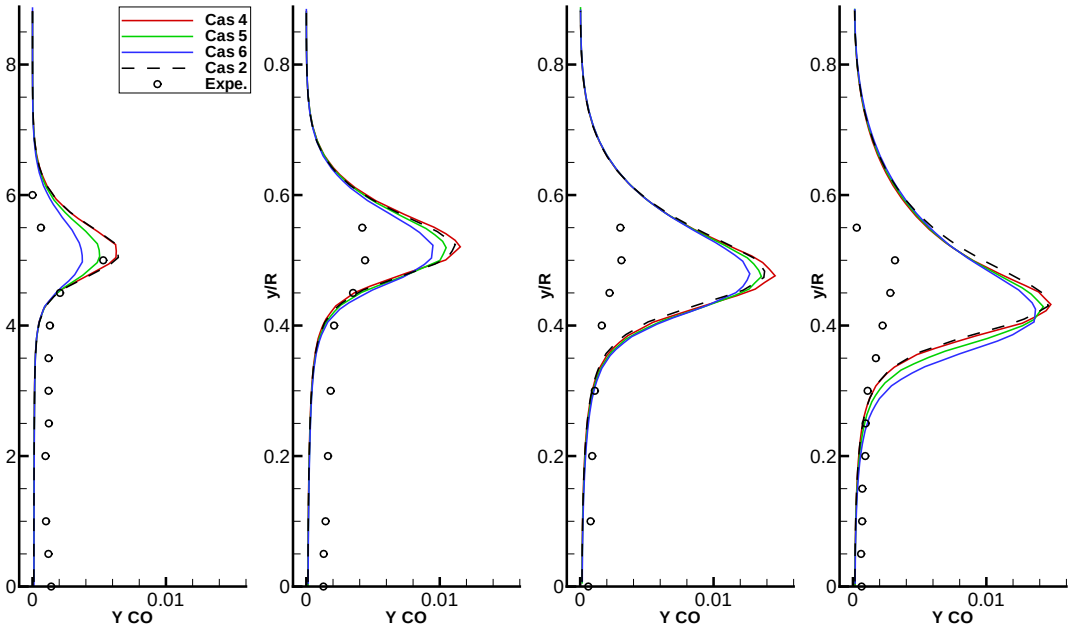

FIG. 5.8 – *Profils de fraction massique de CO : calculs RANS avec variance algébrique et dissipation scalaire modélisée via l'approche ITNFS.*

dans ce mémoire pour $\widetilde{c''\dot{\omega}_c}$, permet d'approcher correctement la variance de la variable d'avancement.

Le cas R1ter présente des niveaux de température très proches de l'expérience. Cependant, ceci n'est qu'une conséquence du fait que, sans correction, la flamme n'atteint pas l'équilibre. De fortes oscillations de la variance de c dans les gaz brûlés sont d'ailleurs relevées, cette grandeur pouvant même prendre des valeurs négatives. Ces résultats prouvent la nécessité de corriger les termes sources directement interpolées dans les tables FPI en régime turbulent.

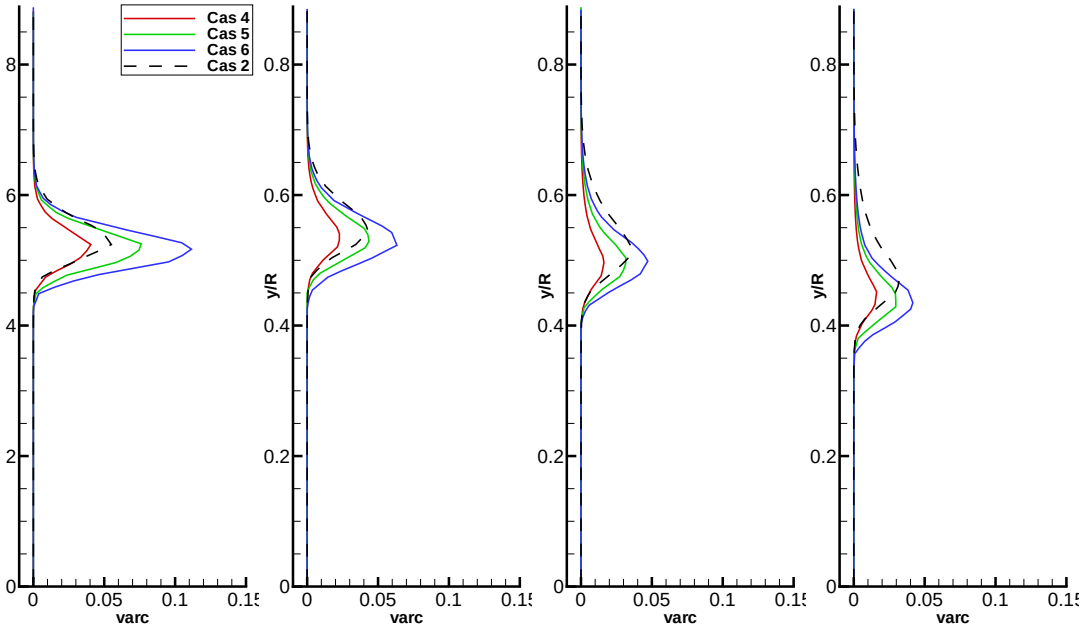

FIG. 5.9 – *Profils de variance de c : comparaison des modèles de dissipation scalaire ITNFS et de Vervisch.*

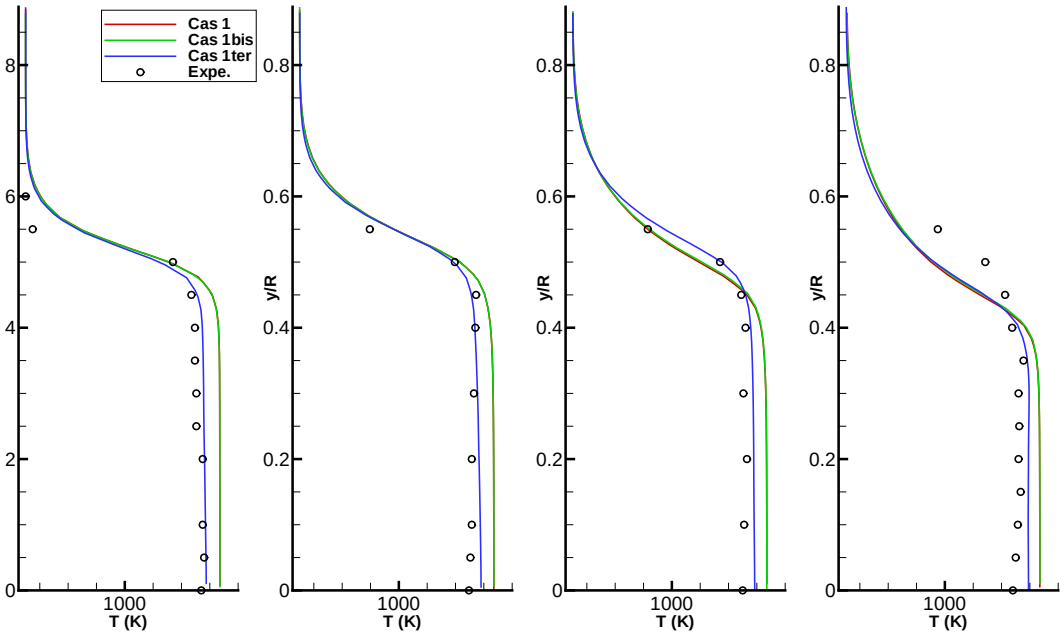

FIG. 5.10 – *Profils de température (K) : cas R1, R1bis et R1ter.*

5.4.2 Résultats de calculs avec variance transportée

Les figures 5.12 et 5.13 correspondent aux cas R7, R8 et R9. La variance de c est ici évaluée par résolution d'une équation de transport, et la dissipation scalaire de c est modélisée par l'approche de Vervisch, avec différentes valeurs de la constante.

Les profils de Y_{CO_2} présentent des tendances similaires à celles observées avec une variance algébrique. Ainsi, lorsque la constante du modèle est diminuée -ce qui a pour effet d'augmenter localement la valeur de $\widetilde{c''^2}$- la flamme est numériquement épaissie. Avec une constante proche de 100, on obtiendrait des résultats identiques au cas de référence R2.

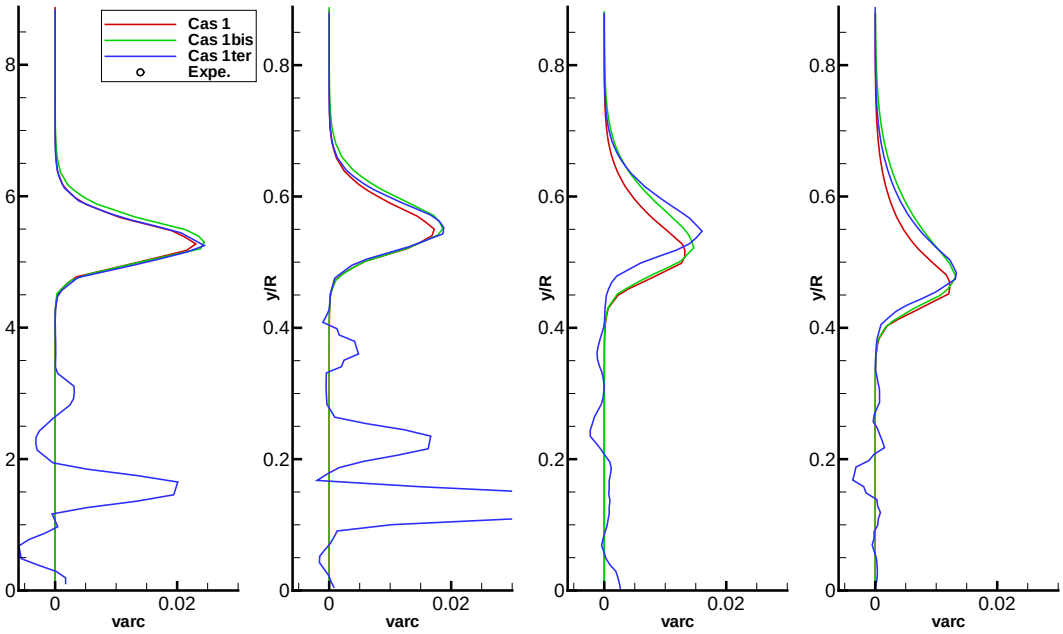

FIG. 5.11 – *Profils de variance de c : cas R1, R1bis et R1ter.*

Les profils de Y_{CO} suivent également des tendances similaires à celles observées dans la section précédente. La valeur maximale du pic atteinte dans le front de flamme diminue notamment avec la constante.

Des calculs correspondant aux cas R10 et R11 ont également été effectués en utilisant le modèle de variance transportée avec une dissipation scalaire ITNFS. Les profils de fraction massique de CO sont présentés figure 5.14. Ceux-ci restent très similaires aux résultats obtenus dans le cas R8. Un ajustement adéquat de la constante du modèle peut par ailleurs permettre de réduire les écarts observés.

5.4.3 Conclusion

Les calculs paramétriques réalisés en RANS ont permis de tester les modèles proposés pour la variance de c, et d'évaluer la sensibilité des résultats aux constantes. Quel que soit le modèle retenu, lorsque la variance de la variable d'avancement n'est pas correctement évaluée, la flamme simulée se retrouve excessivement épaissie comparé aux observations expérimentales.

Le niveau maximal du pic de Y_{CO} atteint dans le front de flamme est toujours surestimé d'un facteur proche de 4 par les calculs. Toutefois, une augmentation de la variance locale de c entraine une diminution de ce pic.

En résumé, il ressort de ces calculs que les constantes respectives des modèles de variance testés jouent toujours un rôle important, que ce soit sur la structure de la flamme simulée que sur les niveaux prédits des différentes espèces (en particulier de CO). L'approche RANS se révèle donc assez peu prédictive et donc mal adaptée à la caractérisation détaillée du comportement d'une telle flamme de prémélange.

Compte tenu de ces observations, le modèle de dissipation de Vervisch a été retenu pour les simulations LES présentées dans la section suivante. En effet, bien que les deux relations proposées conduisent à des résultats comparables, le modèle ITNFS a été développé à l'origine dans un contexte RANS, alors que celui de Vervisch est directement transposable en LES. En outre, étant donné que les résultats obtenus en résolvant une équation de transport pour $\widetilde{c''^2}$ ou à l'aide d'une relation algébrique sont identiques, les simulations LES de référence ont été menées en suivant la seconde méthode afin d'économiser la réolution d'une équation supplémentaire.

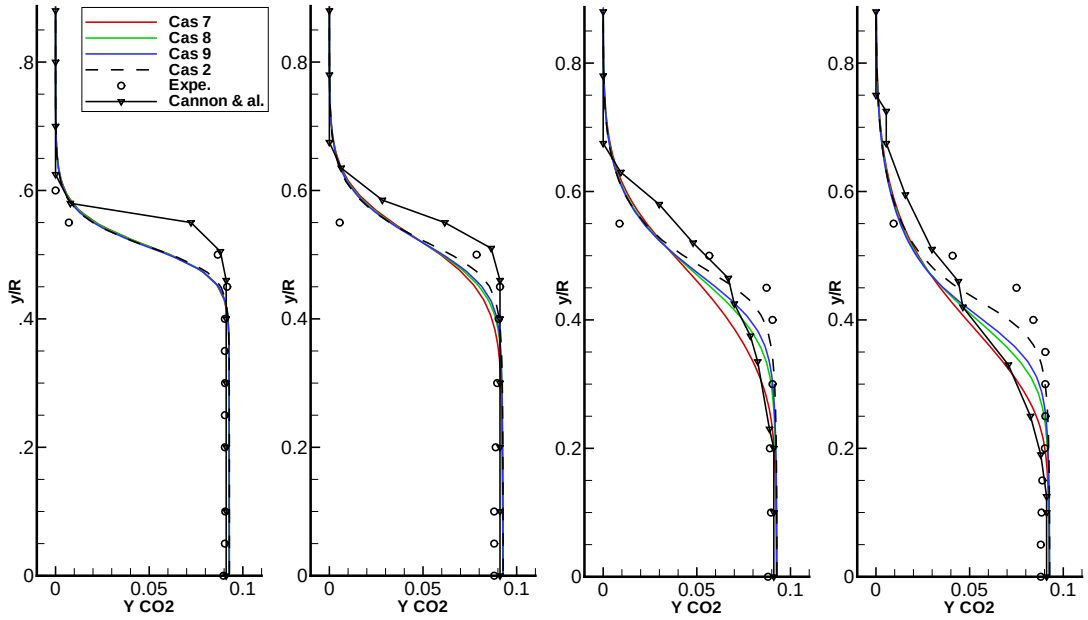

FIG. 5.12 – *Profils de fraction massique de CO_2 : calculs RANS avec variance transportée et dissipation scalaire modélisée via l'approche de Vervisch et al..*

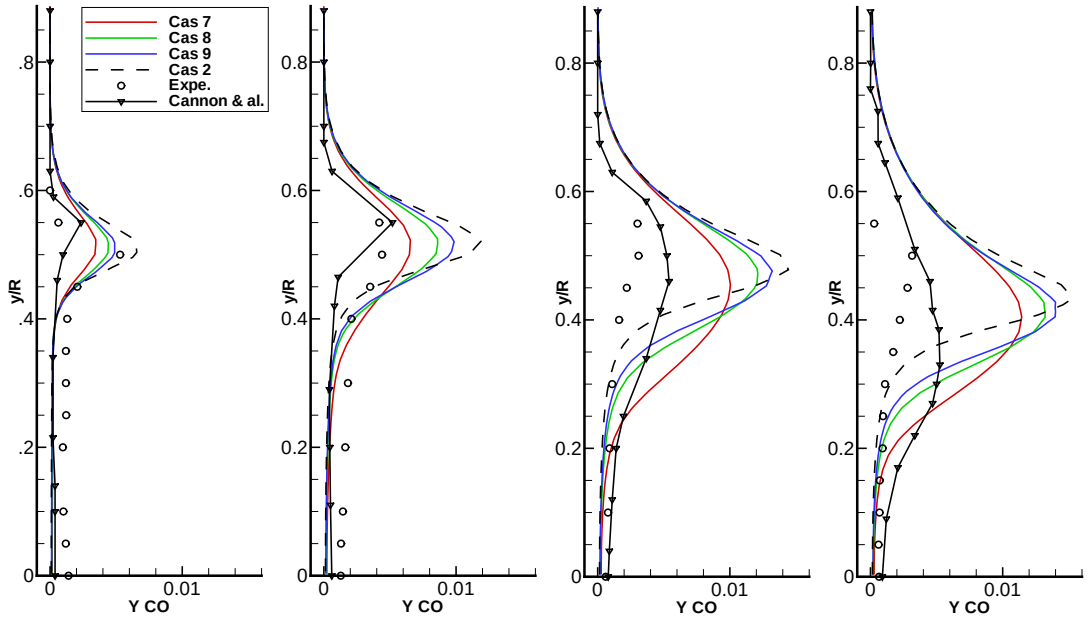

FIG. 5.13 – *Profils de fraction massique de CO : calculs RANS avec variance transportée et dissipation scalaire modélisée via l'approche Vervisch et al..*

5.5 Présentation des simulations LES

5.5.1 Domaine de calcul et conditions limites

Les simulations LES de la configuration de Nandula ont été effectuées sur deux maillages 3D complètement non structurés (mailles tetraèdriques). L'ensemble de la géométrie a été maillée, sur toute la longueur de la chambre.

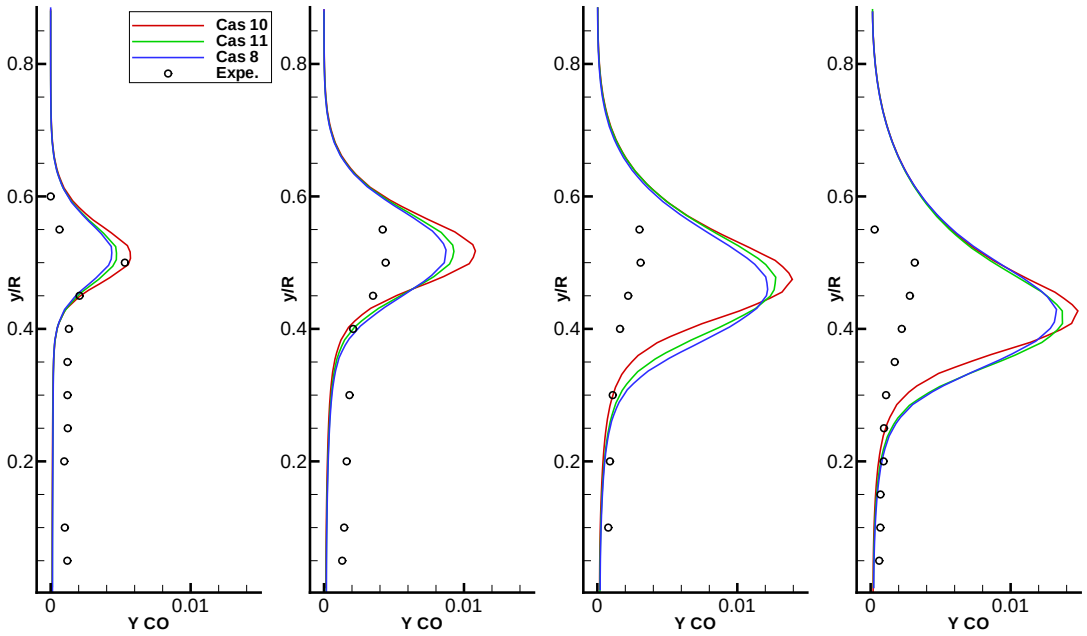

FIG. 5.14 – *Profils de fraction massique de CO : calculs RANS avec variance transportée et dissipation scalaire modélisée via l'approche ITNFS.*

Le premier maillage comporte environ 930 000 cellules raffinées autour et derrière l'accroche flamme. La plus petite possède un diamètre équivalent d'environ 0,5 mm. La figure 5.15 permet de visualiser ce maillage suivant différentes coupes en x et en z.

Le second maillage comporte approximativement 1,3 millions de cellules dont les plus petites mesurent environ 0,3 mm. Celui-ci permettra de vérifier l'influence du raffinement sur les résultats.

Le tableau 5.3 présente un récapitulatif des paramètres des deux maillages.

	Nb. mailles	Nb. faces	Diam. + petite maille
Maillage M1	928 200	1 877 500	0,5 mm
Maillage M2	1 340 000	2 703 000	0,3 mm

TAB. 5.3 – *Paramètres des maillages LES utilisés.*

Les parois latérales de la géométrie, ainsi que l'accroche flamme, sont supposés adiabatiques. Les parois sont modélisées par des conditions de glissement et l'accroche flamme par une condition non glissante. En entrée, la vitesse, la température et la composition des gaz frais sont fixées. Un profil de vitesse plat est imposé à $U_0 = 15$ m.s^{-1}, sans procédure particulière de bruitage, donc sans taux de turbulence initial. La sortie est modélisée par une condition limite caractéristique non réfléchissante ([211], [10]) où la pression à l'intérieur du domaine est relaxée vers la pression atmosphérique (voir annexe G).

5.5.2 Méthodes numériques

Les calculs LES ont été effectués à l'aide du schéma d'intégration temporelle de Runge-Kutta à deux étapes. Les pas de temps des simulations, limités par le critère CFL, sont fixés à $\Delta t = 1{,}5.10^{-7}$ s sur le premier maillage et $\Delta t = 9.10^{-8}$ s sur le second maillage.

Pour plus de détails sur les schémas de discrétisation spatiale, le lecteur peut se reporter au chapitre 2.

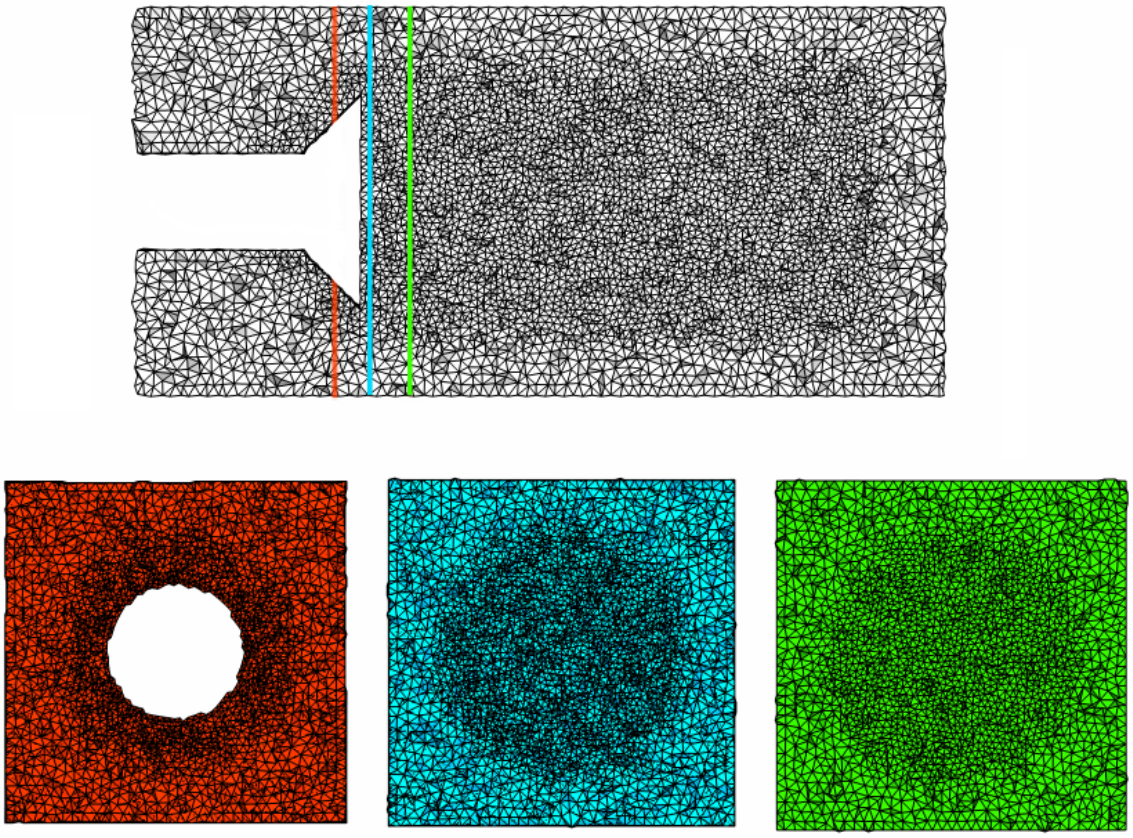

FIG. 5.15 – *Aperçu du maillage LES M1 (maillage grossier).*

5.5.3 Modèles et cas de calcul

Les simulations présentées ont été réalisées en utilisant le modèle de turbulence de Smagorinsky, où la constante a été fixée à 0,1.

La dissipation scalaire de c a été modélisée suivant la relation de Vervisch [220]. Deux possibilités se présentent pour l'évaluation de la variance SGS de la variable d'avancement. En fonction de la méthode retenue, on distingue ici différents cas :

- sur le maillage M1, les modèles de variance algébrique et transportée ont été testés. Des calculs préliminaires ont permis de déterminer les valeurs optimales des constantes à utiliser sur ce cas. Avec la variance algébrique, la constante du modèle a donc été prise égale à 0,5 ou 1. Dans le cas de la variance transportée, la constante du modèle de dissipation a été choisie égale à 0,5 ;
- sur le maillage M2, un cas de calcul unique a été étudié, correspondant au modèle de variance algébrique avec une constante égale à 1.

Ces quatre cas sont résumés dans le tableau 5.4. Le cas de référence considéré ci-après correspond au cas L1, avec variance algébrique.

A noter que les tables utilisées au cours de ces simulations sont les mêmes que celles construites dans le cadre RANS.

	variance	dissipation scalaire	constante	maillage	Δt
cas L1	algébrique	BML	1	M1	$1{,}5.10^{-7}$ s
cas L2	algébrique	BML	0,5	M1	$1{,}5.10^{-7}$ s
cas L3	transportée	BML	0,5	M1	$1{,}5.10^{-7}$ s
cas L4	algébrique	BML	1	M2	9.10^{-8} s

TAB. 5.4 – *Paramètres des calculs LES sur la configuration de Nandula.*

5.6 Résultats des simulations LES

5.6.1 Structure instantanée de la flamme

Les figures 5.16 et 5.17 présentent respectivement des champs instantanés de gradient de température, en coupe suivant l'axe x, et un iso-contour de température à $T = 1100$ K. Ces deux tracés permettent de se représenter la dynamique instationnaire de la flamme.

Près de l'obstacle conique, la flamme possède une structure parfaitement axisymétrique. Plus loin dans la chambre, la flamme perd rapidement cette caractéristique alors qu'elle est fortement perturbée par les grosses structures tourbillonnaires de l'écoulement. On note par ailleurs la formation de poches de gaz frais plus en aval.

Sur la figure 5.17, on observe que le mécanisme principal perturbant le front de flamme correspond à un lâcher tourbillonnaire de nature purement aérodynamique. On remarque là encore la structure fortement perturbée de la flamme turbulente.

5.6.2 Comparaison des profils des grandeurs thermochimiques moyennes

Tous les résultats présentés ici sont évalués en fonction des formulations introduites au chapitre 3, section 3.2.1. Les figures 5.18 à 5.20 présentent respectivement les profils de température, de fractions massiques de CO_2 et de CO à travers la chambre, obtenus à partir des différents calculs LES. Des résultats supplémentaires sont regroupés en annexe I.

Les profils de concentration de CO_2 et de température sont très proches et ne montrent pas de différences notables entre les calculs. En particulier, les cas L1 et L2 (variance algébrique) donnent des résultats similaires. Les résultats L4, obtenus sur le maillage raffiné, présentent un léger décalage en direction des gaz frais. Ceci résulte du fait que la dissipation numérique est moins importante dans ce cas.

Lorsque l'on compare ces données aux résultats expérimentaux, on observe un décalage important des profils LES. Comme cela sera montré par la suite, ce phénomène est du à une mauvaise prédiction de l'aérodynamique interne de la chambre lié à une insuffisance de la résolution spatiale du problème.

Les profils de Y_{CO} montrent des différences plus marquées. Le calcul L3, correspondant à la variance transportée, présente notamment des pics plus élevés, ce qui indique que la constante du modèle doit être réajustée. Les cas L2 et L4 conduisent à des niveaux très comparables, supérieurs à ceux obtenus dans le cas L1. Sachant que lorsque le maillage est raffiné, les fluctuations de la flamme sont mieux résolues, on peut supposer que la constante du modèle de variance doit être fixée de préférence à 0,5.

Les niveaux de CO prédits par la LES demeurent plus proches de l'expérience qu'en RANS, avec, de plus, une influence beaucoup moins marquée de la constante. En effet, en LES, les fluctuations de la flamme à grande échelle étant résolues, la variance de sous-maille de la variable d'avancement ne joue qu'un rôle secondaire, en particulier lorque le maillage est suffisamment fin. La LES s'avère donc plus prédictive que le RANS lorsque l'on s'intéresse à la production d'espèces telles que CO, ce qui constitue un avantage majeur.

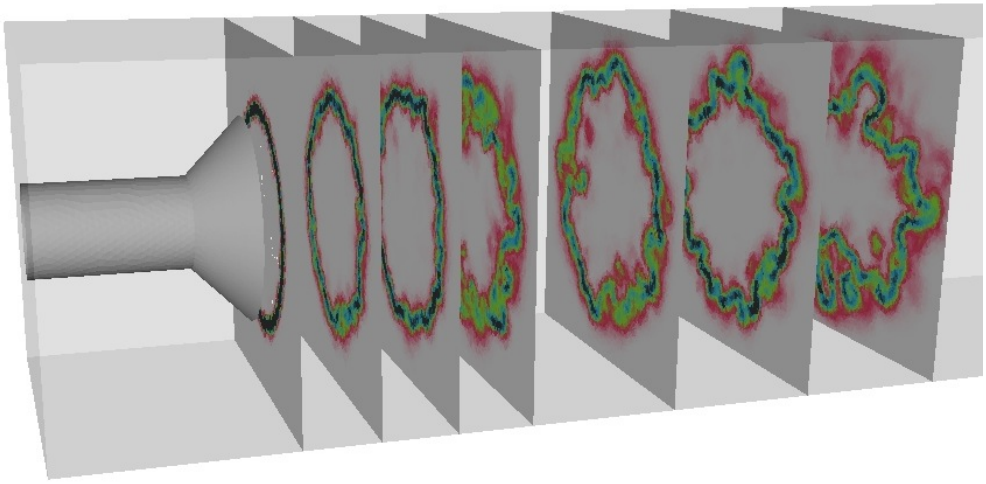

FIG. 5.16 – *Différentes coupes suivant l'axe x : champs instantanés de gradients de température.*

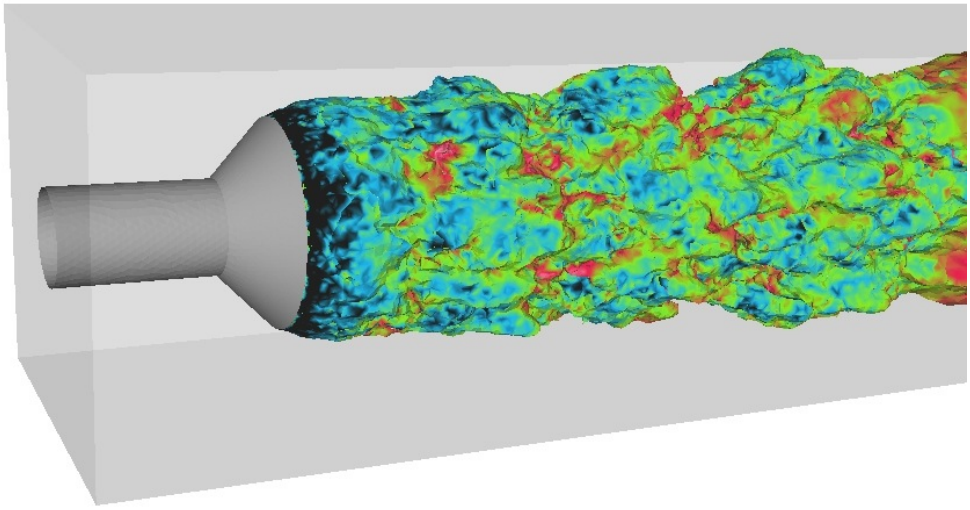

FIG. 5.17 – *Iso-surfaces de température T = 1100 K colorées en fonction du gradient de température.*

5.6.3 Aérodynamique de la chambre

Les résultats présentés précédemment ont révélé un décalage important des profils LES par rapport à l'expérience et aux calculs RANS. Ainsi, la LES ne permet pas de retrouver la position correcte du front de flamme dans l'écoulement. Cette position est en fait essentiellement pilotée par l'aérodynamique interne de la chambre, et particulièrement par la zone de recirculation se formant derrière l'accroche flamme.

La figure 5.21 présente les iso-contours de vitesse axiale dans le brûleur suivant une coupe en X, pour les cas R1 et L1 et pour l'expérience. Les vitesses sont ici adimensionnées par la vitesse moyenne en entrée, $U_0 = 15$ m.s^{-1}.

Les iso-lignes $U = 0$ m.s^{-1} marquent la limite de la recirculation. Alors que le calcul RANS prédit correctement la longueur de cette zone, la LES la surestime largement. D'un point de vue aérodynamique, la LES ne permet donc pas de retrouver la structure correcte de l'écoulement. Par ailleurs, les niveaux atteints en valeur absolue par les vitesses axiales dans le calcul RANS dépassent largement les niveaux relevés expérimentalement.

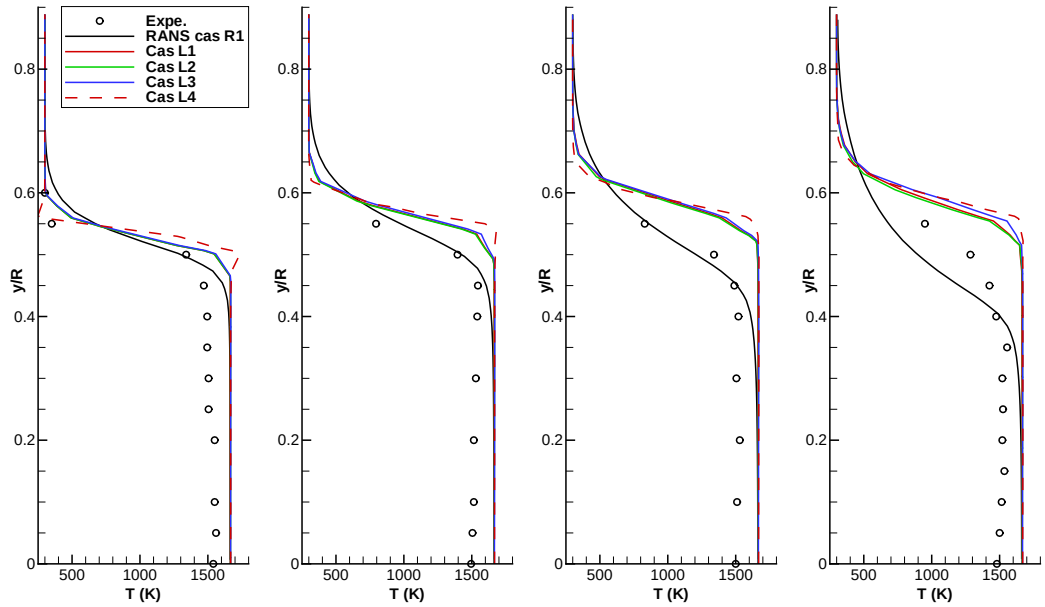

FIG. 5.18 – *Profils moyens de température (K) dans la chambre de combustion obtenus pour les calculs LES.*

Différentes hypothèses peuvent être formulées pour expliquer l'erreur observée sur les champs aérodynamiques en LES. Il est ainsi possible que la structure de l'écoulement soit influencée par le fait que les vitesses ne sont pas bruitées en entrée. Cependant, cette supposition est difficile à vérifier directement.

Dans le cas présent, il est plus probable que les erreurs observées soient imputables au maillage. Celui-ci ne semble en effet pas suffisamment raffiné à proximité de la paroi du cône et dans la couche de cisaillement. Il en résulte que le décollement de l'écoulement au nez de l'accroche flamme ne peut pas être capté correctement par le calcul. Il est à noter que le maillage raffiné possède les mêmes défauts que le maillage grossier.

Pour vérifier cette hypothèse, la figure 5.22 présente l'évolution de l'épaisseur de vorticité calculée dans le plan $(x; y)$, en fonction de x, pour le cas L1. Cette grandeur est définie comme suit :

$$\delta_\omega(x) = \frac{\max_y(\widetilde{u_x}) - \min_y(\widetilde{u_x})}{\max_y(\nabla_y \widetilde{u_x})}. \tag{5.1}$$

L'épaisseur de vorticité issue des données expérimentales (symboles) reste toujours supérieure à l'épaisseur calculée. Toutefois, ces données sont probablement surestimées sachant que les mesures de vitesses disponibles ne couvrent pas la totalité de la hauteur de la chambre.

L'épaisseur de vorticité au nez de l'accroche flamme est de l'ordre de 4 mm. En pratique, sur des cas très similaires, les épaisseurs de vorticité généralement observées, avec des maillages raffinés de façon adéquate, sont rarement supérieures à 1 mm. Le calcul surestime donc cette grandeur dans la couche de mélange, ce qui traduit le fait que le maillage est trop grossier.

On estime généralement que cinq cellules sont nécessaires dans l'épaisseur de vorticité pour résoudre correctement le décollement. En prenant une épaisseur de l'ordre de 1 mm, les mailles dans la couche de mélange doivent donc posséder un diamètre équivalent de l'ordre de 0,2 mm (à comparer aux plus petites cellules du maillage PM1, de l'ordre de 0,75 mm). Compte tenu des objectifs visés ici, la construction d'un maillage beaucoup plus lourd ne se justifie pas, et celui employé demeure suffisant.

Ces observations mettent en évidence à la fois l'importance du maillage en LES pour la résolution du champ aérodynamique, ainsi que les difficultés qu'il peut y avoir à simuler un tel cas où l'écoulement présente un décollement important.

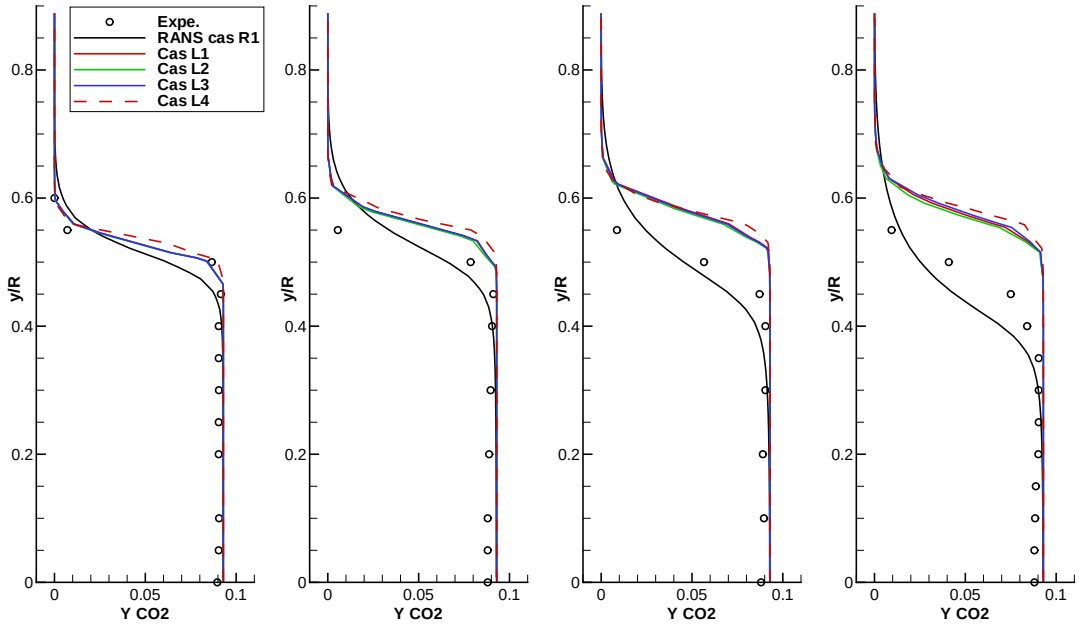

FIG. 5.19 – *Profils moyens de Y_{CO_2} dans la chambre de combustion obtenus pour les calculs LES.*

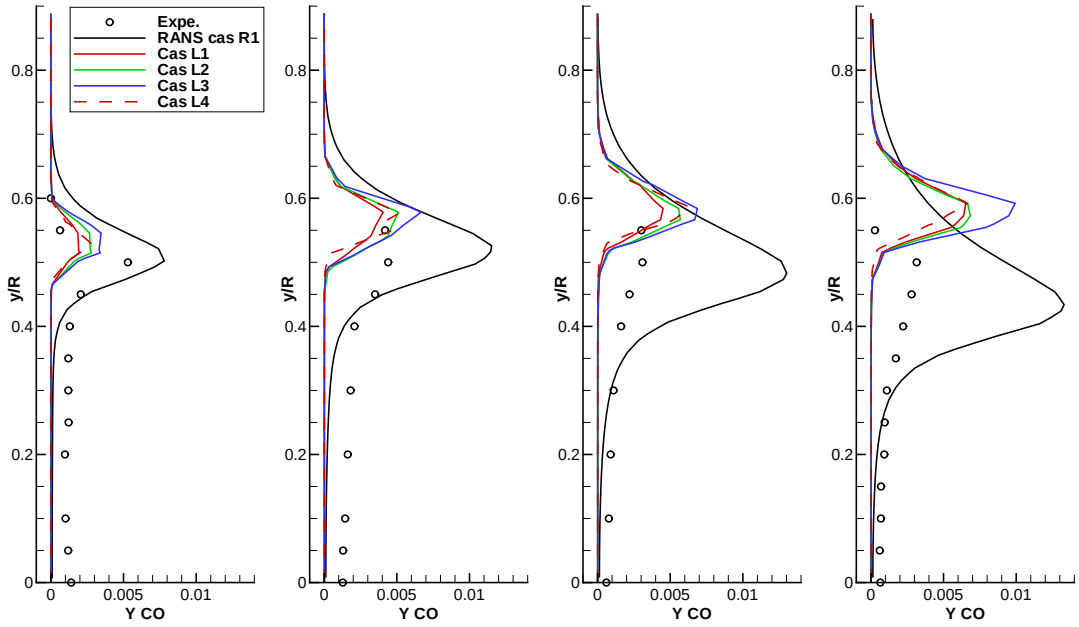

FIG. 5.20 – *Profils moyens de Y_{CO} dans la chambre de combustion obtenus pour les calculs LES.*

5.6.4 Conclusions

Les niveaux de *CO* prédits au sein de la flamme sont retrouvés de manière beaucoup plus précise en LES qu'en RANS. Ces niveaux sont par ailleurs mieux contrôlés en LES en faisant varier la constante du modèle de variance, sans modifier la structure du front de flamme turbulent (approche plus prédictive).

Les calculs présentés ont également mis en évidence la dépendance des résultats LES au maillage. Ainsi, nous avons montré qu'un raffinement insuffisant au niveau de l'accroche flamme ne permettait pas de capter correctement le décollement de l'écoulement au nez du cône. Par conséquent, on ne retrouve pas la position exacte de la flamme dans la chambre en LES.

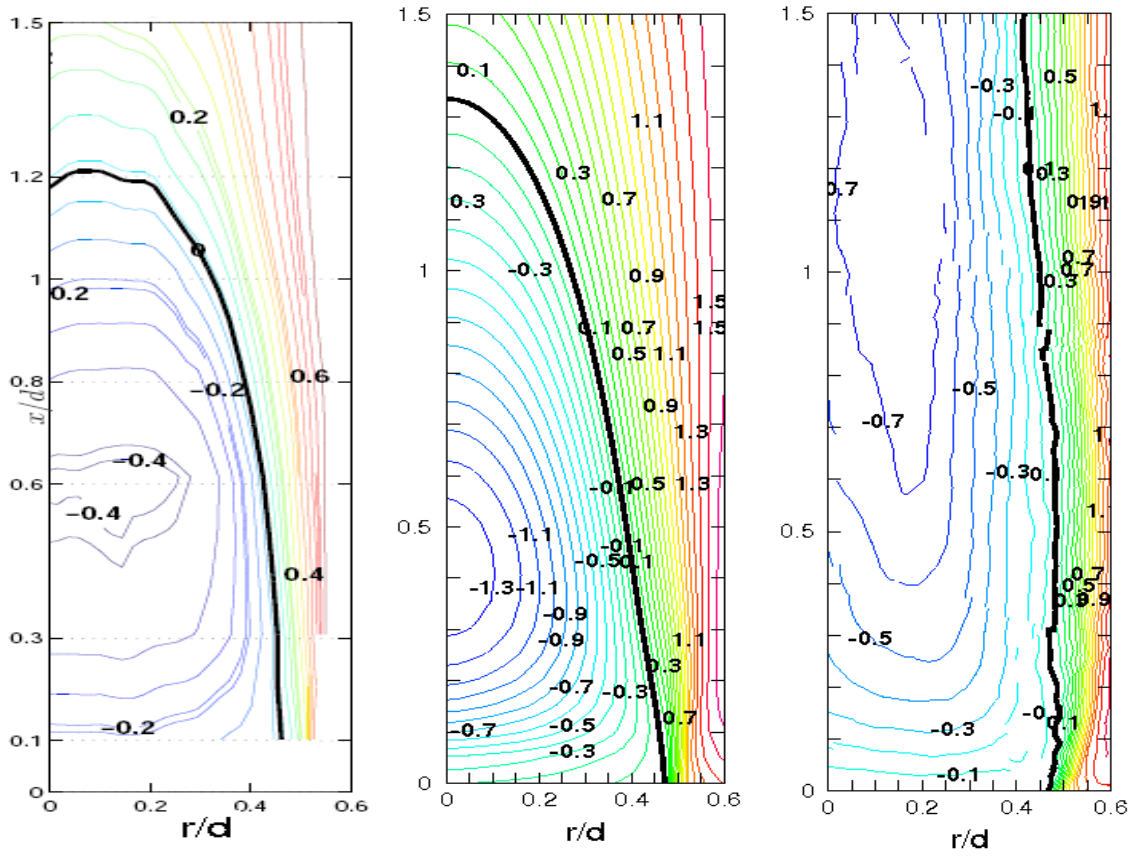

FIG. 5.21 – *Iso-contours de vitesse axiale moyenne adimensionnée par la vitesse $U_0 = 15\ m.s^{-1}$: à droite, expérience, au centre calcul RANS R1, à droite, calcul LES L1.*

Les tests LES des approches à variance transportée ou algébrique ont conduit à des conclusions similaires aux cas RANS. Ainsi, les différentes approches pour modéliser la variance SGS de c donnent des résultats parfaitement comparables. Il n'est donc pas nécessaire de résoudre une équation de conservation supplémentaire pour la variance de c sur un tel cas.

5.7 Analyse qualitative des résultats et interprétations

5.7.1 Espèces majoritaires et température

Les niveaux de fractions massiques des espèces majoritaires dans les gaz brûlés sont reproduits par le calcul avec des écarts maximum de l'ordre de 5%. On note que les niveaux simulés correspondent approximativement aux niveaux observés à l'équilibre derrière une flamme laminaire de prémélange libre, ce qui est parfaitement conforme aux propriétés du modèle FPI.

Les niveaux de température prédits (voir annexe I) sont surestimés de plus de 100 K (soit $\approx 12\%$) dans les gaz brûlés. Cette surestimation peut s'expliquer par le fait qu'aucune perte thermique n'a été considérée. On peut en effet supposer ici que les pertes, essentiellement par conduction à travers l'accroche flamme, sont assez importantes. Dans ce contexte, pour améliorer les résultats, il serait pertinent d'imposer une température constante aux parois de l'accroche flamme, ce qui nécessiterait l'utilisation de tables FPI adaptées aux écoulements à enthalpie variable (voir Fiorina et al. [75]).

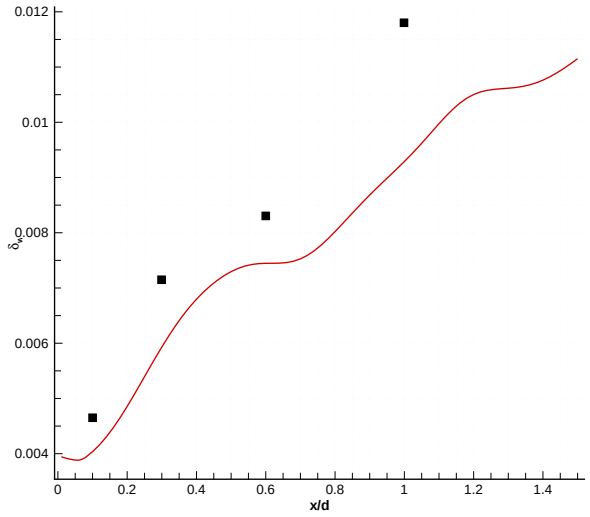

FIG. 5.22 – *Epaisseur de vorticité à travers la chambre pour le cas L1. Les symboles représentent l'expérience.*

5.7.2 Concentrations de CO

Le modèle employé dans le cadre de l'approche RANS surestime largement le pic de CO au sein du front de flamme. Alors que dans l'expérience celui-ci reste quasiment constant à travers la chambre, le calcul prédit une augmentation du niveau maximum lorsque l'on progresse en aval. Notons que les données expérimentales sur CO peuvent présenter des erreurs de près de 20% [150], mais que celles-ci ne permettent pas d'expliquer complètement les écarts observés.

Nilsson et Bai [154] ont montré, sur une configuration similaire, que le niveau maximal de CO dans la flamme est principalement contrôlé par le plissement de sous-maille du modèle. De la même manière, nous avons vu sur les calculs présentés ici que le pic de CO est correlé avec la valeur maximale atteinte par $\widetilde{c''^2}$. Leur surestimation est donc liée au fait que la variance de c est trop faible dans le sillage de l'accroche flamme. Une modélisation plus précise de cette grandeur est ici requise pour améliorer les résultats.

Dans les gaz brûlés, les niveaux de CO prédits par le calcul sont sous-estimés par rapport aux niveaux mesurés expérimentalement. Les niveaux prédits par le modèle correspondent en fait exactement à l'état d'équilibre atteint derrière une flamme laminaire non étirée, ce qui semble indiquer que la composition des gaz brûlés atteinte dans l'expérience est hors équilibre (ce phénomène est masqué lorsque l'on considère les espèces majoritaires car les ordres de grandeurs sont plus élevés). L'approche FPI est donc, par définition, incapable de reproduire ce type de comportement.

Vicente *et al.* [220], ayant déja relevé ce phénomène, n'ont pas été en mesure de l'expliquer. La prise en compte de pertes thermiques, de mécanismes réactionnels plus détaillés ou d'autres modèles de combustion turbulente (en l'occurence un modèle à PDF transportées), n'ont pu permettre de reproduire les observations expérimentales. De plus, l'étirement local de la flamme ne peut pas produire un tel effet sur les concentrations à l'équilibre. Comme l'ont en effet montré Rogg et Peters [185] sur une configuration de flamme laminaire à contre courant (prémélange contre gaz brûlés), lorsque l'étirement de la flamme varie, la structure interne de la flamme est modifiée mais pas l'état d'équilibre atteint par les gaz brûlés.

De manière à expliquer ce phénomène, il faut analyser le régime de combustion sous lequel se développe la flamme.

5.7.3 Régime de combustion

Il est possible de situer approximativement la flamme de Nandula sur un diagramme de combustion classique, en fonction de l_t/δ_L^0 et u'/S_L^0. De cette manière, on peut vérifier la validité de l'utilisation d'un modèle basé sur le concept de flammelettes.

Les premiers calculs réalisés dans un contexte RANS ont permi d'évaluer approximativement les valeurs prises par l_t et u' au sein de la flamme. On trouve ainsi un nombre de Karlovitz proche de 4 et un nombre de Damköhler de l'ordre 1,5. Comme on peut le voir sur la figure 5.23, ces conditions placent la flamme entre la ligne de Klimov - Williams et la limite de quenching déterminée plus précisément par Abdel-Gayed et al. [5] ou Meneveau et Poinsot [140]. La flamme étudiée se développe donc hors du régime de flammelettes. Ces phénomènes sont de nature à modifier fortement la structure interne de la flamme et donc l'état d'équilibre atteint dans les gaz brûlés.

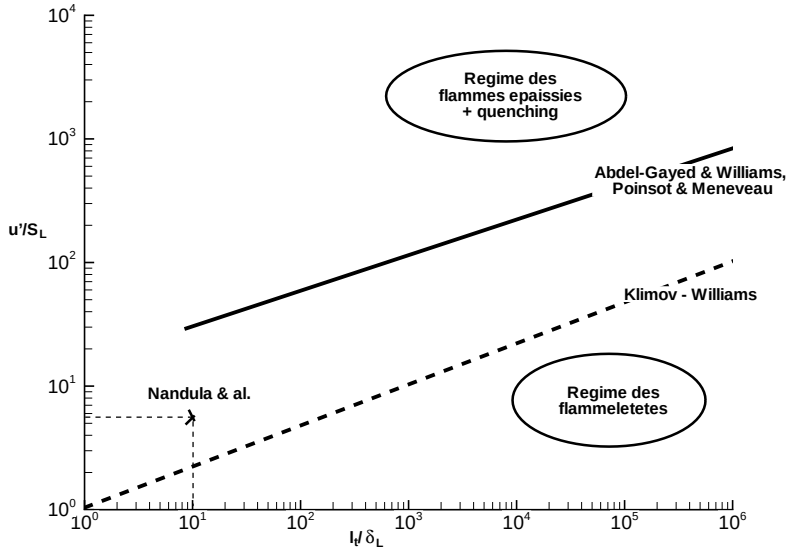

FIG. 5.23 – *Localisation de l'écoulement étudié par Nandula et al. dans un diagramme de combustion avancé.*

Le régime effectivement observé se caractérise par la formation locale de poches et par l'existence de zones de quenching partiel du front de flamme. On peut supposer que ce type de phénomène intervient lorsque la distance entre deux éléments de flamme s'opposant (ou bien lorsque la courbure locale du front) devient inférieure à une longueur caractéristique de l'ordre de $\delta_L^0/2$ [105]. Si ces portions de flamme interagissent, les réactions chimiques dans la zone d'oxydation peuvent être figées. Le mélange conserve alors une composition hors équilibre dans les gaz brûlés.

Hawkes et Chen [105, 106] ont observé ce type de phénomène sur des DNS 2D de flammes de prémélange se propageant dans une turbulence homogène isotrope. Ceci est illustré figure 5.24 : les zones de quenching partiel de la flamme sont facilement identifiées par le fait qu'elles présentent des niveaux de OH particulièrement élevés (en rouge).

Ce type de comportement ne peut s'observer que dans un domaine compris entre la limite de Kilmov - Williams ($Da = 1$) et la limite de quenching de Meneveau et Poinsot [140]. Là, le plissement du front de flamme dû aux tourbillons de l'écoulement est suffisamment important pour que celui-ci se referme par endroit sur lui-même pour former des poches. C'est dans ce régime qu'opère la configuration de Nandula.

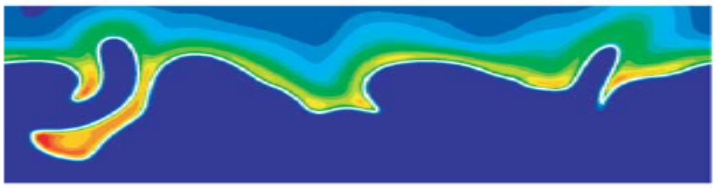

FIG. 5.24 – *DNS 2D d'une flamme méthane/air dopée en H_2 (Hawkes et Chen [105]) : champ de fraction massique de OH.*

5.8 Conclusions

Une configuration de flamme turbulente parfaitement prémélangée pauvre a été simulée en RANS et en LES pour valider le modèle FPI implanté dans CEDRE avec l'approche à PDF présumées. Différents modèles d'évaluation de $\widetilde{c''^2}$ ont été dans un premier temps testés suivant une approche RANS.

Des tendances très similaires sont observées lorsqu'on utilise une variance algébrique ou transportée. Ainsi, sur ce type de configuration, il est possible d'utiliser au choix ces deux types de modélisation, sans perdre *a priori* en qualité de résultats. De la même manière, la dissipation scalaire de c a été modélisée via les modèles de Vervisch et ITNFS, et peu de différences ont été observées entre les résultats obtenus par ces deux méthodes.

Les niveaux de CO maximum atteints sont largement surestimés par les calculs RANS. De plus, nous avons vu que la structure de la flamme turbulente, et en particulier son épaisseur, était très sensible à la constante choisie. Ces simulations montrent ainsi que l'approche RANS ne permet pas une modélisation fiable de cette flamme, ni une évaluation correcte de la formation d'espèces intermédiaires telles que CO.

Des simulations équivalentes ont ensuite été menées suivant une approche LES. Tous ces calculs ont été effectués en modélisant la dissipation scalaire de c via l'approche de Vervisch. Les résultats LES présentent des tendances similaires à ceux obtenus en RANS. Toutefois, il a été montré que les niveaux du pic de CO prédits par la LES étaient beaucoup plus proches de l'expérience. Par ailleurs, la modification de la constante du modèle de variance permet de contrôler leur hauteur sans altérer la structure moyenne de la flamme. Sur ce cas, la LES semble donc plus prédictive que le RANS, ce qui constitue un avantage majeur en faveur des approches instationnaires.

Ces calculs ont cependant mis en évidence la grande dépendance des résultats LES au maillage, en particulier au voisinage de la paroi du cône et de la couche de mélange. Ainsi, nous avons vu que le décollement n'était pas suffisamment résolu dans les cas étudiés, ce qui ne permet pas de reproduire correctement l'aérodynamique interne de la chambre. Par conséquent, les calculs LES présentés ne sont pas capables de retrouver la position correcte de la flamme au sein de l'écoulement.

Pour finir, il a été montré que le cas test retenu n'est pas adapté à des comparaisons qualitatives entre expérience et calcul. En effet, des concentrations hors équilibre dans les gaz brûlés (en particulier sur l'espèce CO) peuvent être observées. Ces niveaux s'expliquent par le fait que la flamme de Nandula se développe hors du régime des flammelettes, ce qui se caractérise par l'existance de zones de quenching partiel du front, figeant les réactions chimiques lentes.

Malgré ces difficultés, on a pu montrer la faisabilité de calculs RANS et LES avec le modèle FPI/PDF présumées adapté au code CEDRE. Pour mieux évaluer les capacités du modèle à prédire la formation d'espèces telles que CO ou NO, une configuration plus favorable au modèle doit être étudiée. Le chapitre suivant est donc dédié à la simulation numérique de l'injecteur swirlé PRECCINSTA.

Chapitre 6

Simulation numérique d'un injecteur prémélangé pauvre swirlé

Sommaire

6.1 Introduction . . . 160
6.2 Présentation de l'expérience PRECCINSTA . . . 161
6.2.1 Description du banc expérimental . . . 161
6.2.2 Base de données expérimentales . . . 162
6.3 Conditions de calcul pour le cas parfaitement prémélangé . . . 162
6.3.1 Domaine de calcul . . . 163
6.3.2 Maillages . . . 163
6.3.3 Conditions limites . . . 164
6.3.4 Modèles physiques et numériques utilisés pour les simulations FPI . . . 165
6.3.5 Modèles physiques et numériques utilisés pour les autres cas de calcul . . . 166
6.3.6 Récapitulatif . . . 168
6.4 Résultats en combustion prémélangée . . . 168
6.4.1 Performances et temps de calcul . . . 168
6.4.2 Structure de la flamme . . . 169
6.4.3 Champs instantanés de fraction massique de OH . . . 170
6.4.4 Comparaisons des profils de vitesses moyennes et fluctuantes . . . 174
6.4.5 Comparaisons des profils des grandeurs chimiques moyennes . . . 175
6.5 Simulation de la configuration partiellement prémélangée . . . 188
6.5.1 Objectifs . . . 188
6.5.2 Conditions limites et maillage pour le cas partiellement prémélangé . . . 188
6.5.3 Détails numériques sur la simulation . . . 189
6.6 Résultats de calcul sur la configuration partiellement prémélangée . . . 190
6.6.1 Comparaison des profils des grandeurs moyennes . . . 190
6.6.2 Etude du mélange instantané . . . 193
6.6.3 Etude du mélange moyen . . . 193
6.7 Simulation de la production de NO . . . 202
6.7.1 Modèlisation de la formation de NO pour PRECCINSTA . . . 202
6.7.2 Comparaison des champs de NO moyens . . . 204
6.7.3 Comparaison des profils de Y_{NO} moyens à travers la chambre . . . 206
6.7.4 Interprétations . . . 207
6.8 Conclusion . . . 211

6.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, le modèle FPI, couplé à l'approche à PDF présumées, a été validé sur le cas simple d'une flamme turbulente de prémélange pauvre stabilisée par un accroche flamme. Les simulations RANS ont, dans un premier temps, permis une étude paramètrique des modèles de façon à déterminer la modélisation la mieux adaptée aux problèmes abordés. Par la suite, les calculs LES ont montré l'applicabilité du modèle dans un cadre instationnaire. A la suite de ces calculs, la configuration retenue s'est révélée être inadaptée à la validation de modèles de combustion pour le régime des flammelettes. Pour cette raison, une analyse plus approfondie des modèles sur un cas test approprié est nécessaire.

Dans ce chapitre, le modèle FPI implanté dans CEDRE est appliqué à la simulation numérique de l'écoulement turbulent réactif au sein d'une chambre de combustion équipée d'un injecteur swirlé industriel. La chambre PRECCINSTA (pour "PREdiction and Control of Combustion INStabilities in Tubular and Annular GT combustion systems") est née d'un projet européen ayant pour thème la prédiction des instabilités de combustion au sein de chambres de turbines à gaz. Dans ce cadre, le brûleur a fait l'objet de nombreuses campagnes de mesures en gaz froids et en combustion (expériences de Meier *et al.* [139]). De part ses caractéristiques, la configuration se veut représentative d'injecteurs réels utilisés dans l'industrie. Celui-ci est d'ailleurs dérivé d'un injecteur développé par Turbomeca.

PRECCINSTA a beaucoup été utilisé comme cas test de référence pour de nombreuses études numériques. Ainsi, Lartigue [126] a étudié la réponse acoustique de la chambre en gaz froid, puis Roux *et al.* [186], [187] ont prolongé ces travaux à l'analyse acoustique de la chambre en présence de combustion. PRECCINSTA a également été utilisé dans le but de valider différents modèles de combustion turbulente avancés. On citera en particulier les travaux de Galpin *et al.* [84] qui ont validé l'implémentation du modèle FPI au sein du code AVBP ainsi que ceux de Moureau *et al.* [146] et Fiorina *et al.* [77] qui se sont récemment servis de la chambre PRECCINSTA dans un but similaire. Les études citées précédemment ont notamment permi de montrer que l'approche LES était particulièrement bien adaptée à la simulation de l'écoulement au sein de ce brûleur.

La plupart des calculs réalisés jusqu'à présent sur cette configuration ont supposé que la flamme se développait sous des conditions parfaitement prémélangées. Ceci constitue toutefois une simplification assez lourde de la géométrie réelle : les inhomogénéités de mélange en entrée de chambre devraient en effet être prises en compte pour une meilleure représentation des phénomènes chimiques mis en jeux. Le modèle FPI implanté dans le code CEDRE étendu à la modélisation de ce type de flamme, pourra donc être validé.

Le banc expérimental étudié par Meier *et al.* [139] est décrit dans la première section de ce chapitre. La chambre en configuration prémélange parfait est ensuite étudiée. Les maillages utilisés ainsi que les conditions limites imposées sont alors exposés, à la suite de quoi les différents modèles physiques et numériques employés sont introduits. Les résultats issus de ces simulations sont ensuite présentés (les profils des grandeurs chimiques moyennes sont notamment comparés aux données expérimentales). Dans une troisième partie, les conditions de calcul pour la chambre PRECCINSTA complète (pour le prémélange partiel) sont introduites et les premiers résultats obtenus sont présentés. En particulier, une étude détaillée du mélange en entrée de chambre est proposée.

Pour terminer ce chapitre, des calculs avec prise en compte de la formation de NO sont décrits. Ceux-ci sont réalisés sur la configuration parfaitement prémélangée. Trois approches différentes sont utilisées : les deux approches développées dans le chapitre 4 ainsi que le modèle PEUL développé à l'ONERA. Sachant qu'il n'existe pas de mesures de NO sur la chambre PRECCINSTA, les résultats issus de ces différents calculs seront uniquement comparés entre eux.

6.2 Présentation de l'expérience PRECCINSTA

6.2.1 Description du banc expérimental

La configuration expérimentale se compose d'un injecteur swirlé développé par TURBOMECA, monté sur une chambre à section carrée équipée de parois en quartz pour faciliter les diagnostics optiques. Le dispositif a été conçu pour pouvoir étudier des flammes méthane/air partiellement prémélangées à différentes richesses, à pression atmosphérique. La figure 6.1 représente le banc expérimental PRECCINSTA.

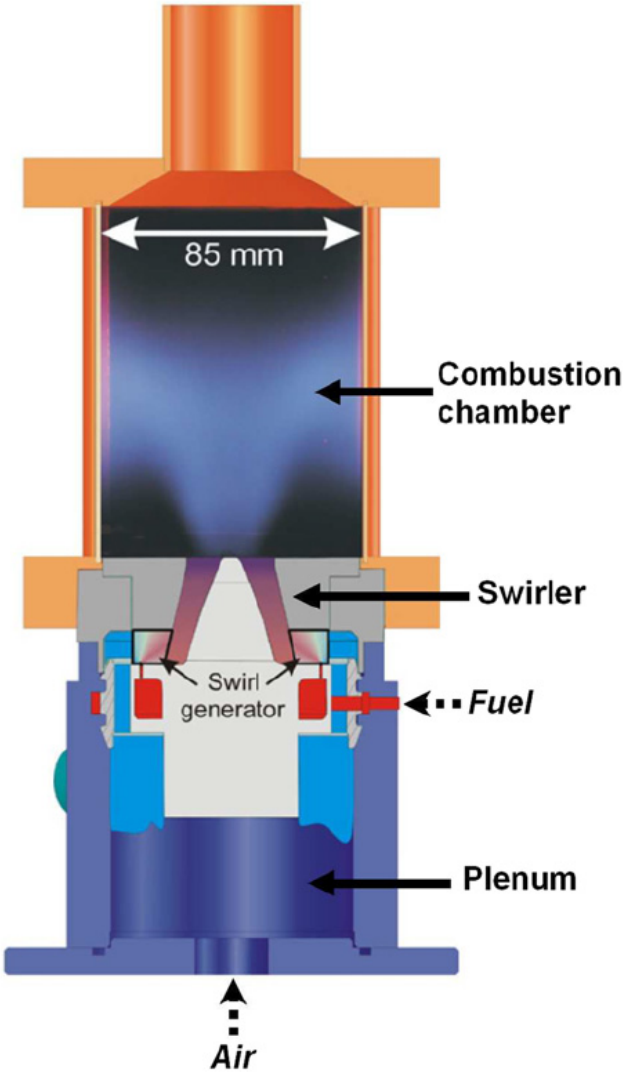

FIG. 6.1 – *Schéma simplifié du dispositif expérimental PRECCINSTA (Meier et al. [139]).*

Un plenum servant de chambre de tranquilisation, dans lequel de l'air pur est injecté sous les conditions atmosphériques, avec un débit constant de 0,0122 kg.s^{-1}. A la sortie de ce plenum, l'écoulement pénètre dans douze vrilles inclinées d'un angle de 45°, imprimant à l'écoulement un mouvement de "swirl". Le méthane est injecté à l'intérieur des canaux de ces vrilles via de petits tubes d'un diamètre de 1 mm. A la sortie des vrilles, le mélange méthane/air pénètre dans la chambre via un canal de forme conique avec une section d'entrée de diamètre 27,85 mm.

Le mouvement de swirl génère la formation d'une zone basse pression tourbillonnaire, située juste

en aval de l'entrée de la chambre, et parfois appelée PVC ou "Precessing Vortex Core". La présence de ce PVC s'accompagne de la création d'une large zone de recirculation centrale permettant de stabiliser la flamme. La chambre possède une section carrée de 85 mm de coté, sur une longueur de 114 mm. Pour finir, les gaz brûlés sont éjectés par un canal cylindrique de diamètre 40 mm. On peut considérer ici que ce canal débouche directement dans l'atmosphère.

La configuration PRECCINSTA a été étudiée expérimentalement sous trois points de fonctionnement particuliers, distingués par la puissance délivrée par l'injecteur : 25 kW, 27 kW et 30 kW. Ces trois cas correspondent respectivement à des richesses globales de 0,7 ; 0,75 et 0,83.

Des comportements différents ont été observés suivant la puissance délivrée par la chambre. Ainsi, contrairement au cas à 25 kW, le cas à 30 kW ($\Phi = 0,83$) ne présente expérimentalement pas d'instabilités de combustion. Pour cette raison, nos calculs ne porteront par la suite que sur ce point de fonctionnement particulier.

Les différentes conditions sous lesquelles opère le brûleur sont résumées dans le tableau 6.1.

cas	débit air	richesse	débit carburant	température ini.	pression	température ad.
1	0,0122 kg.s^{-1}	0,7	5.10^{-4} kg.s^{-1}	295 K	1 atm	1834 K
2a	0,0122 kg.s^{-1}	0,83	6.10^{-4} kg.s^{-1}	295 K	1 atm	2037 K
2b	0,0122 kg.s^{-1}	0,75	$5,4.10^{-4}$ kg.s^{-1}	295 K	1 atm	1915 K

TAB. 6.1 – *Caractéristiques des écoulements étuidés expérimentalement au sein de la chambre PRECCINSTA [139].*

6.2.2 Base de données expérimentales

De nombreuses campagnes de mesures ont été effectuées sur cet injecteur au DLR de Stuttgart et de Berlin (les résultats expérimentaux sont présentés par Meier *et al.* [139]). Ces campagnes ont mené à la constitution d'une importante base de données contenant des résultats moyens et RMS concernant de nombreuses espèces minoritaires et majoritaires (notamment CO_2, CO ou OH), la température et les vitesses.

Les données concernant la température et les fractions massiques des espèces majoritaires ont été relevées par mesures Raman. De la PLIF ("Planar Laser Induced Fluorescence") et de la chimieluminescence ont également été réalisées sur OH. Les mesures concernant la caractérisation de l'état thermochimique des gaz ont été effectuées sur les cas à richesse 0,7 et 0,83 (respectivement instable et stable).

Les données accumulées sur le cas à 30 kW ont été complétées par des mesures de vitesses réalisées par LDV ("Laser Doppler Velocimetry") sur une flamme à richesse 0,75. Celle-ci est également stable et on peut s'attendre à ce que la différence de richesse observée entre 30 kW et 27 kW ne modifie pas radicalement sa structure ni celle de l'écoulement. Bien que ces mesures aient été effectuées sous des conditions différentes du cas simulé, on pourra tout de même comparer de façon pertinente nos résultats à l'expérience.

Des renseignements sur les incertitudes de mesures durant ces campagnes ont été donnés par Meier *et al.* [139]. Le tableau 6.2 récapitule certaines barres d'erreurs évaluées pour différentes grandeurs mesurées. Notons en particulier l'incertitude très élevée sur les mesures de CO.

6.3 Conditions de calcul pour le cas parfaitement prémélangé

Les calculs LES ont été réalisés sur deux géométries différentes. Dans un premier temps, la combustion au sein de la chambre a été supposée parfaitement prémélangée. Cette hypothèse, considérée

Quantité	Incertitudes de mesure	Incertitudes statistiques
Y_{CO_2}	$\pm 3 - 5\%$	$\pm 7\%$
Y_{CO}	$\pm 5 - 10\%$	$\pm 20 - 50\%$
Température	$\pm 3 - 4\%$	$\pm 2,5\%$

TAB. 6.2 – *Incertitudes de mesure sur PRECCINSTA [139].*

également dans les précédents travaux notamment de Roux *et al.* [187] et Galpin *et al.* [84], permet de conserver la dynamique de la flamme et d'évaluer correctement la formation des espèces majoritaires.

6.3.1 Domaine de calcul

Pour réaliser les simulations parfaitement prémélangées, les tubes d'injection du carburant ont été supprimés de la géométrie d'origine, et un prémélange parfait méthane/air possédant la richesse moyenne voulue est directement injecté en entrée.

En entrée, le domaine de calcul comprend le plenum précédé d'un canal cylindrique. La longueur du canal d'injection a été fixée à 50 mm. Il a été montré que la longueur de ce canal, choisie de manière empirique (le canal réel est beaucoup plus long), influence grandement l'acoustique de la chambre. Ainsi, si une simple condition limite d'entrée est fixée, il a été observé qu'en diminuant ou en augmentant la longueur de ce canal, des instabilités de combustion peuvent apparaître. En procédant ainsi, on modifie en effet les modes acoustiques du plenum, ce qui peut perturber la flamme en aval. La longueur retenue a été déterminée de manière à ce qu'aucune instabilité ne soit observée (comme c'est le cas expérimentalement à cette richesse). Une autre possibilité pour éviter ce type de phénomène consiste à placer une condition d'entrée caractéristique non réfléchissante. Toutefois, suivant cette méthode, le débit injecté peut varier légèrement au cours du temps.

Derrière le plenum, on retrouve les vrilles ainsi que le cône d'injection dans la chambre. Une boite cubique de coté 100 mm, modélisant une partie de l'atmosphère extérieure, a été ajoutée à la géométrie d'origine, derrière le canal d'éjection des gaz brûlés. La présence de cette boîte permet une évacuation propre des ondes acoustiques, sans réflexion.

6.3.2 Maillages

Deux maillages ont été construits dans le cadre de cette thèse et un troisième maillage, déja utilisé par le passé par Lartigue [126] et Roux [186], a été repris. Le schéma 6.2 présente le maillage de peau de la géométrie simulée (sans l'atmosphère externe) correspondant au premier maillage, le plus grossier. Chaque partie de la géométrie est distinguée par une couleur différente.

Les caractéristiques correspondant aux deux premiers maillages (notés PM1 et PM2) sont présentées dans le tableau 6.3. Le maillage de Roux [186] y est également référencé (PM3) :

- le maillage le plus grossier comporte 1,8 millions de cellules (soit 3,6 millions de faces), et le diamètre de la plus petite maille, située au sein de la zone de flamme, mesure environ 0,3 mm ;
- le second maillage comporte 2,7 millions de mailles (5,5 millions de faces) et la plus petite cellule possède un diamètre de 0,19 mm. Ce maillage est raffiné au niveau de la zone de flamme (représentée par un cône dont l'angle au sommet correspond à l'angle d'ouverture de la flamme) ainsi qu'au niveau du canal cônique en entrée de chambre.
- le maillage PM3 comporte environ 3 millions de mailles dont la plus petite possède un diamètre de 0,19 mm. Les raffinements réalisés sur ce maillage sont identiques à ceux apportés aux maillages PM1 et PM2. Ce maillage se rapproche beaucoup du maillage PM2 en terme de densité de mailles (en particulier dans la chambre de combustion).

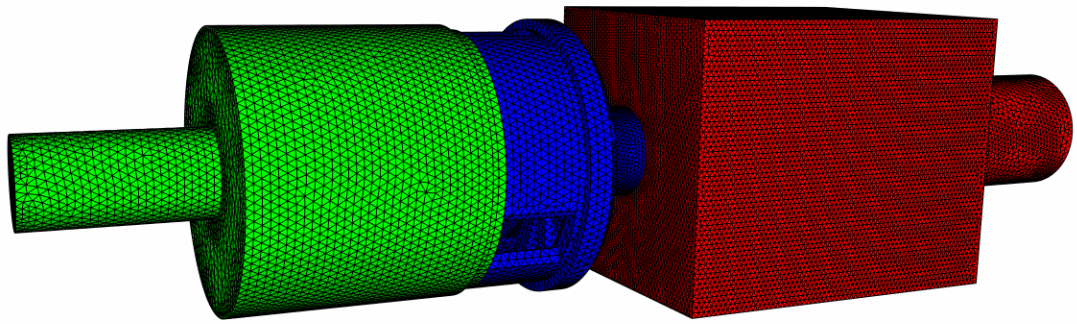

FIG. 6.2 – *Maillage de peau de la géométrie simulée (sans l'atmosphère) correspondant au maillage le plus grossier pour la configuration prémélangée.*

Meshes	Nb. cellules	Nb. faces	Plus petite maille
PM1	1 760 000	3 570 000	0,31 mm
PM2	2 730 000	5 510 000	0,19 mm
PM3	2 958 600	5 965 000	0,19 mm

TAB. 6.3 – *Récapitulatif des caractéristiques des maillages utilisés pour la configuration PRECCINSTA prémélangée.*

Les deux maillages construits sont représentés sur les figures 6.3 et 6.4. Notons que la partie du maillage correspondant à l'atmosphère est fortement déraffinée. On gagne ainsi un nombre de points considérable et on limite la remontée d'ondes de pression dans le domaine de calcul en augmentant la dissipation numérique.

6.3.3 Conditions limites

Sur la section d'entrée, le débit, la température et la composition du fluide sont fixés. En sortie, autour de l'atmosphère (sauf sur la section la plus en amont), des conditions limites de sortie non réfléchissantes sont imposées, où la pression interne au domaine est relaxée vers la pression atmosphérique. Sur la section amont de l'atmosphère, un léger coflow composé de gaz brûlés est injecté à 2 $m.s^{-1}$. En procédant ainsi, on limite les difficultés numériques pouvant survenir dans cette partie de l'atmosphère.

Les autres limites du domaine (chambre, vrille, plenum...) sont considérées comme étant des parois adiabatiques sans adhérence.

La figure 6.5 présente une coupe schématique suivant l'axe z du domaine de calcul, mettant en évidence les différentes limites imposées.

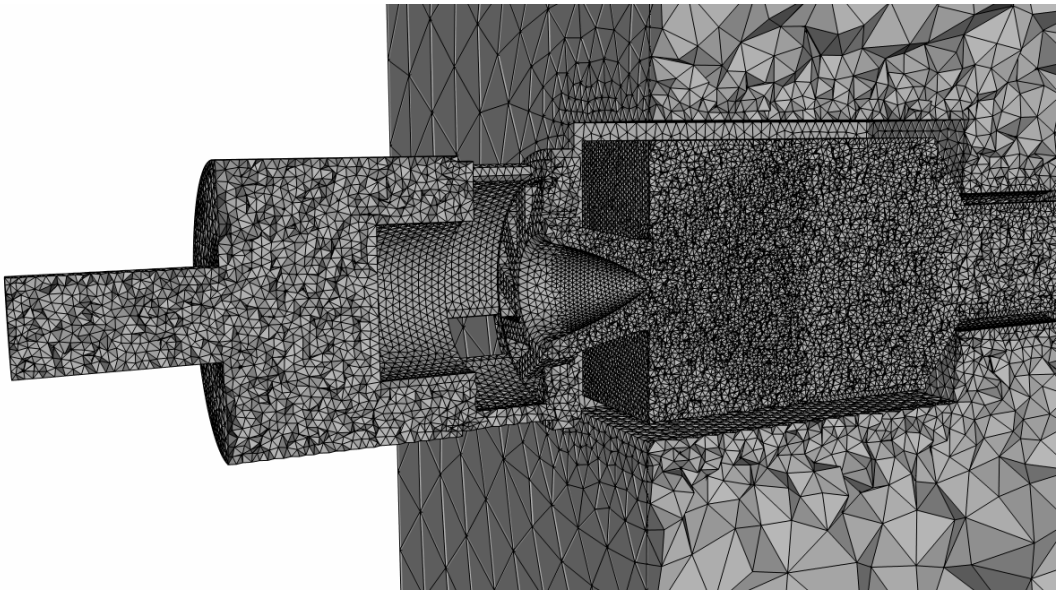

FIG. 6.3 – *Maillage grossier réalisé sur la configuration PRECCINSTA parfaitement prémélangée.*

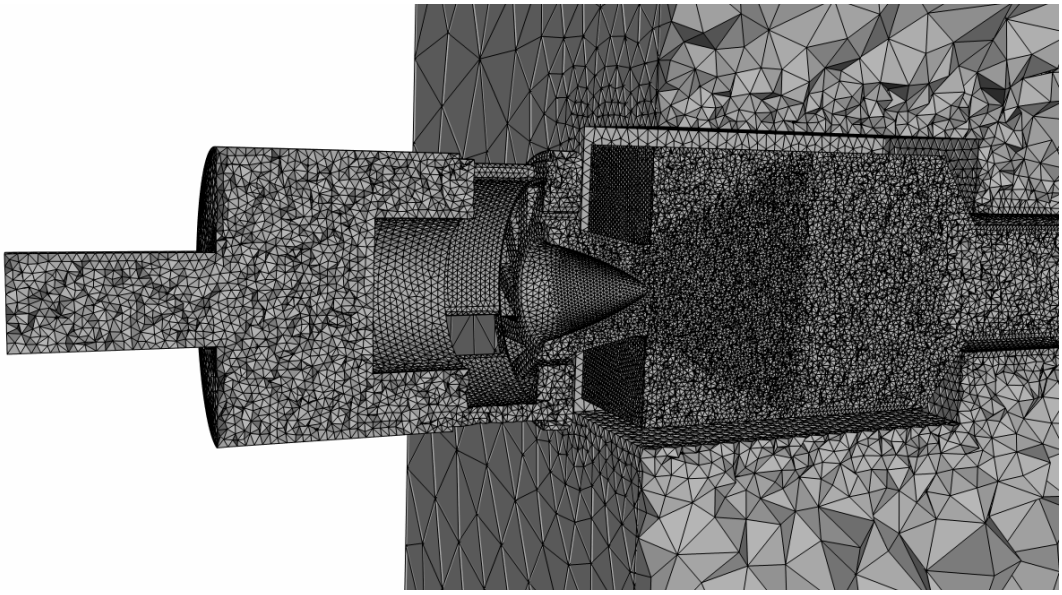

FIG. 6.4 – *Maillage fin réalisé sur la configuration PRECCINSTA parfaitement prémélangée.*

6.3.4 Modèles physiques et numériques utilisés pour les simulations FPI

Les calculs présentés ici ont tous été réalisés dans un cadre LES avec le modèle de Smagorinsky (constante C_S fixée à 0,1).

Modèle FPI :

Trois calculs différents ont été menés à l'aide du modèle FPI sur la configuration PRECCINSTA prémélangée. Deux d'entre eux ont été réalisés sur le maillage PM1 et le troisième sur le maillage PM2.

Concernant la variance SGS de c, les calculs sur la configuration de Nandula (voir chapitre 5) ont montré que la méthode consistant à transporter cette grandeur n'apportait pas d'amélioration significative aux résultats. L'utilisation d'expressions algébriques demeure suffisante. Il a de plus été

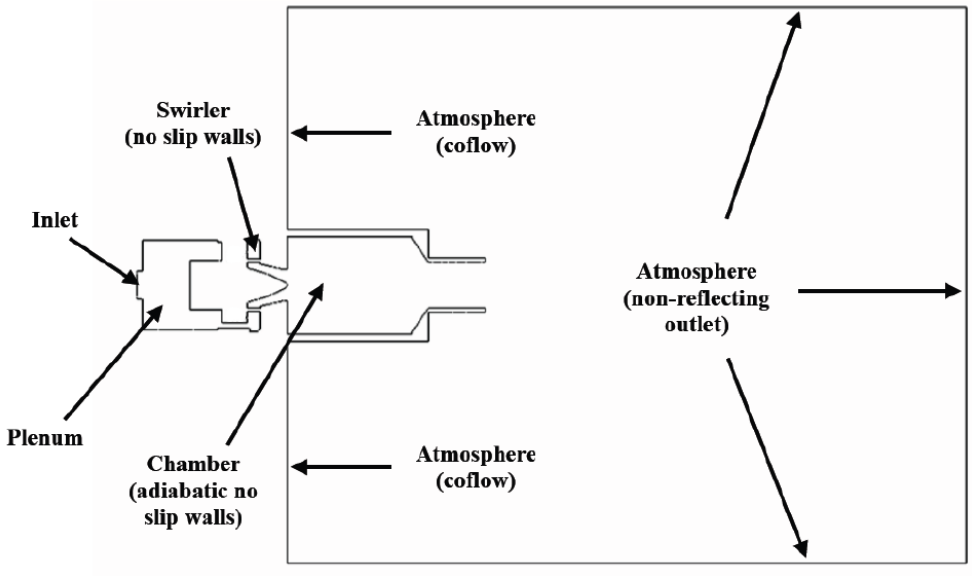

FIG. 6.5 – *Domaine de calcul PRECCINSTA prémélangé et conditions limites.*

conclu que le modèle de dissipation scalaire de Vervisch *et al.* était bien mieux adapté aux simulations LES que les autres modèles introduits. Pour ces raisons, dans les travaux présentés ici, la variance SGS de c a toujours été évaluée suivant la relation (3.129).

En faisant varier la constante C'' du modèle de variance, deux cas de calcul ont été définis : le cas FPI1 correspond à une constante $C'' = 1$ et le cas FPI2 à $C'' = 2$. Notons que le cas FPI3, qui est le seul cas effectué sur le maillage PM2, utilise une constante C'' valant 1.

Tous les calculs présentés utilisent les mêmes tables FPI "filtrées", contenant 250 points suivant $\widetilde{c}$ et 30 points suivant $\widetilde{c''^2}$. Sachant que la table contient les fractions massiques et les taux de production de chaque espèce décrite par le mécanisme réactionnel GRI-Mech 3.0, la table contient $2 \times 53 \times 250 \times 30 =$ 795 000 réels double précision. Cette table occupe un total de 14 Mo en mémoire.

Méthodes numériques :

Les simulations FPI ont été réalisées avec le schéma d'intégration temporelle de Runge-Kutta à deux étapes. De cette manière, le pas de temps est fixé par le critère CFL, soit $CFL \leq 0,5$. Dans le cadre de ces simulations, le pas de temps est limité par les petites mailles situées dans la zone de flamme. On trouve ainsi que le pas de temps minimal de stabilité sur le maillage PM1 est de $1{,}2.10^{-7}$ s et de 6.10^{-8} s sur le maillage PM2.

Pour plus de précisions sur les schémas de discrétisation spatiale, on peut se reporter au chapitre 2.

6.3.5 Modèles physiques et numériques utilisés pour les autres cas de calcul

De manière à évaluer les capacités du modèle FPI à prédire la formation des principaux produits de combustion, les simulations FPI sont comparées à des résultats obtenus à l'aide d'autres modèles de combustion turbulente utilisés dans CEDRE. Les calculs réalisés à l'aide de ces modèles ont été menés sur le maillage PM3 de Roux *et al.* [187], dans le cadre du projet MOGADIR de l'ONERA (pour plus de détails sur ces calculs, on peut se reporter au rapport technique de Bertier [12]). Deux approches supplémentaires ont ainsi été employées.

Approche pseudo laminaire : le premier des calculs effectué hors du cadre FPI utilise une approche "no model", ou pseudo laminaire, où les termes sources chimiques filtrés des espèces transportées

par CEDRE sont directement déterminés en fonction des grandeurs chimiques filtrées :

$$\widetilde{\dot{\omega}_i} = \dot{\omega}_i \left(\widetilde{Y_1}, ..., \widetilde{Y_N}, \widetilde{T} \right). \tag{6.1}$$

L'expression des taux de réaction de chaque espèce est donnée par la loi d'action de masse où les vitesses directes et inverses de réaction sont évaluées à l'aide de lois d'Arrhenius. Dans ce contexte, les fluctuations turbulentes des espèces et de la température sont négligées dans l'évaluation des taux de production.

La chimie est modélisée à l'aide du mécanisme réactionnel réduit à deux étapes proposé par Selle *et al.* [196] pour la combustion du méthane. Ce schéma se décompose en une première étape irréversible d'oxydation du carburant conduisant à la formation de H_2O et de CO, et une seconde étape réversible représentant l'équilibre CO/CO_2 :

$$\begin{array}{rl} CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \longrightarrow 2H_2O + CO & 1, \\ CO + \frac{1}{2}O_2 \longleftrightarrow CO_2 & 2. \end{array}$$

Les expressions des taux de réaction directs correspondant aux équations 1 et 2 sont données par Roux *et al.* [187] :

$$\dot{\omega}_1 = A_1 \left(\frac{\rho Y_{CH_4}}{M_{CH_4}} \right)^{n_1} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{M_{O_2}} \right)^{n_2} \exp\left(-\frac{Ea_1}{RT} \right), \tag{6.2}$$

$$\dot{\omega}_{2f} = A_2 \left(\frac{\rho Y_{CO}}{M_{CO}} \right)^{n_1} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{M_{O_2}} \right)^{n_2} \exp\left(-\frac{Ea_2}{RT} \right). \tag{6.3}$$

Les exposants des concentrations n_1 et n_2 peuvent être différents des coefficients stœchiométriques. Les coefficients des lois d'Arrhenius pour ces deux équations ainsi que les exposants des concentrations sont introduits dans le tableau 6.4 (exprimés en unités cgs).

Réaction	A	β	Ea	n_1	n_2
1	2.10^{15}	0	35 000	0,9	1,1
2f	2.10^{9}	0	12 000	1	0,5

TAB. 6.4 – *Mécanisme réactionnel à deux étapes pour la combustion du méthane décrit par Selle et al. [196] (unités cgs).*

Le taux de réaction inverse de l'équation 2 est recalculé dans CEDRE à partir de la constante d'équilibre correspondante k_{eq2}. Ce cas de calcul sera par la suite noté ARRH (des premières lettres de "Arrhenius").

Modèle TFLES : Un second calcul a été mené en utilisant le modèle de combustion turbulente TFLES [49]. Ce modèle a été introduit dans le chapitre 3 de ce mémoire. Les coefficients du modèle (facteur d'épaississement et facteur d'efficacité) sont ici déterminés de manière dynamique suivant les relations déja données précédemment.

Le modèle TFLES permet de traiter les interactions entre la flamme et la turbulence en faisant en sorte que celles-ci soient parfaitement résolues sur un maillage donné. Le mécanisme réactionnel nécessaire pour déterminer les termes sources chimiques non fermés est le même que celui choisi dans le cas ARRH [196]. Ce cas de calcul sera noté TFLES.

Contrairement aux cas FPI, les simulations ARRH et TFLES ont été réalisées en utilisant un schéma d'intégration temporelle implicite (schéma Euler implicite d'ordre 1). Ainsi, ces calculs ont pu être menés avec des pas de temps plus importants, de l'ordre de 10^{-6} s. Ceci constitue un gain notable en terme de temps de restitution des résultats. Toutefois, le fait d'utiliser un schéma d'ordre 1 en temps augmente la dissipation numérique et conduit théoriquement à une perte de précision des résultats.

6.3.6 Récapitulatif

Le tableau 6.5 présente un bref récapitulatif des différents calculs menés avec CEDRE sur la configuration PRECCINSTA prémélangée. Dans ce tableau sont regroupées les informations concernant les maillages utilisés dans chaque cas, ainsi que sur les modèles et les schémas numériques.

Cas	Maillage	Modèle	Constante	Intégration	Δt (s)
FPI1	PM1	FPI	1	RK2	$1{,}2.10^{-7}$
FPI2	PM1	FPI	2	RK2	$1{,}2.10^{-7}$
FPI3	PM2	FPI	1	RK2	6.10^{-8}
ARRH	PM3	"no-model"	-	Euler imp.	10^{-6}
TFLES	PM3	TFLES	-	Euler imp.	10^{-6}

TAB. 6.5 – *Récapitulatif des calculs effectués avec CEDRE sur le cas PRECCINSTA prémélangé en LES.*

On rappelle pour finir que les calculs présentés par la suite ont été uniquement réalisés sur la configuration PRECCINSTA à 30 kW, correspondant à une richesse moyenne dans la chambre de 0,83. Ce cas a été retenu car il ne présente pas d'instabilités de combustion (selon l'expérience de Meier et al. [146]). Le cas expérimental opérant à 27 kW, pour lequel on ne dispose que de mesures de vitesses, est également stable et pourra ainsi être comparé aux résultats de calcul.

6.4 Résultats en combustion prémélangée

6.4.1 Performances et temps de calcul

Les différents calculs FPI présentés ont été réalisés sur 64 processeurs, indifféremment sur le cluster IBM du CEA de Bruyère le Chatel ou sur le cluster IBM de l'ONERA. Les deux machines présentent la même architecture et les mêmes performances globales.

Concernant les simulations FPI1 et FPI2 sur le maillage grossier, les calculs ont été poursuivis sur un temps physique de l'ordre de 0,022 s, ce qui représente une trentaine de traversées de chambre. Ce temps est suffisant pour garantir la convergence statistique des moments du premier et du deuxième ordre des grandeurs comparées. Par ailleurs, le temps de restitution de ces calculs sur les machines citées précédemment est d'environ 100 h sur 64 processeurs (soit un temps CPU total de 6 400 h).

Si on considère le calcul FPI3 sur le maillage raffiné, les simulations correspondent à un temps physique à peu près équivalent aux cas précédents : 0,0195 s. Le temps de restitution de cette simulation s'élève à 295 h sur 64 processeurs, soit un temps CPU total de près de 19 000 h.

Cas	Nb. itérations total	Temps physique	Temps de restitution	Temps CPU
FPI1/FPI2	216 000	0,022 s	100 h	6 400 h
FPI3	324 000	0,0195 s	295 h	18 880 h

TAB. 6.6 – *Performances des simulations numériques effectuées sur PRECCINSTA avec le modèle FPI.*

Du fait de la diminution du pas de temps due aux petites mailles du maillage PM2, et sachant que ce maillage comporte un peu plus de 50% de mailles supplémentaires comparé à PM1, on note une augmentation considérable du temps de restitution des simulations (on relève un facteur 3), sur un temps physique simulé équivalent. Pour cette raison, un seul et unique calcul a été réalisé sur PM2 de manière à vérifier la sensibilité des résultats au maillage.

6.4.2 Structure de la flamme

Les figures 6.6 et 6.7 présentent des iso-surfaces de température et du second invariant du tenseur des déformations, aussi appelé critère Q :

$$Q = -\frac{1}{2}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\frac{\partial u_j}{\partial x_i}. \tag{6.4}$$

Ces iso-surfaces sont colorées en fonction de la vitesse de l'écoulement suivant l'axe z. L'influence du PVC sur l'écoulement dans la chambre et sur la flamme est particulièrement visible. Sur la figure 6.6, on voit un apperçu tridimensionnel du front de flamme qui se développe en forme de cône autour du PVC central. Sur la figure 6.7, on note la présence de structures tourbillonaires très allongées, étirées par le mouvement de swirl de l'écoulement. Celles-ci ont tendance à s'enrouler autour du PVC.

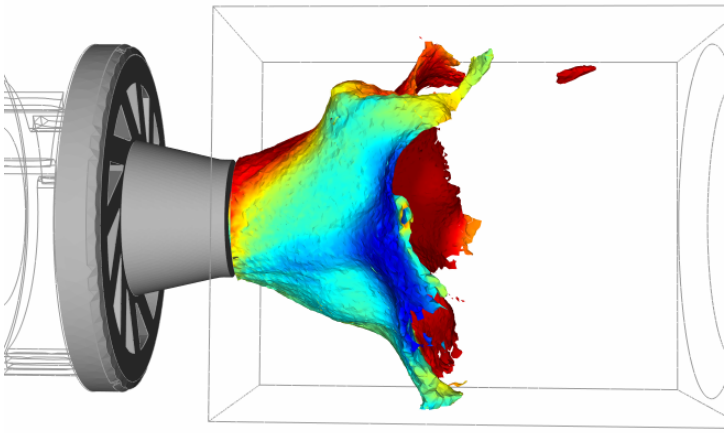

FIG. 6.6 – *Iso-surface de température à 1100 K issue d'un calcul CEDRE et colorée en fonction de W.*

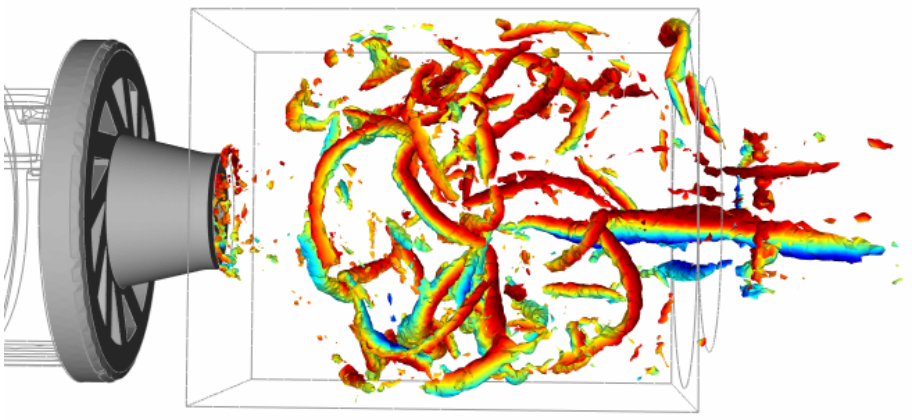

FIG. 6.7 – *Iso-surface du critère Q issue d'un calcul CEDRE et colorée en fonction de W.*

La figure 6.8 montre la structure moyenne de l'écoulement dans la chambre. Les iso-contours de vitesse axiale nulle permettent de visualiser l'importante zone de recirculation centrale se développant

à la sortie des vrilles. L'écoulement entrant dans la chambre est donc repoussé vers l'extérieur, ce qui confère à la flamme sa forme cônique. Ce phénomène est avant tout piloté par l'aérodynamique interne de la chambre et est notamment lié à la structure de l'écoulement à la sortie des vrilles. La combustion a ici une influence assez faible sur le PVC. Les iso-contours de vitesse longitudinale nulle (en bleu) permettent de mettre en évidence une zone de recirculation de forme toroïdale, située dans les coins de la chambre de combustion.

Les iso-coutours de température permettent de situer la flamme au sein de l'écoulement. Ce tracé met en évidence le fait que la flamme est accrochée au sommet du cône d'injection et que celle-ci est stabilisée par les recirculations présentent dans l'écoulement, et en particulier par le PVC (les contours de la flamme suivent parfaitement l'iso-ligne $U = 0$ m.s^{-1}).

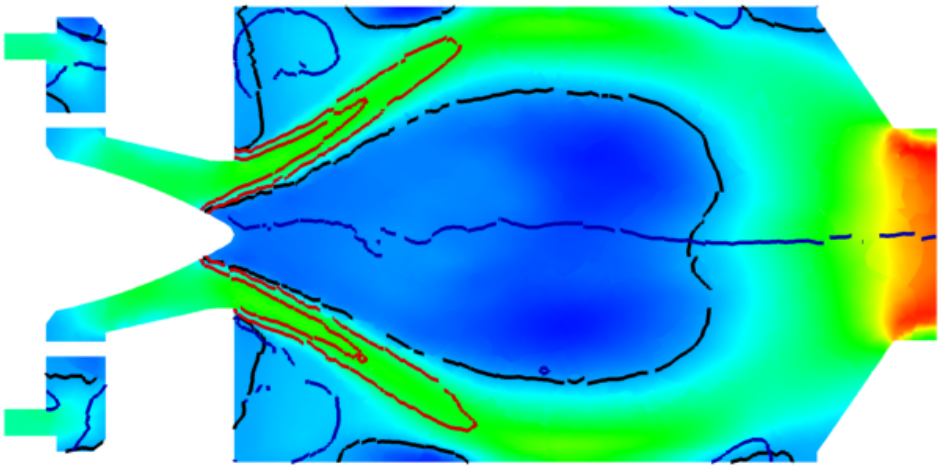

FIG. 6.8 – *Champ moyen de vitesse axiale issu d'un calcul CEDRE moyenné avec iso-contours de vitesse axiale $U = 0$ m.s^{-1} (en noir), de vitesse longitudinale $V = 0$ m.s^{-1} (en bleu foncé) et de températures $T = 900$ K et $T = 1800$ K.*

La flamme moyenne est représentée schématiquement sur la figure 6.9 dans un plan 2D, suivant une coupe en z. Celle-ci est constituée de deux fronts distincts se développant de part et d'autre du jet de gaz frais.

6.4.3 Champs instantanés de fraction massique de OH

L'un des intérêts majeur du modèle FPI est qu'il donne accès à de nombreuses espèces minoritaires tabulées. Ainsi, les champs de l'espèce OH calculés peuvent être directement comparés à l'expérience étant donné que des mesures expérimentales réalisées par PLIF sont disponibles.

OH est généralement considéré comme un bon traceur de la flamme. L'analyse de champs instantanés de cette espèce, relevés ici à des intervalles de 0,24 ms, nous permet d'étudier sa dynamique instationnaire (voir figure 6.11).

La figure 6.10 représente une période des fluctuations de la pression moyenne normalisée dans la chambre. Les instants auxquels sont relevés les champs de OH présentés sont indiqués sur la figure, en fonction de la phase.

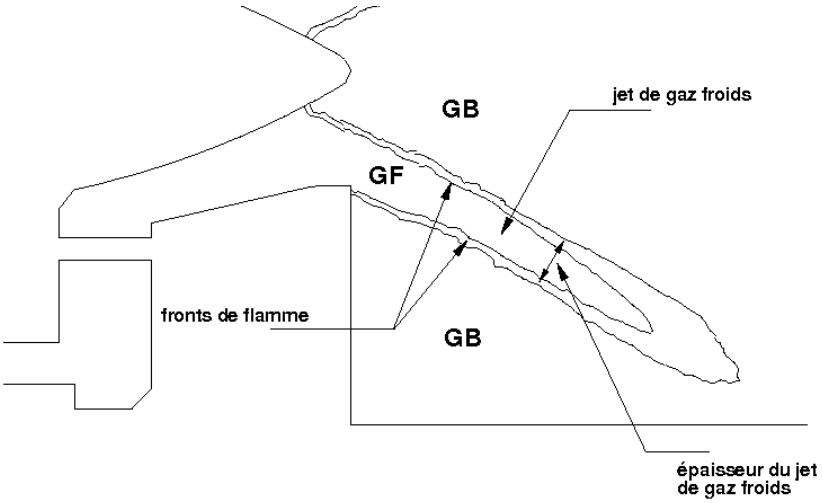

FIG. 6.9 – *Représentation schématique de la flamme se développant au sein de la chambre PRECCINSTA.*

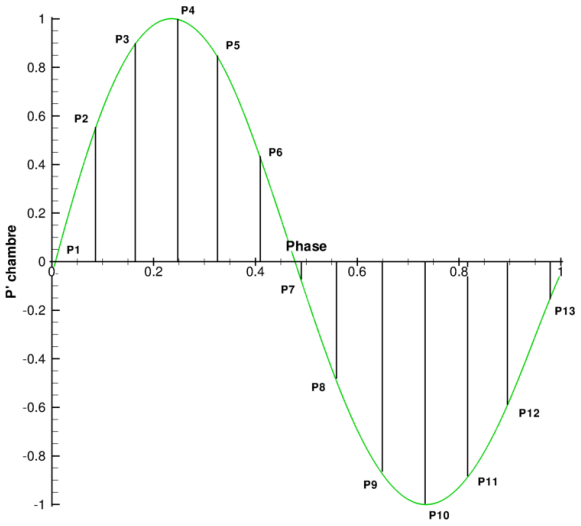

FIG. 6.10 – *Fluctuations de pression moyenne dans la chambre normalisées.*

La différence de pression maximale observée au sein de la chambre est ici de l'ordre de $\Delta p \approx 85$ Pa. La période observée est d'environ 3 ms (ce qui correspond à une fréquence de 330 Hz) et le signal présente une forme quasi-sinusoïdale. Ceci indique que la flamme bat suivant un mode périodique très peu bruité, caractéristique de ce type d'écoulement swirlé. Ce mode correspond exactement à la fréquence de rotation du PVC.

Le signal tracé figure 6.10 est à mettre en parallèle avec les résultats expérimentaux présentés dans [146] à 25 kW ($\varphi = 0{,}7$). Les auteurs relèvent sur ce cas une fréquence de battement de la flamme de l'ordre de 290 Hz, et les signaux de pression montrent une forme quasiment sinusoïdale. Ainsi, malgré la différence de richesse et de comportement entre les deux cas, on retrouve des signaux de pression très similaires (fréquence et forme), la principale différence résidant dans l'amplitude du signal relevé.

Le premier champ présenté figure 6.11 correspond à un noeud de pression. Les deux jets de gaz frais (en violet) sont alors très étirés et s'enroulent à proximité de la paroi. La flamme étant fortement étirée, des poches se forment et le jet de prémélange entrant dans la chambre se rétrécit. La formation des poches correspond au moment où la pression moyenne dans la chambre atteint son maximum et

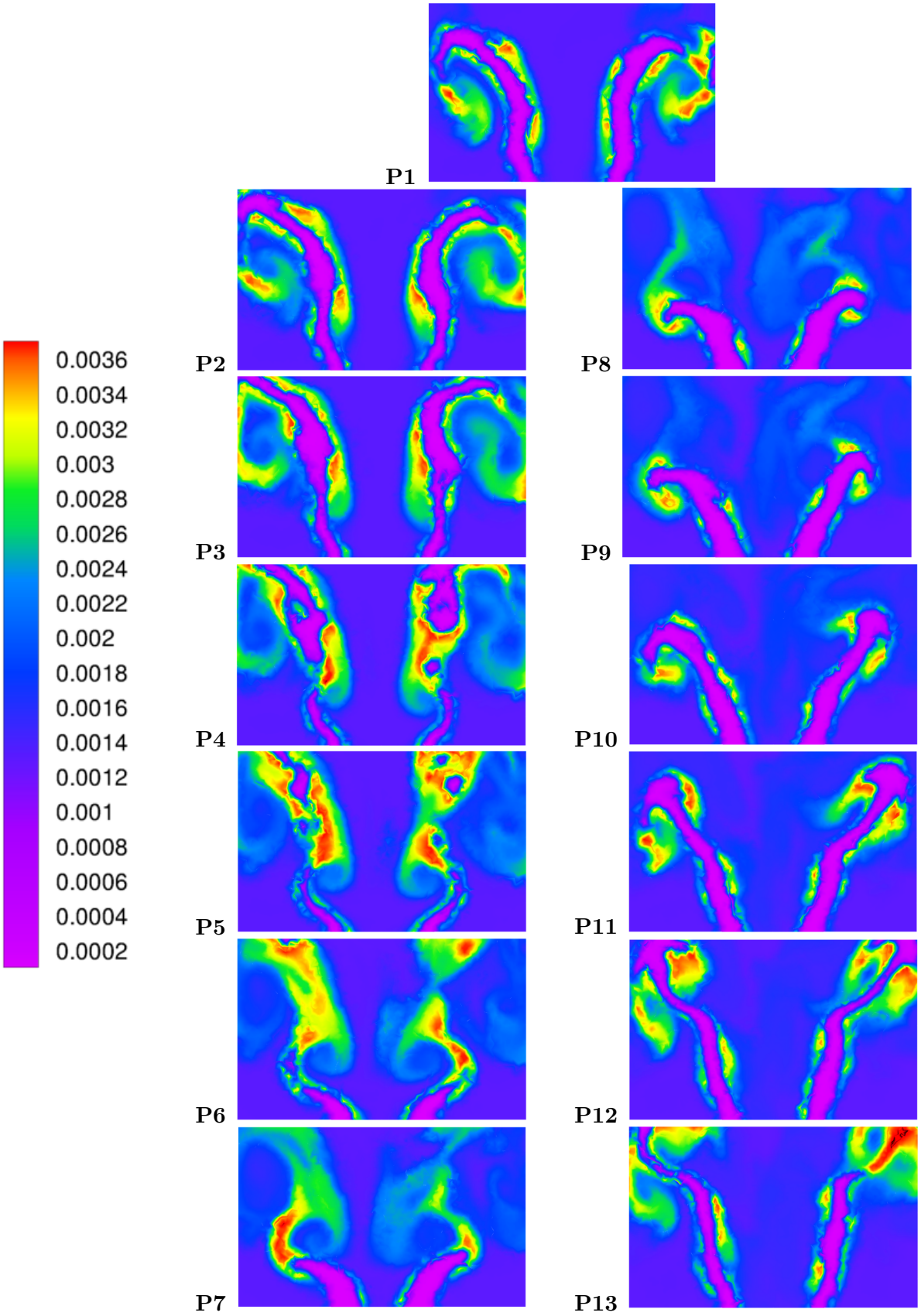

FIG. 6.11 – *Champs instantanés de la fraction massique de OH à différents instants.*

elle entraine une production importante de OH derrière le jet froid.

En même temps que la pression dans la chambre diminue et que les poches sont évacuées de la fenêtre d'observation, les jets de gaz frais se développent et progressent dans la chambre. Durant cette phase, on ne note pas de production importante de OH dans la flamme. Lorsque la pression atteint son minimum et recommence à augmenter, les jets froids sont très étirés en longueur et un nouveau cycle recommence. Ces figures permettent de mettre en évidence la relation entre l'évolution de la pression dans la chambre et la dynamique de la flamme.

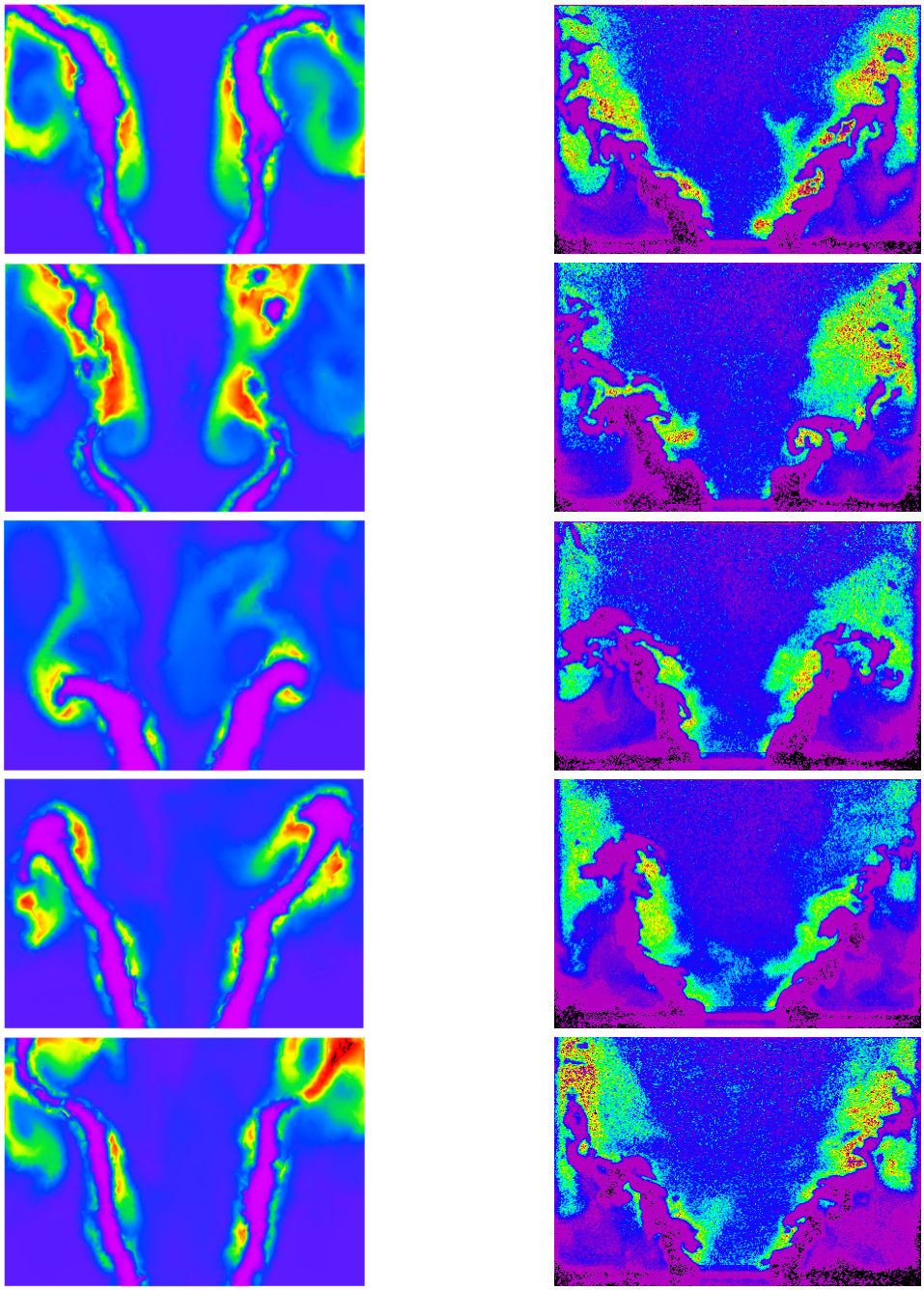

FIG. 6.12 – *Comparaison de champs de OH isntantanés issus de la LES et de l'expérience (PLIF).*

Les phenomènes observés numériquement peuvent être mis en parallèle avec les résultats expérimentaux. La figure 6.12 permet de comparer différents champs LES et expérimentaux relevés à des

instants arbitraires. On peut remarquer la correspondance entre les champs calculés et mesurés. La formation de poches est illustrée par le second jeux de figures. L'étirement des jets froids est ensuite observé, accompagné d'une diminution des niveaux de OH maximum.

La principale différence entre calcul et expérience réside dans le fait que la flamme simulée est moins perturbée que la flamme réelle. Il est ici possible que la dissipation numérique induite par les conditions du calcul influence largement ce phénomène.

6.4.4 Comparaisons des profils de vitesses moyennes et fluctuantes

Il est toujours intéressant d'évaluer les capacités de l'approche numérique employée à représenter le champs aérodynamique via l'étude des profils de vitesses moyennes et fluctuantes. On compare donc ici les profils de vitesses expérimentaux relevés en $X = 0{,}15$ cm ; 0,25 cm ; 0,5 cm ; 1,5 cm et 2,5 cm, à ceux issus des calculs FPI1, FPI3 et TFLES. Le cas LES2 n'est ici pas représenté car il conduit à des résultats identiques au cas FPI1. Ceci traduit le fait que le modèle de variance de la variable d'avancement n'a qu'une très faible influence sur le champ aérodynamique au sein de la chambre.

Les mesures expérimentales de vitesses ont été réalisées sur le cas à 27 kW (richesse 0,75) alors que le cas simulé est celui à 30 kW (ces deux cas étant stables). Différents calculs préliminaires réalisés sur les deux cas avec un modèle de combustion simple ont toutefois montré que cette différence de richesse ne modifiait que très légèrement les champs aérodynamiques simulés [12]. On supposera donc par la suite que les champs de vitesses expérimentaux et simulés sont comparables.

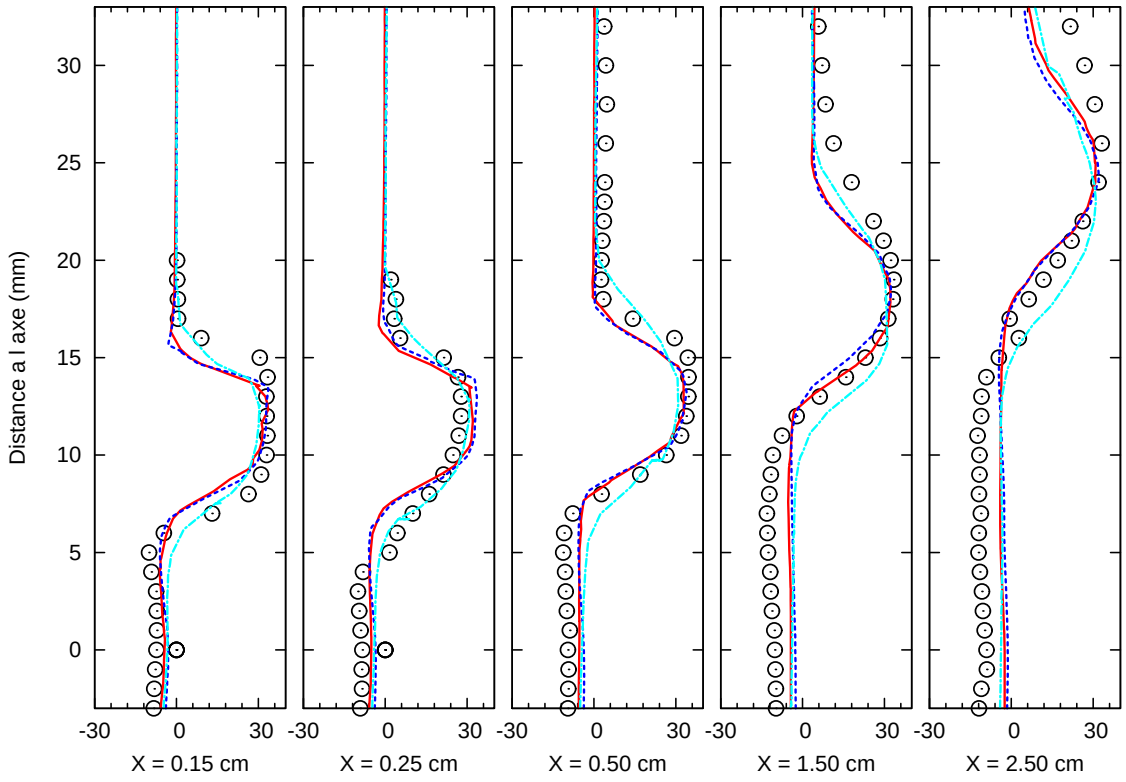

FIG. 6.13 – *Profils de $\widetilde{U}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI1 (continu rouge), FPI3 (tirets bleus) et TFLES (pointillés cyan). Les symboles représentent l'expérience à richesse 0,75.*

Les figures 6.13 et 6.14 comparent les profils de vitesses axiales moyenne et fluctuante, U''_{RMS}, définies par la relation (3.12). Les profils des autres vitesses (radiales et azimutales) sont présentés en annexes. Les vitesses moyennes sont bien reproduites à la fois quantitativement et qualitativement par

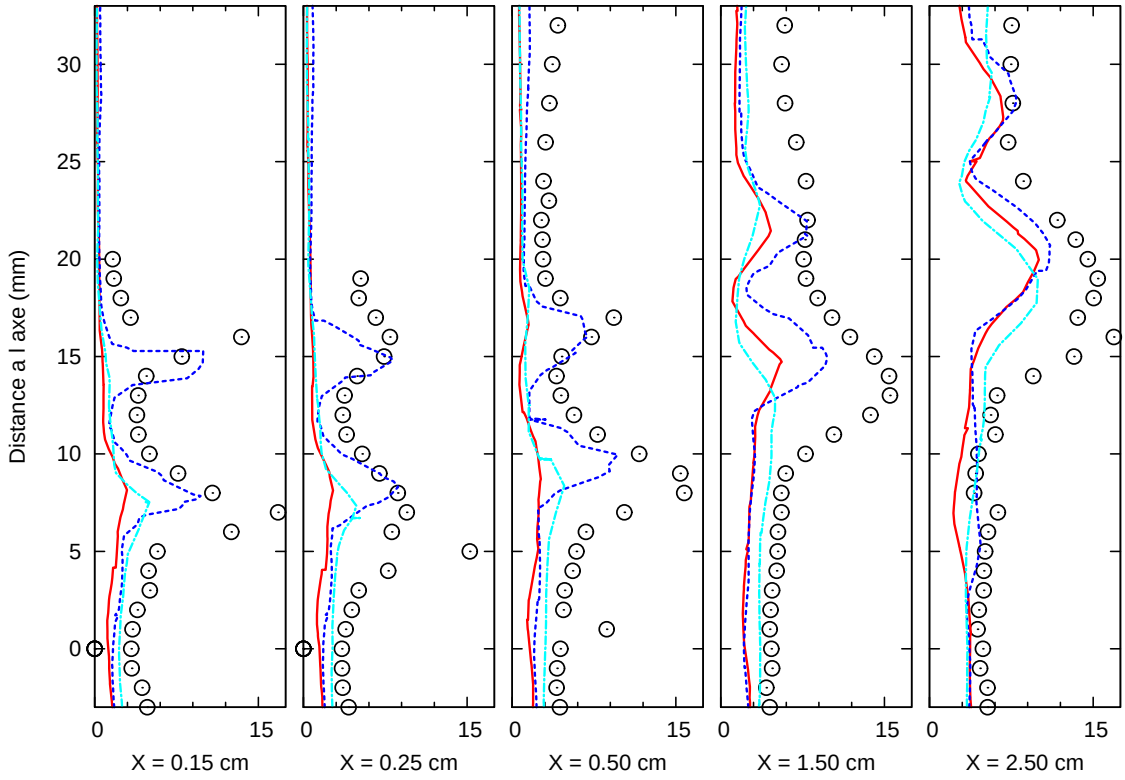

FIG. 6.14 – *Profils de U''_{RMS} à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI1 (continu rouge), FPI3 (tirets bleus) et TFLES (pointillés cyan). Les symboles représentent l'expérience à richesse 0,75.*

tous les calculs présentés. Ainsi, l'utilisation du maillage raffiné (cas LES3) n'apporte pas d'améliorations notable à la prédiction des champs de vitesses moyennes par comparaison au maillage grossier (mis à part pour $\widetilde{W}$).

On observe une forte sous-estimation des niveaux de vitesses fluctuantes obtenues par le calcul. La simulation LES3, réalisée avec le maillage fin, permet toutefois de prédire des niveaux bien meilleurs que les deux autres cas. Les écarts les plus significatifs sont obtenus près de l'entrée de la chambre, en $X = 0{,}15$ cm et $X = 0{,}25$ cm. Compte tenu du fait que le maillage PM2 est plus fin que le maillage PM1, on peut supposer que la sous-estimation des vitesses RMS observée est liée à une dissipation numérique excessive des schémas utilisés.

Cette difficulté peut être surmontée soit en raffinant le maillage dans la zone de flamme et en sortie des vrilles, soit en utilisant une méthode de discrétisation spatiale d'ordre supérieur (les travaux de Roux *et al.* [187] se fondent par exemple sur un schéma d'ordre 3, ce qui améliore la prédiction des grandeurs fluctuantes).

6.4.5 Comparaisons des profils des grandeurs chimiques moyennes

Une comparaison des profils de température moyenne et RMS, ainsi que des fractions massiques de CO_2 et de CO moyennes est ici réalisée. Des graphiques supplémentaires concernant d'autres espèces majoritaires peuvent être trouvés en annexes.

La figure 6.15 montre la localisation dans la chambre PRECCINSTA des huit sections pour lesquelles on dispose de données expérimentales. Dans ce mémoire, seuls six profils, correspondant aux sections $X = 0{,}6$ cm, $X = 1{,}5$ cm, $X = 2{,}0$ cm, $X = 3{,}0$ cm, $X = 4{,}0$ cm et $X = 6{,}0$ cm, sont exploités.

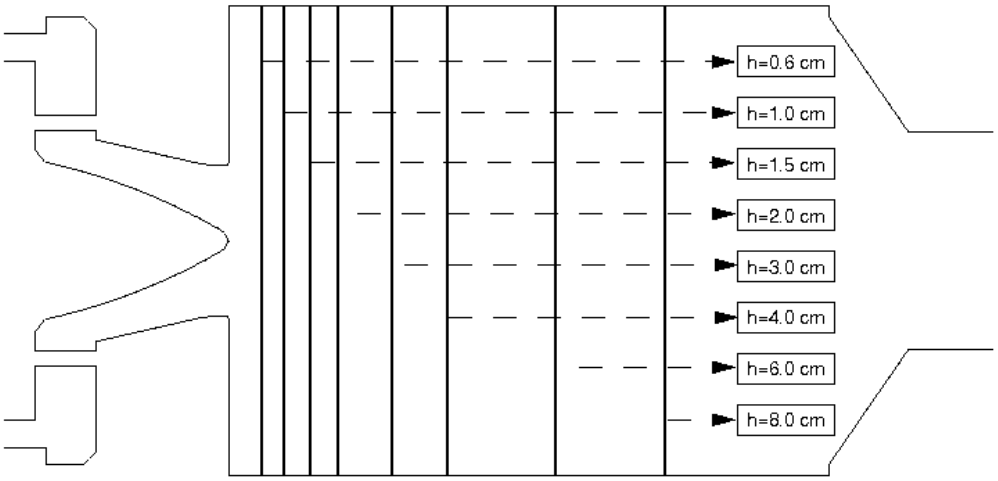

FIG. 6.15 – *Sections utilisées pour la comparaison des profils.*

Les sauts observés sur certains des profils présentés peuvent être attribués à un manque de précision des interpolations réalisées en post-traitement. Ces imprécisions sont observées aux limites entre les domaines de calcul (le maillage est découpé en 64 domaines).

Comparaison des cas FPI1 et FPI2 : influence de la constante du modèle de variance

Les résultats issus des deux simulations FPI1 et FPI2 sont comparés de manière à évaluer la sensibilité des résultats à la constante du modèle algébrique pour la variance SGS de c.

Très peu de différences sont observées sur les profils de $\widetilde{T}$ et de $\widetilde{Y_{CO_2}}$. Ainsi, comme dans le cas de la configuration de Nandula, l'approche LES se révèle être très prédictive dans la mesure où les profils des grandeurs thermochimiques moyennes ne sont que très peu influencées par la modification des caractéristiques du modèle. Une conclusion identique a été formulée par Galpin *et al.* [84] en faisant varier la constante du modèle de dissipation scalaire apparaissant dans l'équation de conservation de la variance SGS de c. On peut noter que les niveaux de la fraction massique de CO_2 et de température sont prédits correctement près de l'axe mais sont toujours surestimés à proximité de la paroi. Dans les calculs présentés ici, toutes les parois ont été considérées comme adiabatiques et on ne tient pas compte des éventuelles pertes thermiques par conduction ou rayonnement.

Des différences plus marquées sont relevées sur les profils de $\widetilde{Y_{CO}}$ et $\sqrt{\widetilde{T''^2}}$. Ainsi, l'augmentation de la variance SGS de c, qui est directement reliée à la constante C'' du modèle, provoque une diminution des pics de la fraction massique de CO. Cette tendance est comparable à celle relevée sur la configuration de Nandula. Lorsque $\widetilde{c''^2}$ est augmentée, la flamme turbulente modélisée se rapproche de la limite BML caractérisée par une PDF de c bimodale. Le mélange turbulent ne se fait alors qu'entre les gaz chauds et les gaz frais (le front de flamme est supposé infiniment mince).

Les profils de $\widetilde{Y_{CO}}$ calculés présentent deux pics bien distincts que l'on ne retrouve pas sur l'expérience. Cette tendance se retrouve sur toutes les simulations effectuées, que ce soit dans le cadre de ce travail, ou lors d'études antérieures (Galpin et al. [100], Roux et al. [187]...). La forme bimodale observée numériquement provient directement de l'existance de deux fronts de flamme à la sortie de l'injecteur (voir figure 6.9). Les profils simulés sont donc consistants avec la physique de l'écoulement, ce que confirme les bons résultats trouvés par ailleurs sur les autres grandeurs thermochimiques. On peut donc attribuer les différences observées entre calcul et expérience à l'imprécision des mesures expérimentales (on rappelle que l'incertitude de mesure sur CO s'élève à 50%).

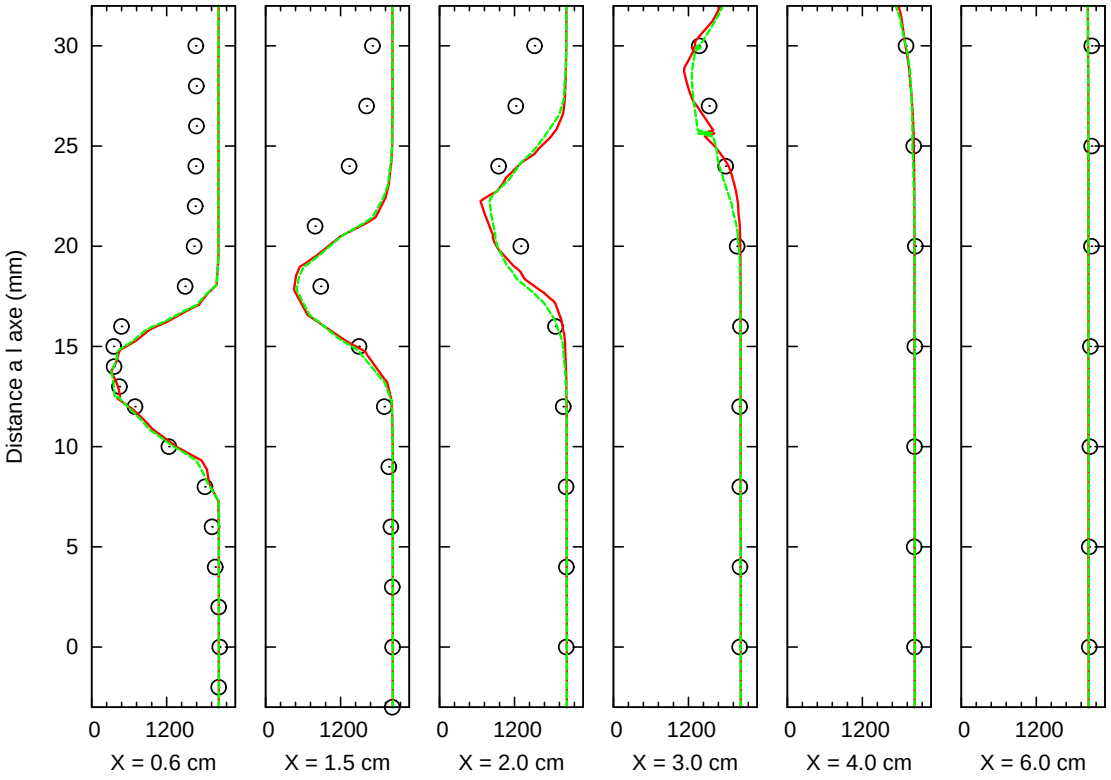

FIG. 6.16 – *Profils de $\widetilde{T}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI1 (en rouge continu) et FPI2 (tirets verts). Les symboles représentent l'expérience.*

Si l'on s'intéresse aux fluctuations RMS de température, définies par $T''_{RMS} = \sqrt{\widetilde{T''^2}}$, le cas FPI2 présente des valeurs globalement plus élevées que le cas FPI1 (les concentrations RMS des espèces majoritaires possèdent des tendances similaires). Lorsque l'on accroit la variance SGS de c, ce qui entraine une augmentation des fluctuations et du plissement du front de flamme à l'échelle sous-maille, les fluctuations des autres grandeurs thermochimiques sont modifiées en conséquence. Ainsi, les grandeurs thermochimiques RMS peuvent être facilement contrôlées par l'intermédiaire de la constante du modèle de variance. A noter que la température RMS est largement sous-estimée près des parois étant donné que les pertes thermiques ne sont pas prises en compte par le calcul.

En comparant les profils de température RMS et de vitesses RMS, on ne trouve pas *a priori* de liens entre ces grandeurs. Alors que la modélisation utilisée permet de prédire correctement les niveaux de T''_{RMS} à travers la flamme, nous avons observé une large sous-estimation des niveaux de U''_{RMS} calculés. Les deux grandeurs ne sont donc pas corrélées et le modèle de variance employé permet de retrouver des fluctuations correctes de la flamme même lorsque le champ aérodynamique fluctuant n'est pas précisément modélisé.

Dans la mesure où le cas FPI2 conduit à des résultats plus proches de l'expérience, notamment sur les fluctuations de température, on peut conclure qu'une valeur de C'' de l'ordre de 2 est adaptée aux conditions de calcul rencontrées ici.

Comparaison des cas FPI1 et FPI3 : sensibilité au maillage

On compare ici les résultats issus des deux simulations FPI1 et FPI3 de façon à évaluer la sensibilité des résultats au maillage (les modèles physiques et numériques employés pour ces deux cas sont identiques).

Les profils de température et de $\widetilde{Y_{CO_2}}$ sont présentés respectivement figures 6.20 et 6.21. Les écarts

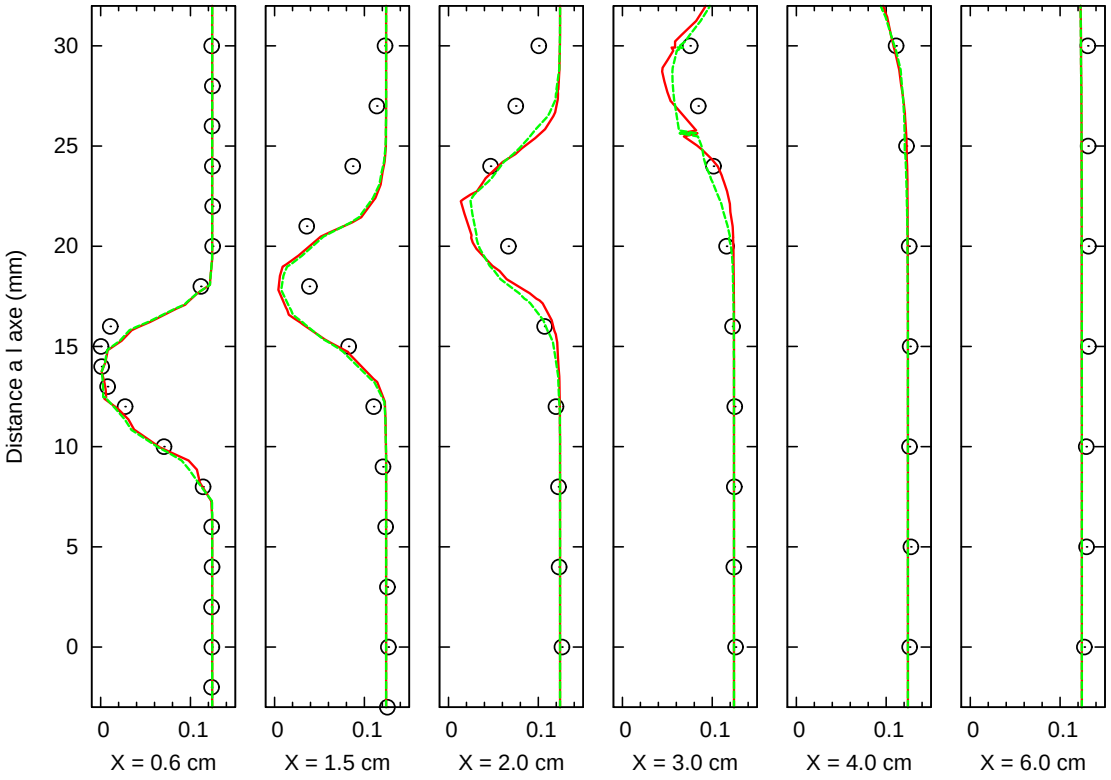

FIG. 6.17 – *Profils de $\widetilde{Y_{CO_2}}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI1 (en rouge continu) et FPI2 (tirets verts). Les symboles représentent l'expérience.*

observés entre les cas FPI1 et FPI3 sur ces deux grandeurs sont très faibles. Les figures montrent un léger décalage des résultats vers les gaz brûlés dans le cas FPI3 (en $X = 1{,}5$ cm et $X = 2$ cm), mais ces différences restent non significatives.

La figure 6.22 présente une comparaison des profils moyens de fraction massique de CO. On note, à partir de $X = 1{,}5$ cm, une diminution des niveaux maximum prédits par le cas FPI3 par rapport à FPI1. De la même manière que lorsque la variance SGS de c est augmentée, le raffinement du maillage permet de se rapprocher des résultats expérimentaux.

Sur la figure 6.23, on note une amélioration des niveaux maximum de T''_{RMS} prédits par CEDRE avec le maillage raffiné. Les comparaisons effectuées sur ces graphiques ne considèrent en fait que la partie résolue de T''_{RMS} (voir chapitre 3), qui est fortement influencée par le maillage. Notamment, lorsque celui-ci est suffisamment fin, la contribution des fluctuations de température résolues aux fluctuations totales se rapproche de 100%, ce qui semble être le cas ici.

Comme pour CO, les tendances observées lorsque le maillage est raffiné sont identiques à celles obtenues lorsque la variance SGS de c est augmentée. Ces résultats sont cohérents avec le rôle que doit avoir le modèle de variance puisque celui-ci permet, via l'ajustement de la constante, de compenser la sous-résolution du maillage.

Cette analyse peut être complétée par l'étude de deux critères définis ci-dessous :

- le premier, appelé critère de Pope (voir Boudier *et al.* [21]) permet de comparer la partie sous maille des flux turbulents et leur partie résolue :

$$M = \frac{k_{SGS}}{k_{SGS} + k_{resol}}, \tag{6.5}$$

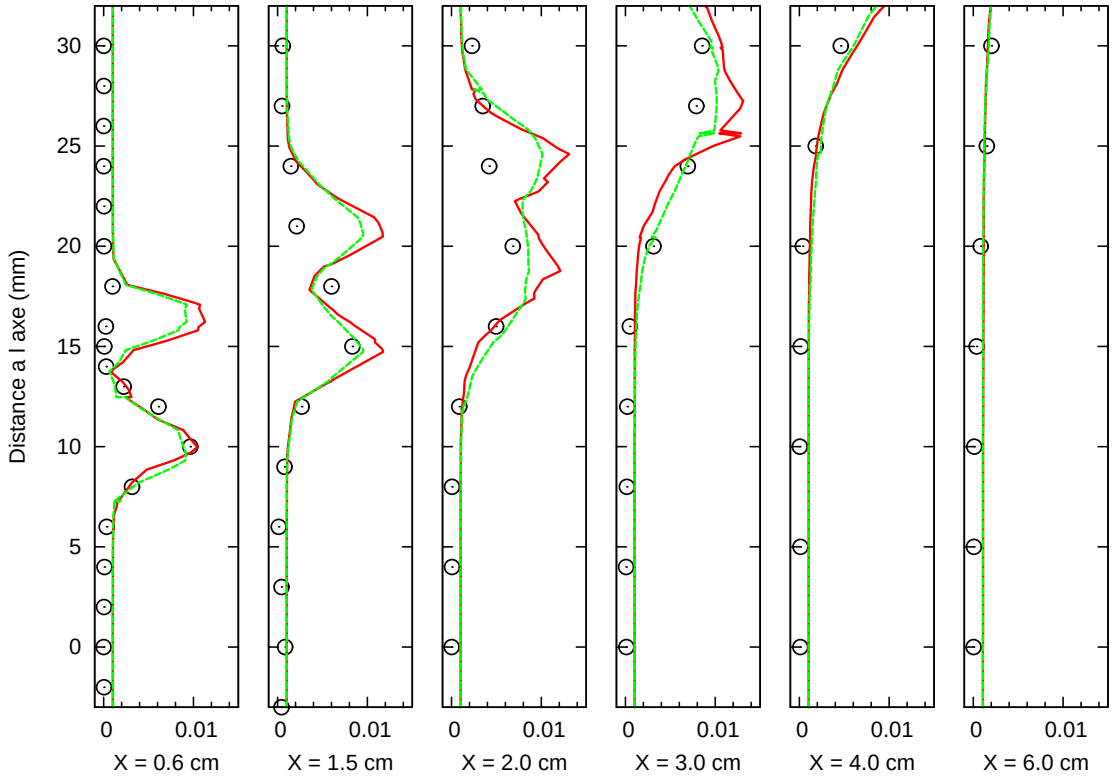

FIG. 6.18 – *Profils de $\widetilde{Y_{CO}}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI1 (en rouge continu) et FPI2 (tirets verts). Les symboles représentent l'expérience.*

avec k_{SGS} défini par Sagaut [190] de la manière suivante :

$$k_{SGS} = \left(\frac{\nu_{SGS}}{C_m \Delta}\right)^2. \tag{6.6}$$

La viscosité turbulente de sous-maille ν_{SGS} est évaluée par le modèle de Smagorinsky, et C_m est une constante fixée à environ $0,069$. La partie résolue, k_{resol}, est déterminée par :

$$k_{resol} = \frac{1}{2}\left(\widetilde{u_i u_i} - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_i\right); \tag{6.7}$$

- par analogie avec M, un nouveau critère est introduit dans ce travail pour comparer la partie résolue et la partie sous-maille de la variance du scalaire réactif c. Ce critère permet d'évaluer le niveau de résolution du maillage par rapport aux fluctuations du front de flamme turbulent :

$$M_c = \frac{\widetilde{c''^2}_{SGS}}{\widetilde{c''^2}_{SGS} + \widetilde{c''^2}_{resol}}, \tag{6.8}$$

où $\widetilde{c''^2}_{SGS}$ est donnée par le modèle de variance. $\widetilde{c''^2}_{resol}$ n'est pas accessible directement dans le calcul et doit donc être retrouvée *a posteriori*. Pour cela, on utilise $\widetilde{T^2}$ qui permet d'évaluer les fluctuations résolues de c par adimensionalisation (on fait ici l'hypothèse que la variable d'avancement peut être également définie à partir de la température) :

$$\widetilde{c''^2}_{resol} = \frac{\widetilde{T^2} - \widetilde{T}\widetilde{T}}{(T_b - T_u)^2}. \tag{6.9}$$

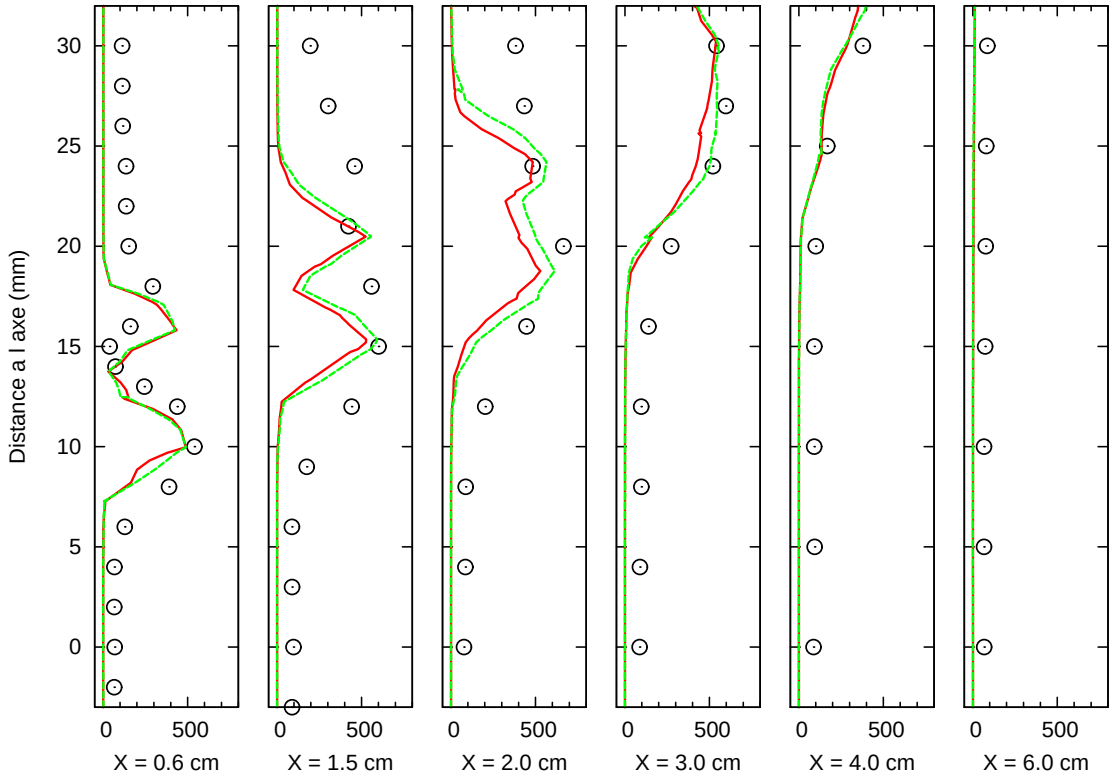

FIG. 6.19 – *Profils de* $\sqrt{\widetilde{T''^2}}$ *à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI1 (en rouge continu) et FPI2 (tirets verts). Les symboles représentent l'expérience.*

Les figures 6.24 présentent une comparaison de champs moyens du critère de Pope calculés dans les cas FPI1 et FPI3. De la même manière, les figures 6.25 présentent des champs du critère M_c.

Les champs du critère de Pope tracés pour les maillages PM1 et PM2 sont très proches. Les niveaux dans les deux cas sont faibles ce qui permet d'affirmer que les deux maillages sont relativement bien résolus dans la chambre d'un point de vue aérodynamique. Les écarts les plus importants entre les deux maillages sont relevés dans le canal conique débouchant dans la chambre. Les maillages semblent donc insuffisamment raffinés dans cette région, ce qui tend à confirmer les observations faites précédemment lors de la comparaison des profils de fluctuations de vitesses.

Des différences très marquées entre les deux maillages sont observées lorsque l'on compare les champs du critère M_c. Dans le cas du maillage grossier, le critère reste proche de 1 sur l'ensemble de la zone de flamme, ce qui indique qu'une grande partie des fluctuations de la variable d'avancement intervient à l'échelle sous-maille. Le second maillage présente des niveaux de M_c plus faibles et semble donc beaucoup mieux adapté (ceci confirme les conclusions formulées à partir des profils de $\sqrt{\widetilde{T''^2}}$).

Comparaison des cas FPI3, ARRH et TFLES : influence du modèle de combustion

On se propose ici de comparer les résultats issus des simulations FPI3, ARRH et TFLES. On considère par la suite que les maillages PM2 et PM3 sont suffisamment proches en terme de densité de mailles pour pouvoir effectuer des comparaisons pertinentes entre ces trois calculs.

Les figures 6.26 et 6.27 permettent de visualiser l'effet du modèle de combustion turbulente sur les grandeurs chimiques moyennes. De manière générale, les niveaux de température et de fraction massique de CO_2 moyens après combustion sont équivalents suivant tous les modèles. En $X = 2$ cm et $X = 4$ cm, les niveaux minimums de ces grandeurs atteints avec FPI sont inférieurs aux autres cas.

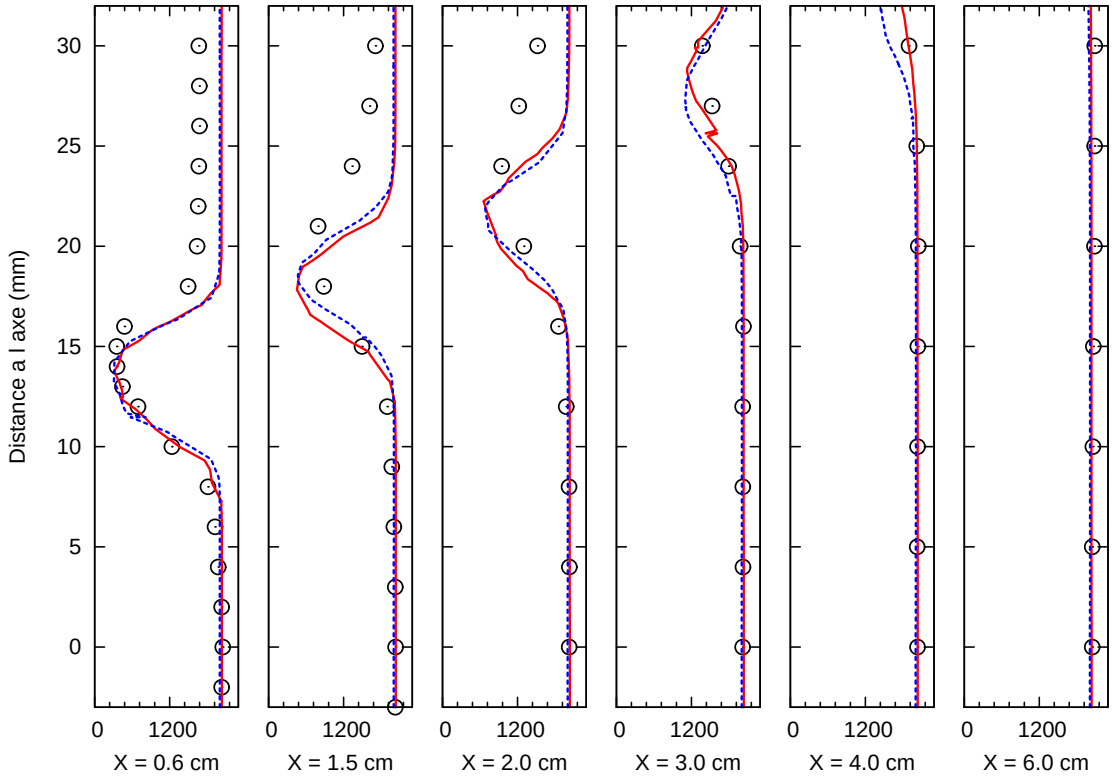

FIG. 6.20 – *Profils de $\widetilde{T}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI1 (rouge continu) et FPI3 (bleu pointillé). Les symboles représentent l'expérience.*

Avec les autres modèles, les gaz frais sont donc consommés plus rapidement qu'avec FPI.

Les figures 6.28, présentant les profils de fraction massique de CO, révèlent l'incapacité du modèle pseudo-laminaire à retrouver des niveaux corrects pour cette espèce. Suivant cette approche, aucun modèle de combustion turbulente n'est appliqué pour déterminer les taux de réaction chimiques filtrés des espèces. Le modèle TFLES, qui utilise le même mécanisme cinétique que le cas ARRH, permet en revanche de retrouver des niveaux identiques au modèle FPI, jusqu'en $X = 2$ cm. Derrière, le cas TFLES sous-estime la production de CO par rapport à FPI. Cette comparaison, met en évidence la nécessité de la prise en compte des interactions chimie/turbulence pour prédire avec exactitude la formation des espèces intermédiaires.

Les profils de température RMS montrent que le modèle TFLES a tendance à sous-estimer les niveaux mesurés expérimentalement. En fait, en épaississant artificiellement le front de flamme, on modifie également sa dynamique en amortissant ses battements. Les interactions entre chimie et turbulence dépendent en effet directement du rapport entre les longeurs caractéristiques des structures tourbillonnaires et de l'épaisseur de la flamme. Par ailleurs, le modèle pseudo-laminaire permet de retrouver des niveaux de fluctuations comparables à l'expérience et au calcul FPI.

En conclusion, le modèle FPI permet de retrouver des niveaux de CO à travers la flamme corrects (comme le modèle TFLES), tout en prédisant des niveaux de fluctuations identiques à l'expérience (tout comme le modèle pseudo-laminaire). Le modèle FPI apporte donc une modélisation plus fine et plus complète que les deux autres approches testées.

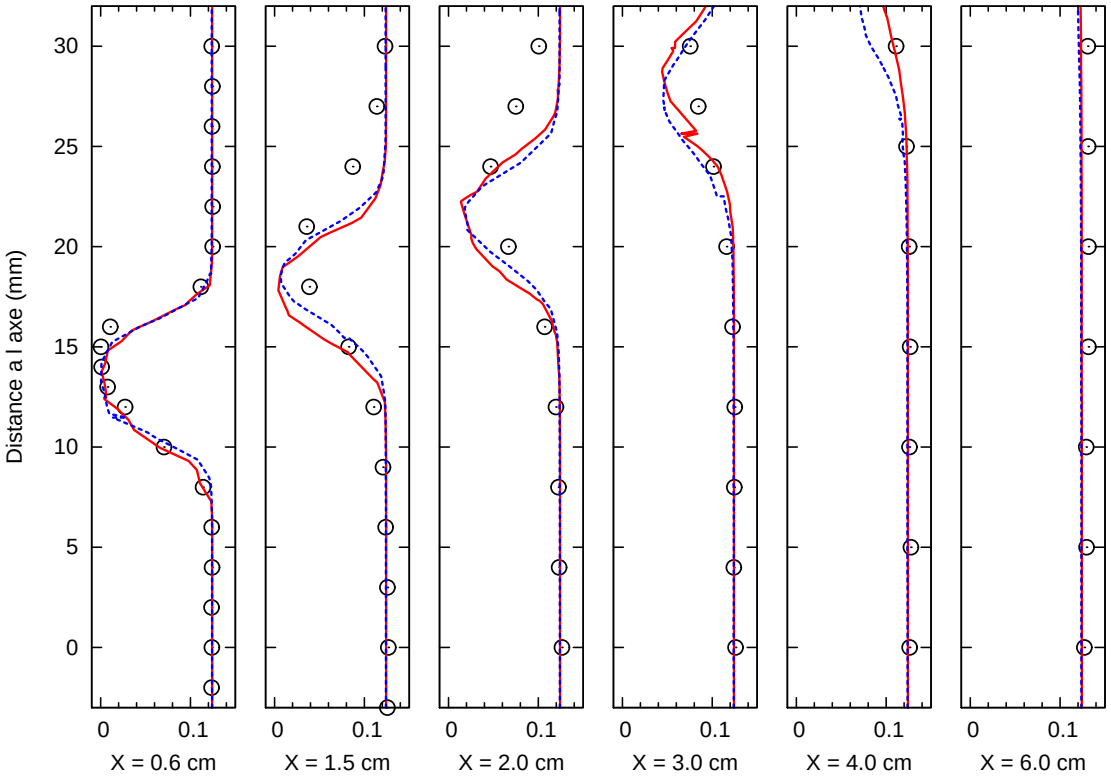

FIG. 6.21 – *Profils de $\widetilde{Y_{CO_2}}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI1 (rouge continu) et FPI3 (bleu pointillé). Les symboles représentent l'expérience.*

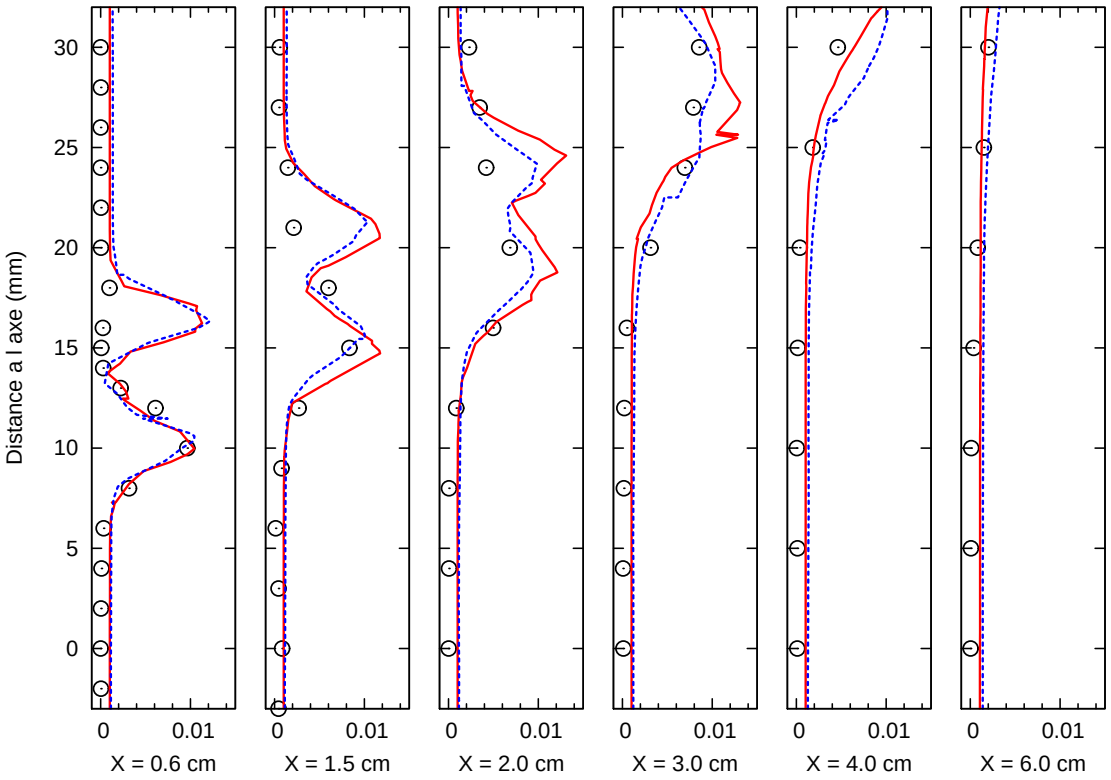

FIG. 6.22 – *Profils de $\widetilde{Y_{CO}}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI1 (rouge continu) et FPI3 (bleu pointillé). Les symboles représentent l'expérience.*

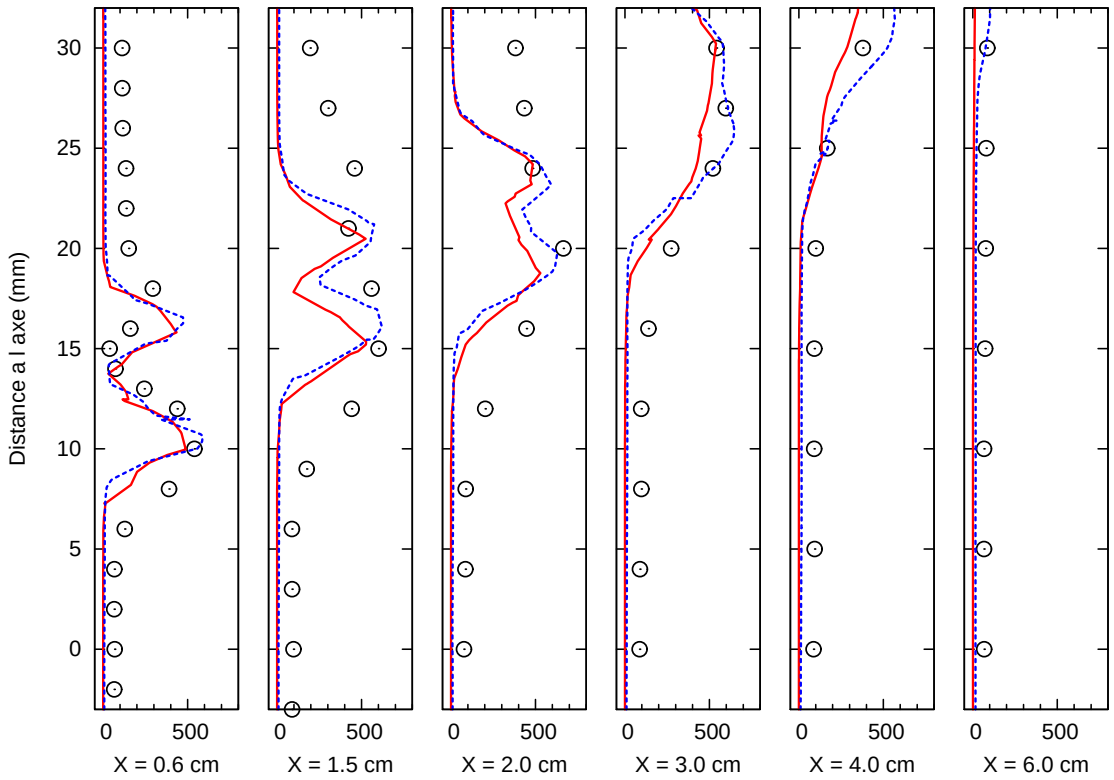

FIG. 6.23 – *Profils de* $\sqrt{\widetilde{T''^2}}$ *à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI1 (rouge continu) et FPI3 (bleu pointillé). Les symboles représentent l'expérience.*

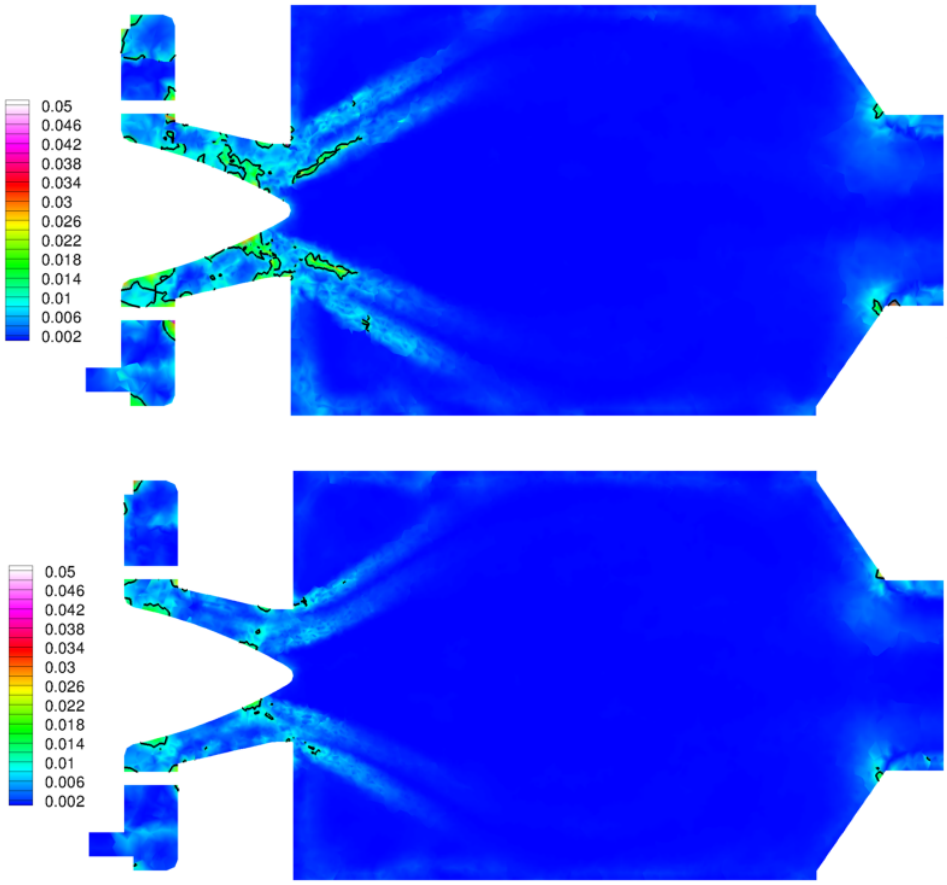

FIG. 6.24 – *Comparaison de champs moyens du critère de Pope évalués sur les cas LES FPI1 et FPI3 (avec iso-contours en $M = 0{,}01$).*

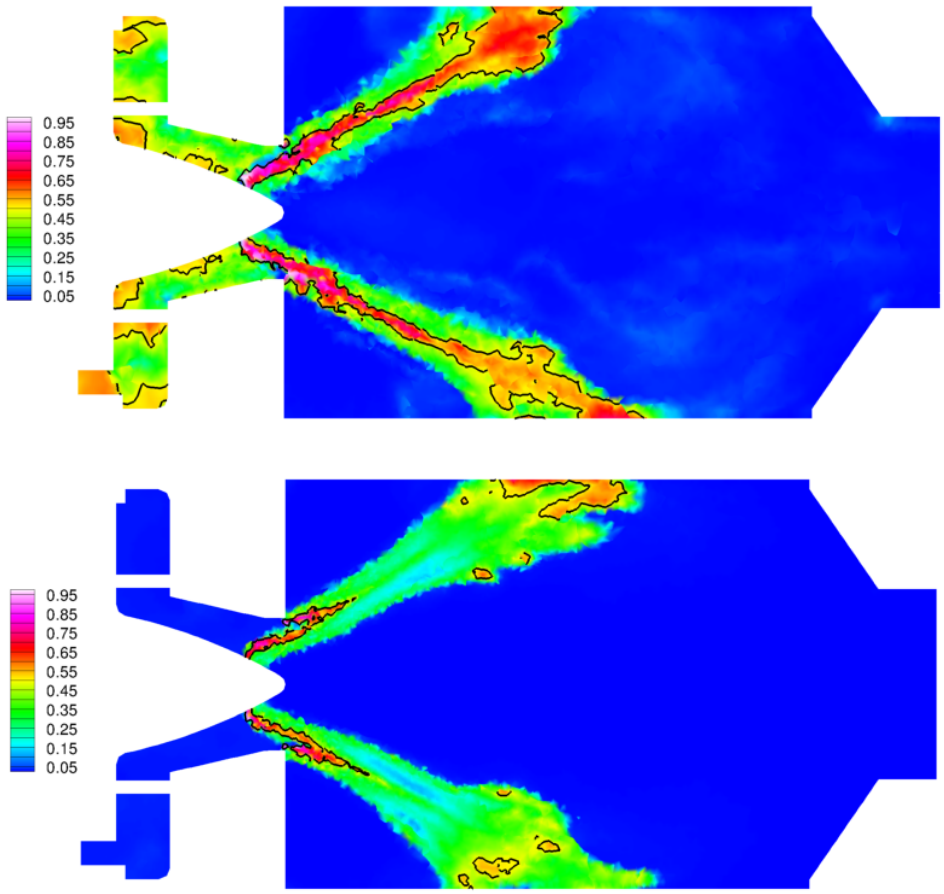

FIG. 6.25 – *Comparaison de champs moyens du critère M_c pour le scalaire réactif évalués sur les cas LES FPI1 et FPI3*

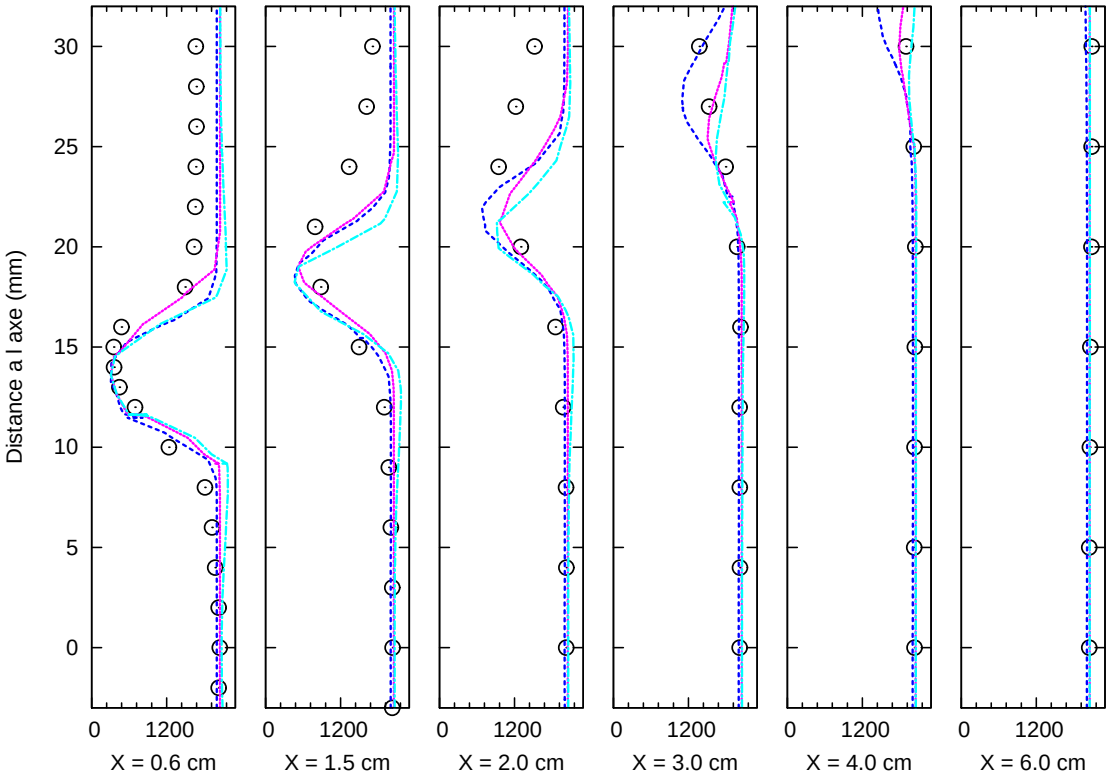

FIG. 6.26 – *Profils de $\widetilde{T}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI3 (bleu pointillés), ARRH (rose continu) et TFLES (cyan tirets). Les symboles représentent l'expérience.*

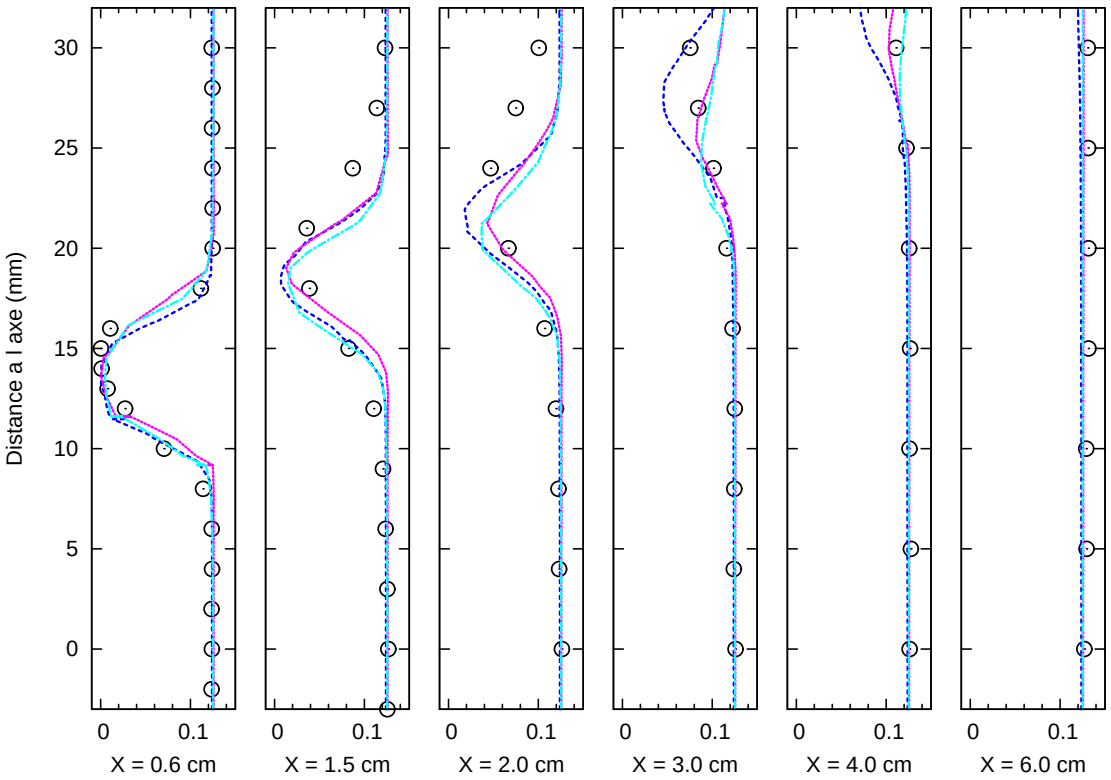

FIG. 6.27 – *Profils de $\widetilde{Y_{CO_2}}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI3 (bleu pointillés), ARRH (rose continu) et TFLES (cyan tirets). Les symboles représentent l'expérience.*

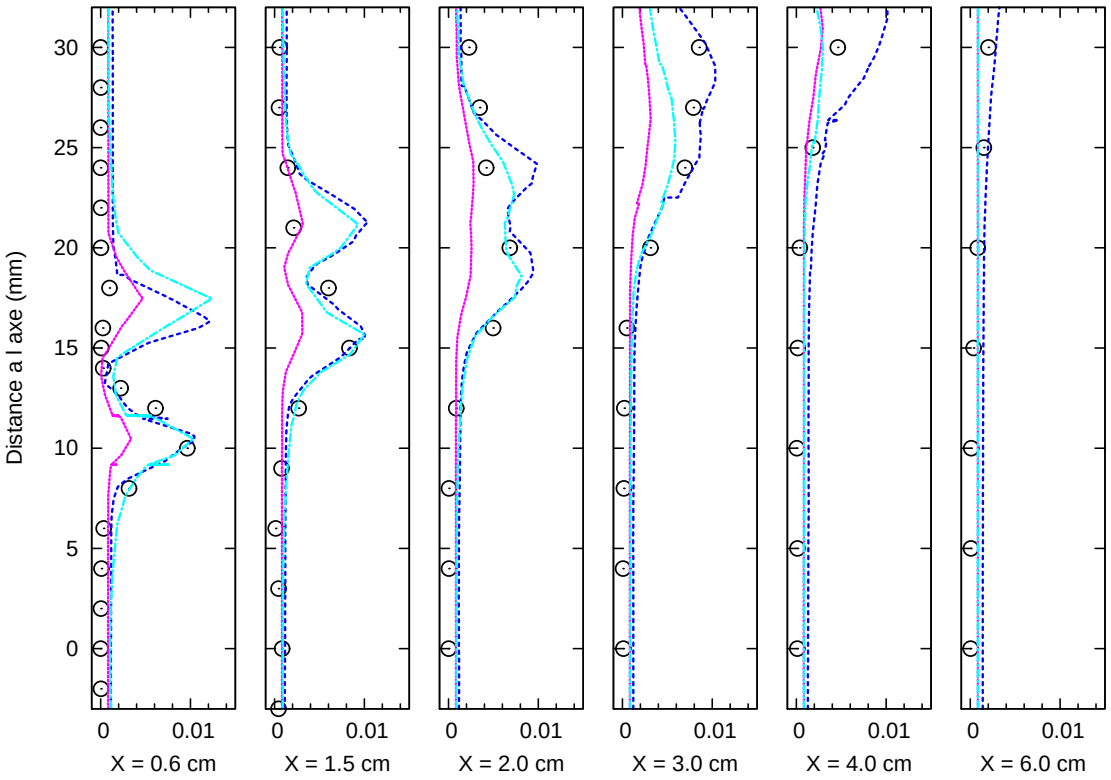

FIG. 6.28 – *Profils de $\widetilde{Y_{CO}}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI3 (bleu pointillés), ARRH (rose continu) et TFLES (cyan tirets). Les symboles représentent l'expérience.*

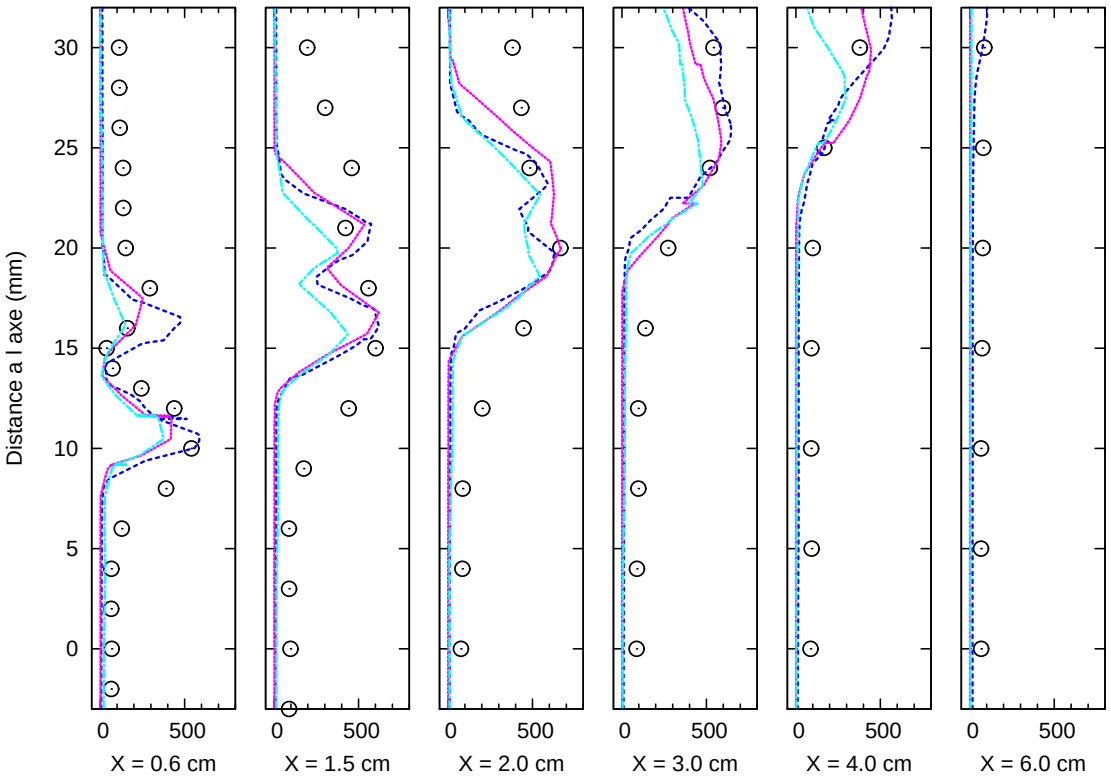

FIG. 6.29 – *Profils de $\sqrt{\widetilde{T''^2}}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI3 (bleu pointillés), ARRH (rose continu) et TFLES (cyan tirets). Les symboles représentent l'expérience.*

6.5 Simulation de la configuration partiellement prémélangée

6.5.1 Objectifs

Les travaux expérimentaux de Meier *et al.* [146] ont conduit à remettre en question l'hypothèse d'écoulement parfaitement prémélangé généralement réalisée lors de la simulation numérique de la chambre PRECCINSTA. Les auteurs ont en effet montré que de fortes inhomogénéités de mélange pouvaient exister en entrée de chambre, ce qui modifie sensiblement le comportement de la flamme. Bien que les calculs réalisés au cours de cette thèse et ceux présentés dans la littérature (Roux *et al.* [187], Galpin *et al.* [84]) tendent à prouver que cette hypothèse permet de restituer des résultats tout à fait comparables à l'expérience, l'influence des inhomogénéités de mélange sur la flamme et la formation des polluants ne doit toutefois pas être négligée. Notons qu'un travail similaire a été mené récemment par Albouze [6] à l'aide du modèle de flamme épaissie.

Par ailleurs, les constructeurs aéronautiques s'acheminent actuellement vers des technologies de chambre opérant sous des conditions de prémélange partiel. Dans ce cadre, il apparaît nécessaire de valider de manière approfondie l'extension du modèle FPI implanté dans CEDRE à ce type de flammes. Le but du travail proposé ici est donc double puisqu'il permet d'une part d'évaluer l'influence du mélange sur la combustion dans la chambre PRECCINSTA et d'autre part de valider le modèle dans un contexte plus général en vue d'applications industrielles.

L'hypothèse de prémélange parfait réalisée jusqu'à présent a principalement permis de simplifier considérablement les simulations :

- le fait de ne pas tenir compte du mélange permet de se débarrasser d'un paramètre supplémentaire (la fraction de mélange),
- la géométrie simulée en configuration prémélangée ne comporte pas les douze tubes millimétriques d'injection du carburant, ce qui simplifie et réduit sensiblement le maillage.

6.5.2 Conditions limites et maillage pour le cas partiellement prémélangé

Les simulations effectuées sur la configuration PRECCINSTA réelle sont réalisées à partir d'une géométrie incluant les douze tubes d'injection du carburant dans les vrilles. Ces tubes sont précédés d'un plenum anulaire dans lequel le méthane pur est injecté de façon radiale avec un débit fixé de 6.10^{-4} kg.s^{-1}. Un détail de la géométrie au niveau du plenum de carburant est représenté figure 6.30 (le plenum est représenté en coupe).

Le maillage de la chambre en configuration partiellement prémélangée possède les mêmes caractéristiques de raffinement que le maillage grossier utilisé dans le cas parfaitement prémélangé (voir figure 6.31). La région où chaque tube débouche dans les vrilles a par ailleurs été raffinée de manière à résoudre les premiers instants du mélange entre le carburant et l'air. Une vue rapprochée de cette zone est présentée sur la figure 6.32. Au total, le maillage employé ici est constitué d'environ 2,1 millions de cellules.

Pour assurer la conservation du débit de carburant injecté dans les vrilles, il est nécessaire de mailler suffisamment les tubes millimétriques. Dans notre cas, nous avons choisi d'inclure environ quatre mailles dans le diamètre de chaque tube, ce qui représente une douzaine de cellules par section. Ces cellules sont les plus petites rencontrées sur le maillage et possèdent un diamètre équivalent de l'ordre de 0,18 mm. Les caractéristiques du maillage sont résumées dans le tableau 6.7.

Meshes	Nb. cellules	Nb. faces	Plus petite maille
PPM1	2 075 000	4 210 000	0,18 mm

TAB. 6.7 – *Récapitulatif des caractéristiques du maillage utilisé pour la configuration PRECCINSTA complète.*

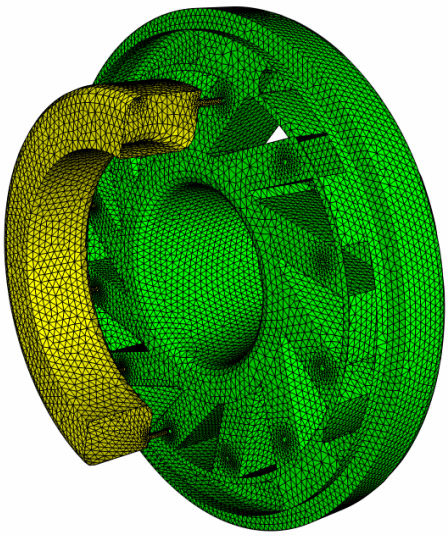

FIG. 6.30 – *Représentation en coupe du plenum d'injection du carburant et des douze tubes amenant le carburant dans les vrilles.*

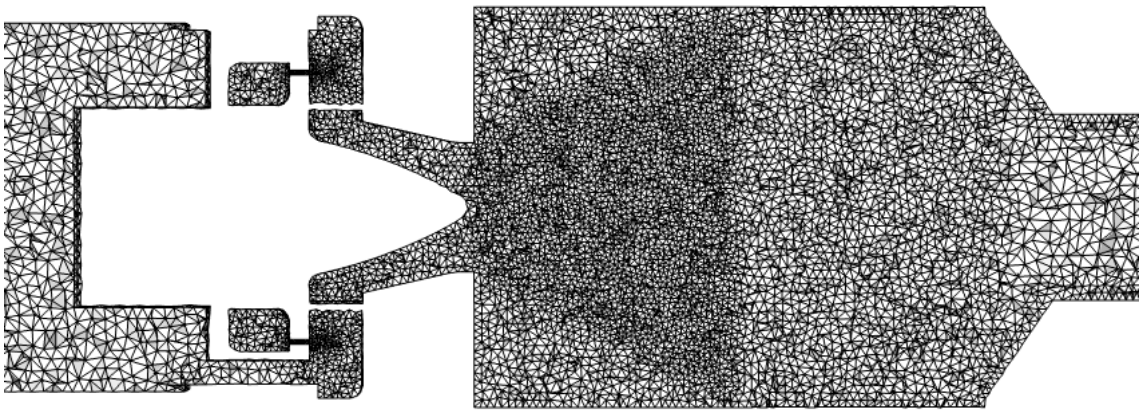

FIG. 6.31 – *Coupe dans le plan z du maillage utilisé sur la configuration PRECCINSTA complète. Ici, l'atmosphère n'est pas représentée.*

6.5.3 Détails numériques sur la simulation

Compte tenu de la taille importante du maillage et des faibles pas de temps qui doivent être utilisés, une unique simulation a été menée sur ce cas.

Le pas de temps explicite maximum que l'on peut employer sur ce maillage est limité par la taille des plus petites cellules situées dans les tubes d'injection du carburant. En tenant compte du critère CFL, le pas de temps a été fixé à 9.10^{-8} s.

Les variances SGS de z et de c ont été évaluées via les relations algébriques déterminées au chapitre 3. La dissipation du scalaire réactif a été modélisée via le modèle de Vervisch *et al.* [220] et la dissipation du scalaire passif via le modèle de relaxation linéaire. Pour ces deux scalaires, la constante du modèle de variance a été fixée à l'unité.

La table bidimensionnelle utilisée au cours du calcul a été créé à l'aide du mécanisme de Smooke et Giovangigli [203] incluant 16 espèces, afin que sa taille reste raisonnable. Elle comporte 49 richesses différentes, et chaque flamme est discrétisée par 180 points suivant c. La table est de plus discrétisée en considérant 18 points suivant les variances SGS de z et de c. Au total, elle contient donc $2 \times 16 \times 49 \times 180 \times 18 \times 18 \approx 91{,}5$ millions de réels double précision, et occupe environ 1,5 Go de mémoire.

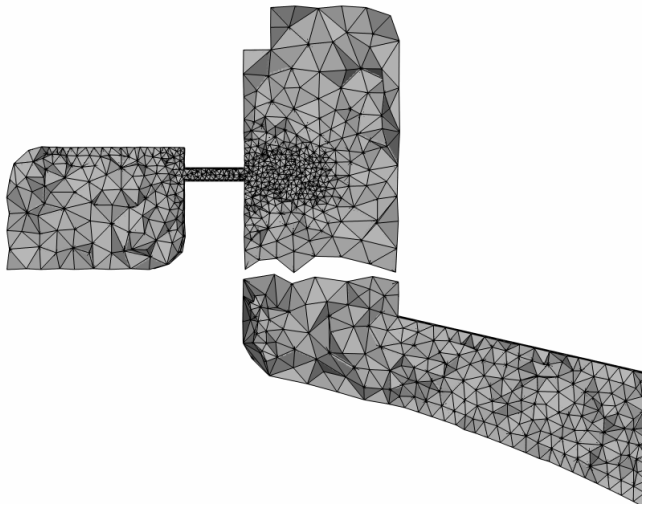

FIG. 6.32 – *Représentation en coupe du maillage autour de la zone d'injection du carburant dans les vrilles.*

6.6 Résultats de calcul sur la configuration partiellement prémélangée

La figure 6.33 présente un champ de température moyenne. Faute de temps, ces moyennes n'ont pas pu être convergées complètement, mais les résultats montrent toutefois des tendances représentatives de l'évolution de la flamme.

Contrairement au cas parfaitement prémélangé, la flamme brûle beaucoup moins vite et se prolonge jusqu'à la paroi de la chambre. Ce phénomène est particulièrement mis en évidence sur les profils présentés ci-après. Mis à part cette différence importante, la structure de la flamme reste identique au cas précédemment étudié.

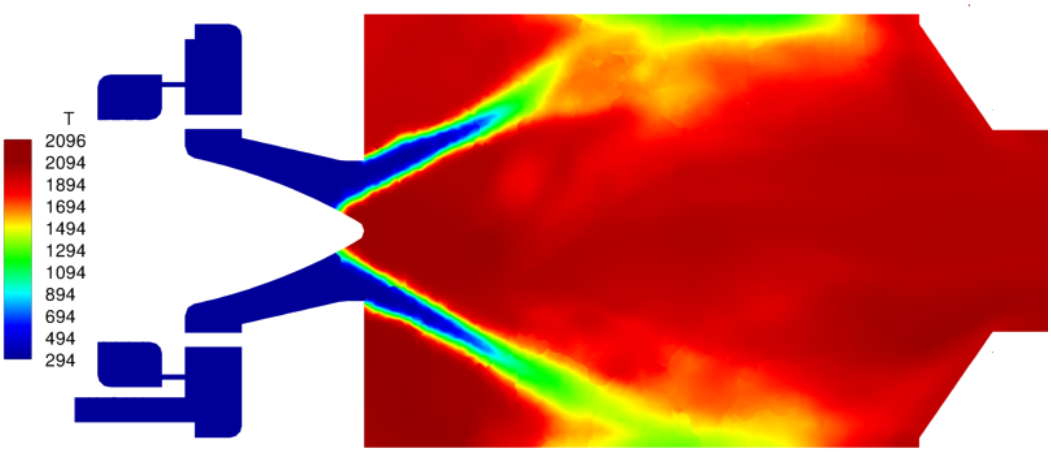

FIG. 6.33 – *Champ moyen de température obtenu par le calcul sur la configuration PRECCINSTA en prémélange partiel.*

6.6.1 Comparaison des profils des grandeurs moyennes

Dans un premier temps, on compare les profils de vitesses axiales moyenne $\widetilde{U}$ et fluctuante U''_{RMS} issus du calcul PRECCINSTA partiellement prémélangé aux résultats du calcul parfaitement prémé-

langé FPI1 (maillage grossier). Ces profils sont regroupés figures 6.34 et 6.35.

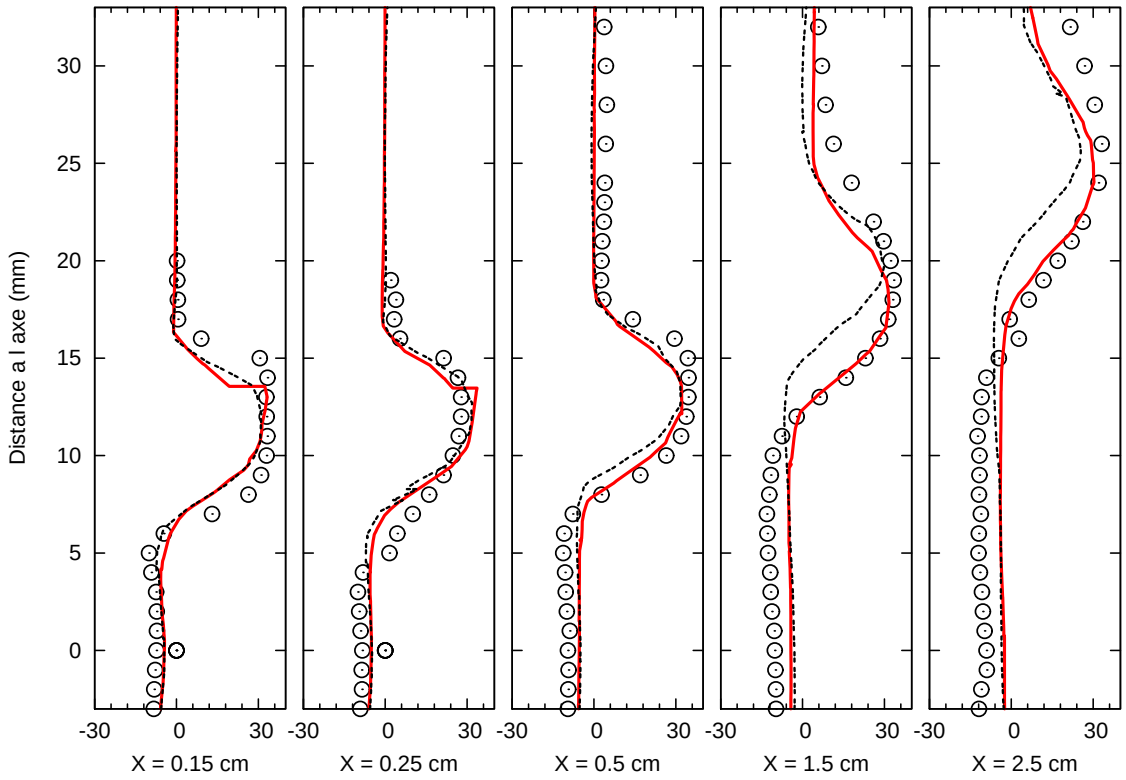

FIG. 6.34 – *Profils de $\widetilde{U}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondant au cas FPI1 parfaitement prémélangé (rouge) et au cas partiellement prémélangé (tirets gris).*

Les profils obtenus sur le cas partiellement prémélangé présentent un décalage comparés aux profils issus du calcul parfaitement prémélangé. Ces décalages sont particulièrement visibles sur la grandeur U''_{RMS}. On remarque par ailleurs que les niveaux de U''_{RMS} restitués par le calcul sont toujours légèrement sous-estimés au sein de la flamme, à la fois en prémélange parfait et en prémélange partiel.

La figure 6.36 représente un champ de critère de Pope M (voir relation (6.5)) correspondant à l'écoulement étudié. Ce champ est à mettre en parallèle avec ceux obtenus en prémélange parfait figure 6.24. Les niveaux de M obtenus peuvent être situés entre les cas FPI1 et FPI3 (maillage fin), ce qui tend à confirmer que la qualité du maillage employé ici n'est pas suffisante pour pouvoir restituer correctement les fluctuations turbulentes de l'écoulement.

Les figures 6.37 et 6.38 présentent les profils de température et de fraction massique de CO_2 moyens obtenus sur la chambre PRECCINSTA complète. Les profils des fractions massiques de O_2 et de H_2O sont omis car ils présentent des tendances identiques. Une anomalie renonctrée lors du calcul n'a malheureusement pas permis de tracer les profils de la fraction massique de CO qui ne sont donc pas présentés ici.

De manière analogue aux vitesses, les profils des grandeurs thermochimiques présentent un décalage comparé au cas parfaitement prémélangé et les résultats issus du calcul partiellement prémélangé semblent en meilleur accord avec l'expérience. Ainsi, en prenant en compte le mélange entre carburant et oxydant en amont de la chambre, la position de la flamme est mieux restituée que lorsque l'on pose l'hypothèse de prémélange parfait.

A partir de $X = 4$ cm, les profils tracés sur le cas présent sont très bruités. En effet, d'une part on a remarqué précédemment, sur le champ 6.33, que la flamme continue à brûler à proximité des parois de la cambre, et d'autre part, faute de temps, le temps physique simulé sur ce cas est inférieur à ceux choisis pour les autres calculs présentés (environ 0,012 s, contre 0,022 s précédemment). La

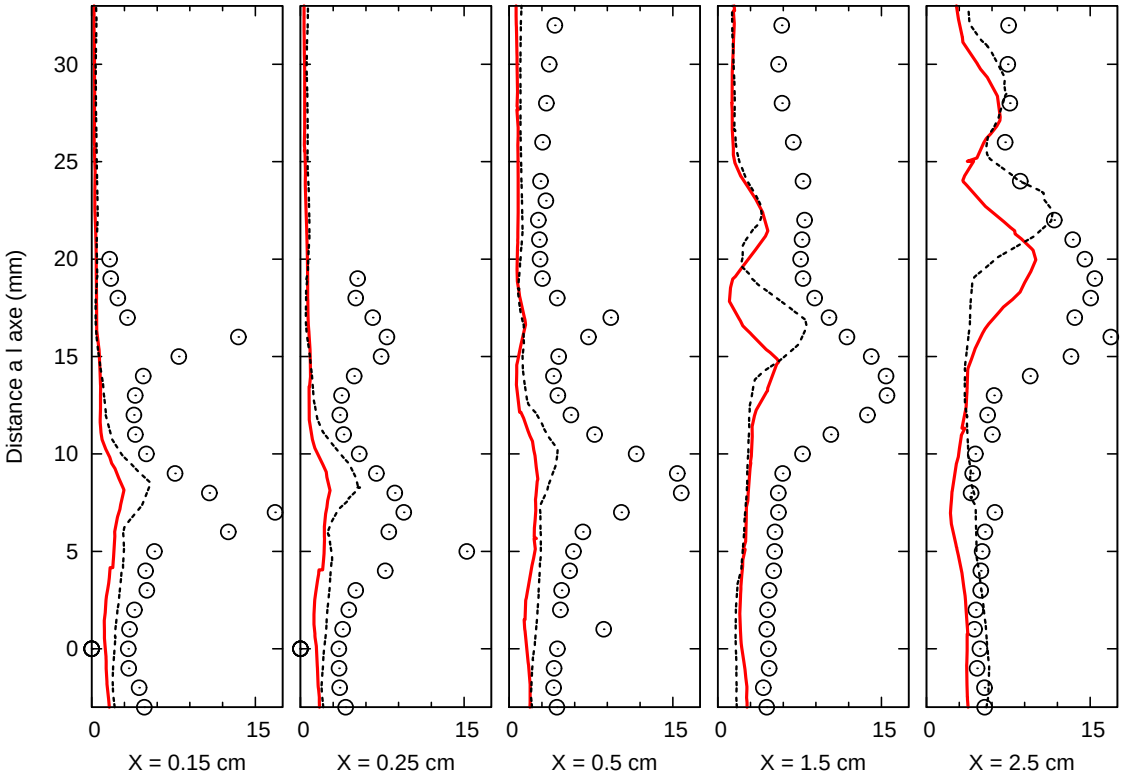

FIG. 6.35 – *Profils de U''_{RMS} à travers la chambre PRECCINSTA correspondant au cas FPI1 parfaitement prémélangé (rouge) et au cas partiellement prémélangé (tirets gris).*

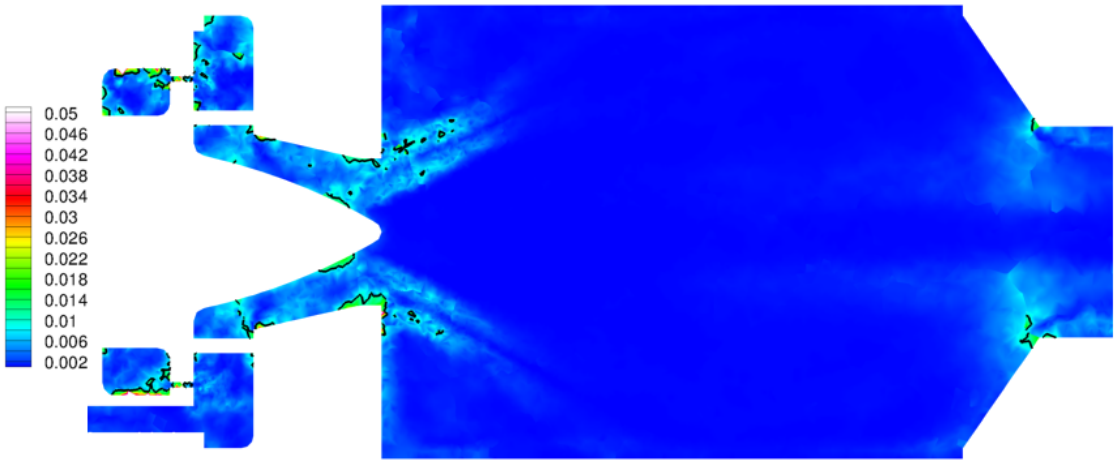

FIG. 6.36 – *Champ du critère de Pope tracé pour l'écoulement partiellement prémélangé (avec iso-contours en $M = 0{,}01$).*

convergence des données moyennes n'est donc pas observées partout dans la chambre, en particulier loin de l'entrée, là où l'écoulement circule avec des vitesses relativement faibles.

Les profils tracés figure 6.39 présentent l'évolution de la température RMS. Au sein de la zone de flamme, les niveaux de T''_{RMS} sont identiques quel que soit le cas étudié. Ceci confirme le fait que la qualité du maillage est similaire dans les deux cas. Plus loin dans la chambre, les profils sont là encore fortement bruités. Il est à noter que les grandeurs fluctuantes (moments statistiques du second ordre) convergent généralement plus lentement que les grandeurs moyennes.

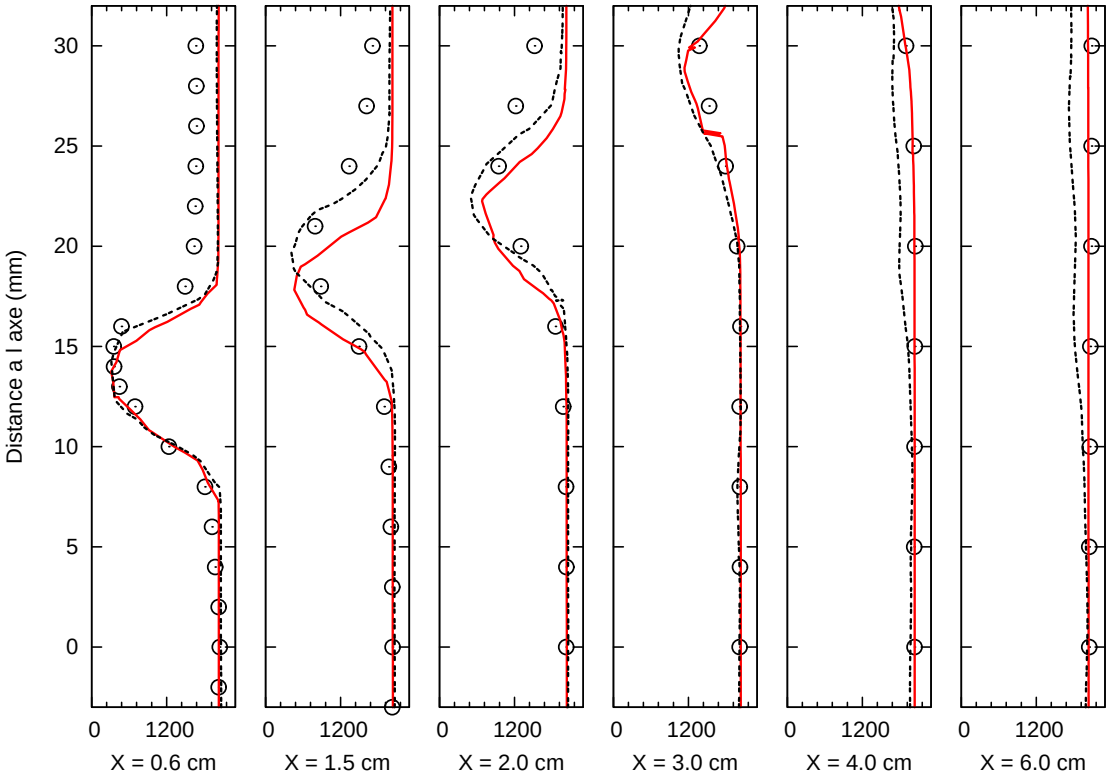

FIG. 6.37 – *Profils de $\widetilde{T}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondant au cas FPI1 parfaitement prémélangé (rouge) et au cas partiellement prémélangé (tirets gris).*

6.6.2 Etude du mélange instantané

On étudie ici des profils et des champs instantanés de fraction de mélange en fonction de l'angle de phase. Les différents instants comparés sont repérés sur la figure 6.10 représentant un signal de pression tracé sur une période.

La figure 6.40 présente sept champs de fraction de mélange instantanés à différents angles de phase. Les profils de z relevés en X = 6 mm à partir de chacun de ces champs sont tracés sur la figure 6.41. On note, en $\Phi = 3$ et $\Phi = 5$, c'est à dire lorsque la pression est maximale dans la chambre, que la fraction de mélange au sein de la flamme atteint son maximum. En $\Phi = 5$ à $\Phi = 7$, le mélange entrant dans la chambre possède une richesse globalement supérieure à la richesse moyenne. Le mélange pénétrant dans la chambre s'homogénéise ensuite alors que la pression chambre diminue, puis il se stratifie à nouveau, l'écart entre le minimum et le maximum de richesse en entrée augmentant. Ce phénomène se répète ensuite à une fréquence correspondant à la fréquence de rotation du PVC imposée par le swirl.

Ces champs, et les profils 6.41, montrent qu'une bouffée de mélange plus riche que la moyenne pénètre dans la chambre lorsque la pression est maximale. Ce phénomène périodique a été parfaitement identifié expérimentalement sur le cas instable à richesse 0,75 par Meier *et al.* [146]. Faute de temps, il ne nous a pas été possible de traiter les données expérimentales disponibles afin de déterminer si ce phénomène est cohérent avec l'expérience à richesse 0,83. Ainsi, nous ne sommes pas en mesure pour le moment de dire si ce mécanisme instationnaire est représentatif de la physique de l'écoulement où si il est relatif à la mise en données (méthodes numériques, conditions limites...) du calcul.

6.6.3 Etude du mélange moyen

Sur la figure 6.42 sont comparés les profils de la fraction de mélange $\widetilde{z}$ obtenus expérimentalement et à partir du calcul PRECCINSTA partiellement prémélangé.

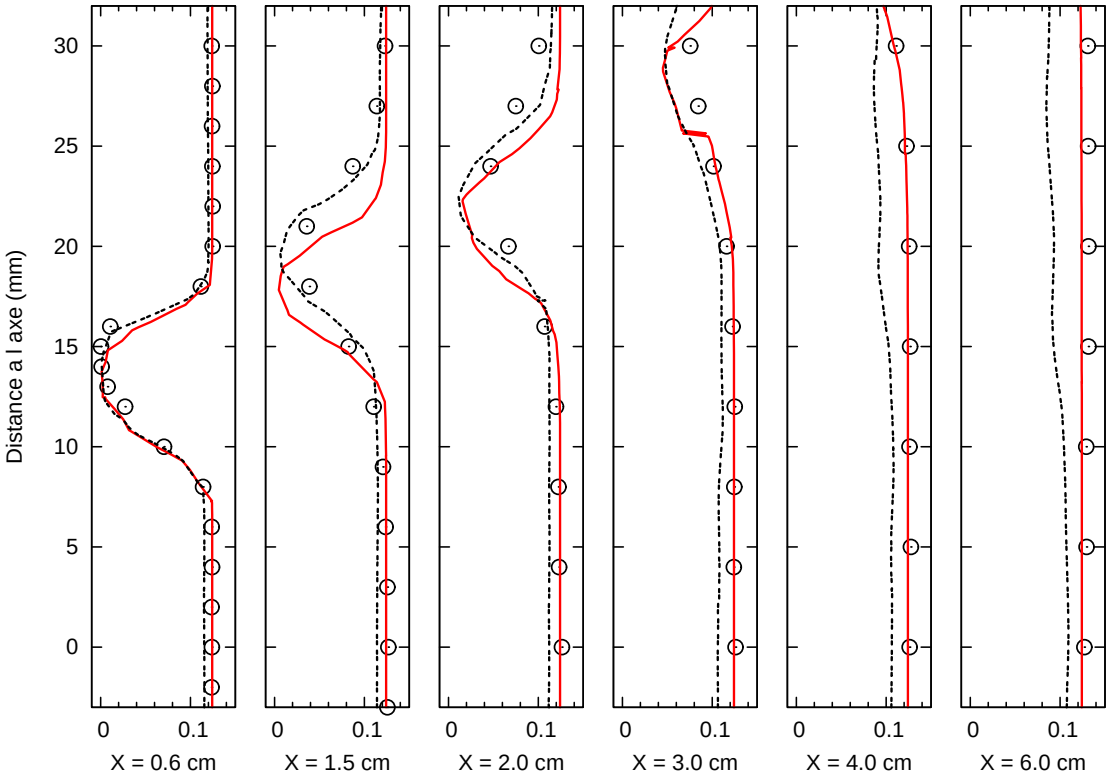

FIG. 6.38 – *Profils de $\widetilde{Y_{CO_2}}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondant au cas FPI1 parfaitement prémélangé (rouge) et au cas partiellement prémélangé (tirets gris).*

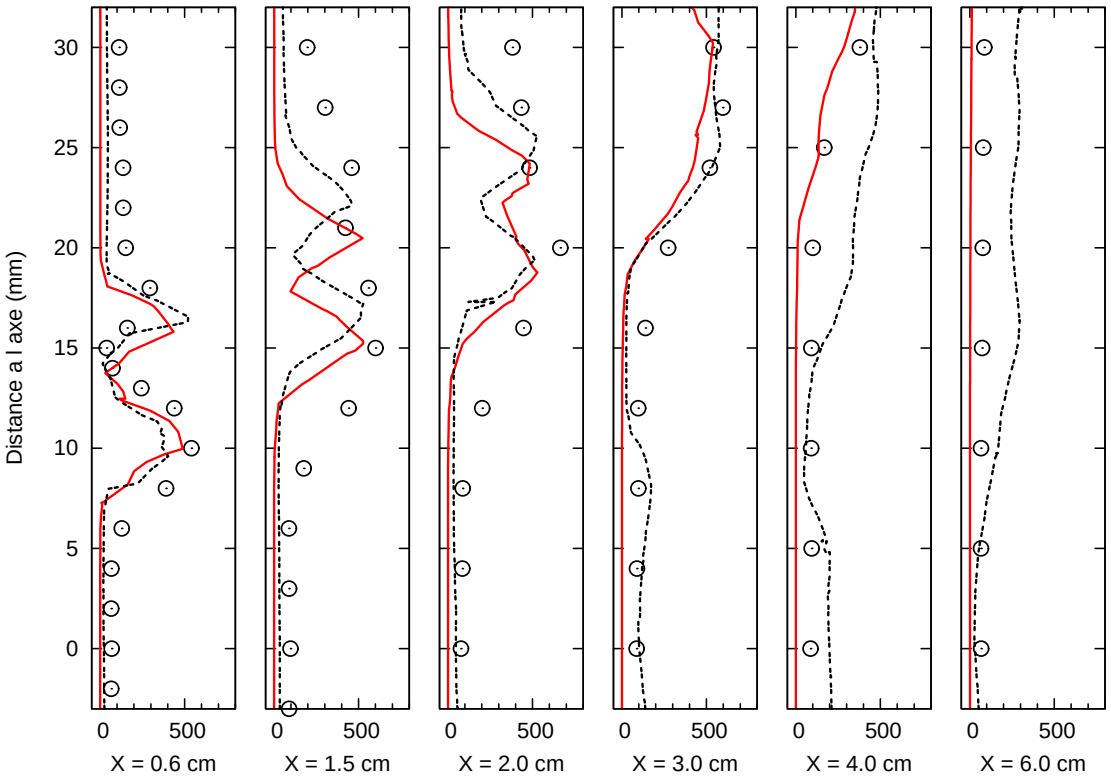

FIG. 6.39 – *Profils de T''_{RMS} à travers la chambre PRECCINSTA correspondant au cas FPI1 parfaitement prémélangé (rouge) et au cas partiellement prémélangé (tirets gris).*

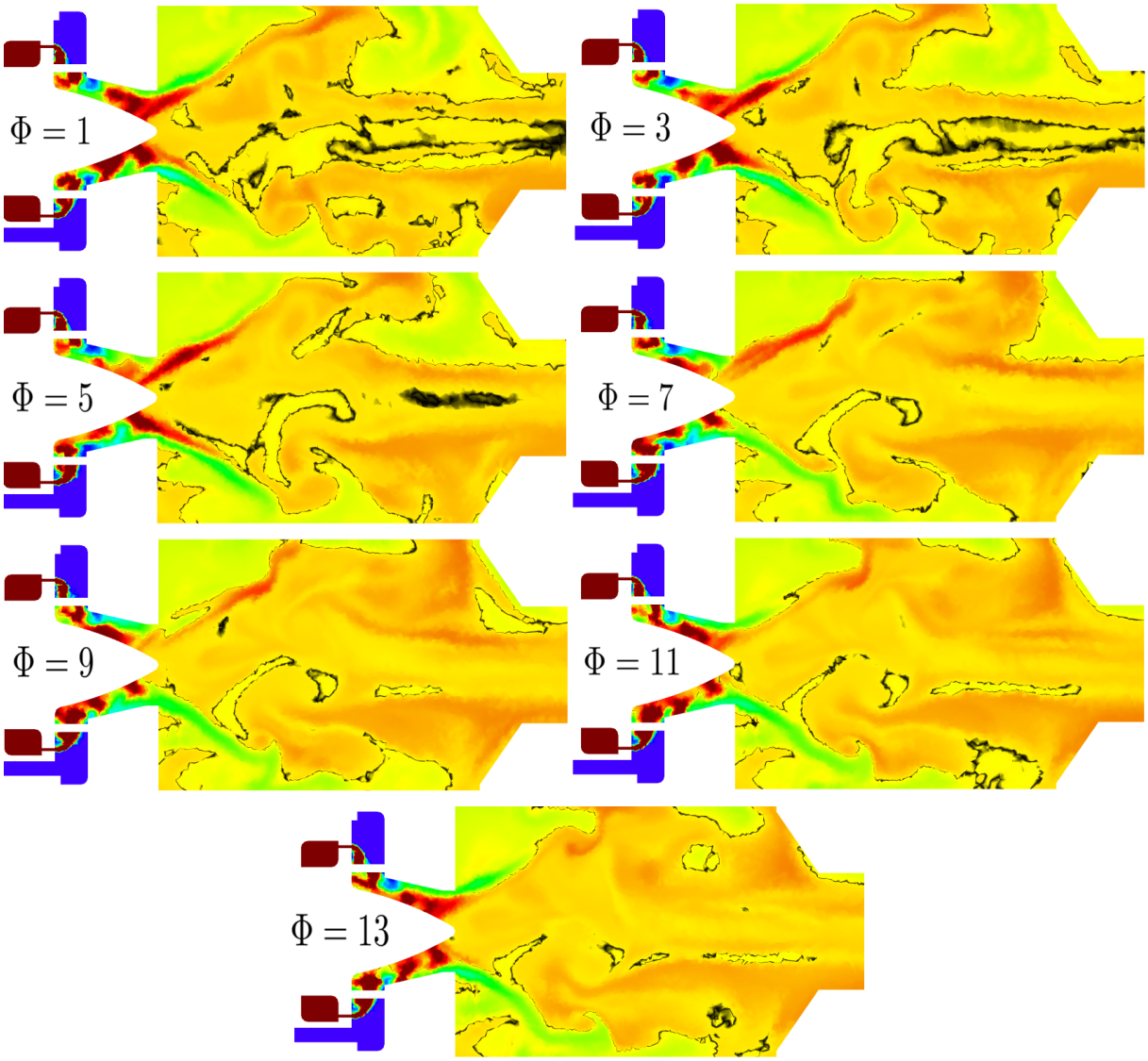

FIG. 6.40 – *Champs de fraction de mélange instantanés suivant différents angles de phase. Les zones noircies soulignent les régions où la richesse est égale à 0,83.*

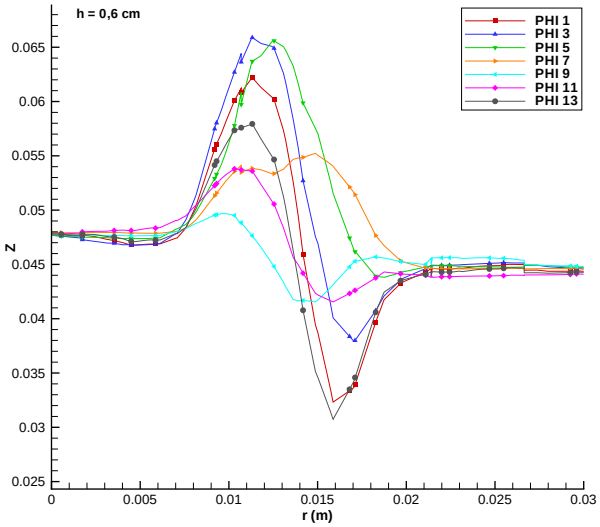

FIG. 6.41 – *Profils de fraction de mélange instantanés en X = 6 mm suivant différents angles de phase.*

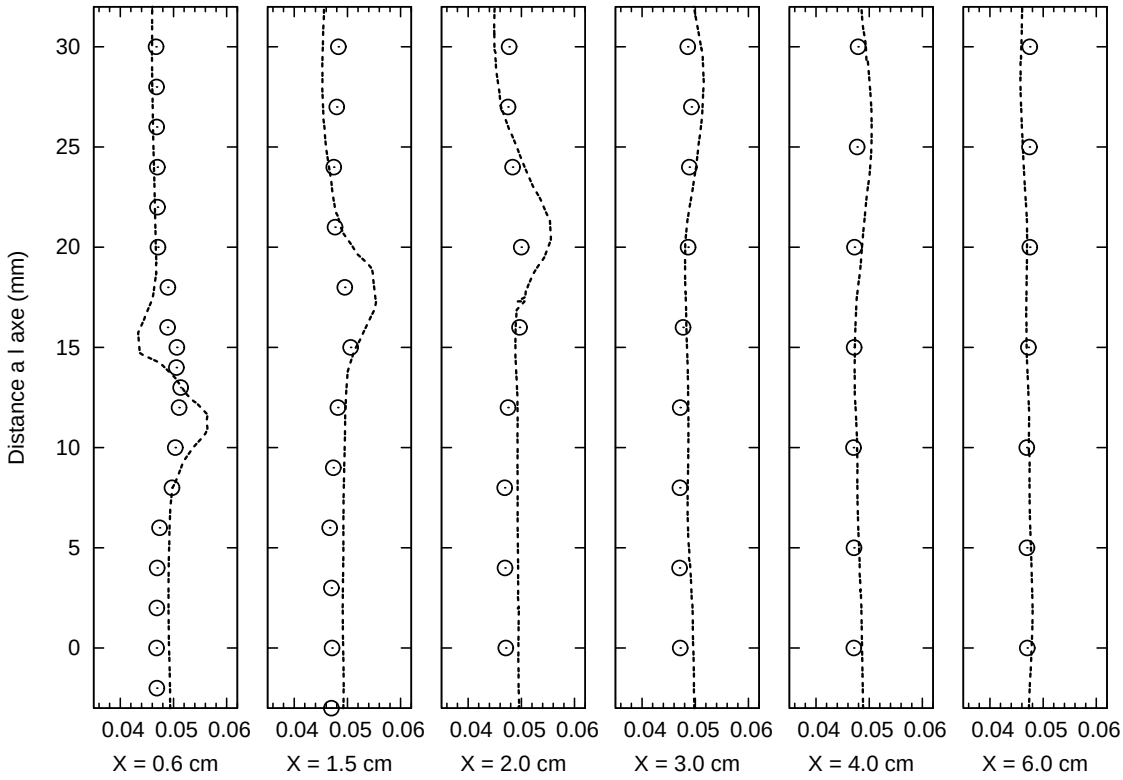

FIG. 6.42 – *Profils de $\widetilde{z}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondant au cas partiellement prémélangé et comparés à l'expérience.*

Alors que la valeur moyenne globale de $\widetilde{z}$ semble bien retrouvée par le calcul, les niveaux minimum et maximum atteint dans la zone de flamme sont largement sur-estimés par la LES. Pour analyser de manière approfondie ces résultats et pour les expliquer, on propose dans la suite une étude détaillée du mélange en amont de la chambre.

La figure 6.43 présente un champ moyen de fraction de mélange au sein de la chambre PRECCINSTA. Trois zones distinctes peuvent être identifiées :

- la première est située à l'intérieure de la recirculation centrale et est limitée par la flamme. Dans

cette zone, la fraction de mélange est légèrement supérieure à la fraction de mélange globale imposée (0,0463). Les niveaux relevés sont en moyenne de l'ordre de 0,0492 ; ce qui représente un écart de plus de 6% par rapport à la grandeur théorique ;

- la seconde zone est située au voisinage du jet de gaz frais pénétrant dans la chambre (entre les deux flammes). Dans cette région, le mélange est clairement stratifié avec une partie plus riche orientée vers l'intérieur de la chambre et une autre plus pauvre orientée vers l'extérieur. Cette stratification est provoquée par le mouvement de swirl censé favoriser le mélange ;
- la dernière zone se situe près des coins extérieurs de la chambre. Là, la fraction de mélange moyenne relevée est équivalente à la fraction théorique.

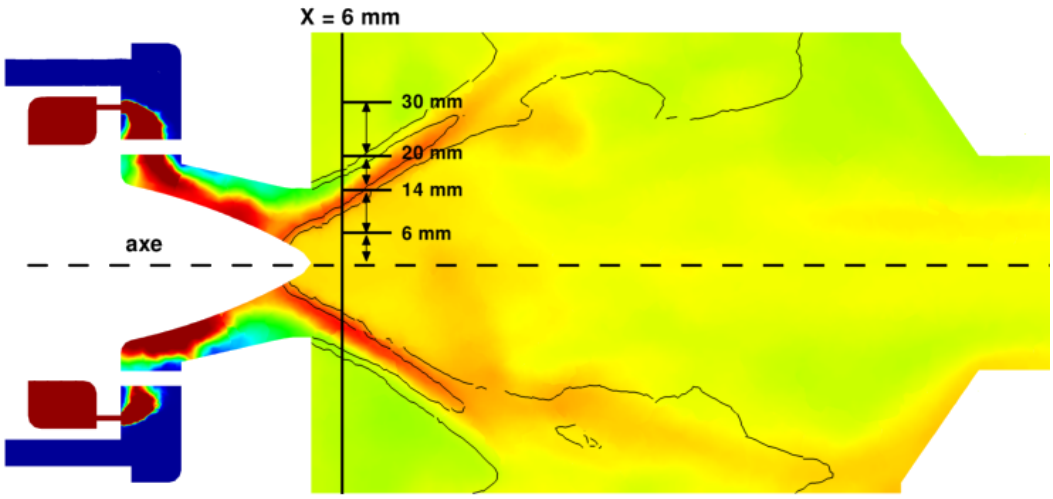

FIG. 6.43 – *Champ moyen de fraction de mélange en combustion. Des iso-contours de température à 900 K et 1700 K sont également représentés.*

La flamme est identifiée par les iso-contours de température à 900 K et 1700 K. On voit ainsi nettement qu'une partie de cette flamme (vers l'intérieur) brûle dans des conditions plus riches que la richesse globale théorique, alors que la partie supérieure de la flamme brûle dans des conditions équivalentes à la richesse théorique.

Pour une analyse plus approfondie du mélange dans la chambre, on peut, à l'instar d'Albouze [6], étudier les PDF de z suivant différentes coupes. Ces PDF, tracées à partir d'échantillons provenant de 18 champs instantanés et relevés entre r = 0 mm et r = 30 mm, peuvent ainsi être comparées à celles obtenues à partir des données expérimentales (mesures Raman). Ces fonctions sont dans un premier temps représentées suivant quatre différentes coupes sur la figure 6.44. On s'intéresse ensuite en particulier à la section X = 6 mm, et de nouvelles PDF sont évaluées en fonction de la hauteur dans la chambre (figure 6.45). Dans ce cas, les intervalles pris en considération sont mis en évidence sur la figure 6.43 : le premier tracé correspond à un jeu de données comprises dans l'intervalle [0 mm ; 6 mm], le second dans l'intervalle [8 mm ; 14 mm], le troisième dans [15 mm ; 20 mm], et le dernier dans [22 mm ; 30 mm].

La forme de la PDF obtenue par la LES en X = 6 mm est très similaire à celle relevée expérimentalement. Ces PDF ne sont pas parfaitement monomodales, mais présentent une queue assez marquée en direction des richesses élevées. Ceci traduit le fait qu'à cette distance le mélange reste assez inhomogène. En X = 15 mm et X = 30 mm, les PDF expérimentales et numériques présentent des formes nettement monomodales, mais centrées en des valeurs différentes de z. Les courbes issues de la LES sont décalées dans le sens des richesses plus élevées, le mélange ne se fait donc pas correctement. Ce résultat est cohérent avec les observations énoncées précédemment concernant la figure 6.43. Plus en aval, en X = 60 mm, les PDF numérique et expérimentale sont identiques. La valeur moyenne

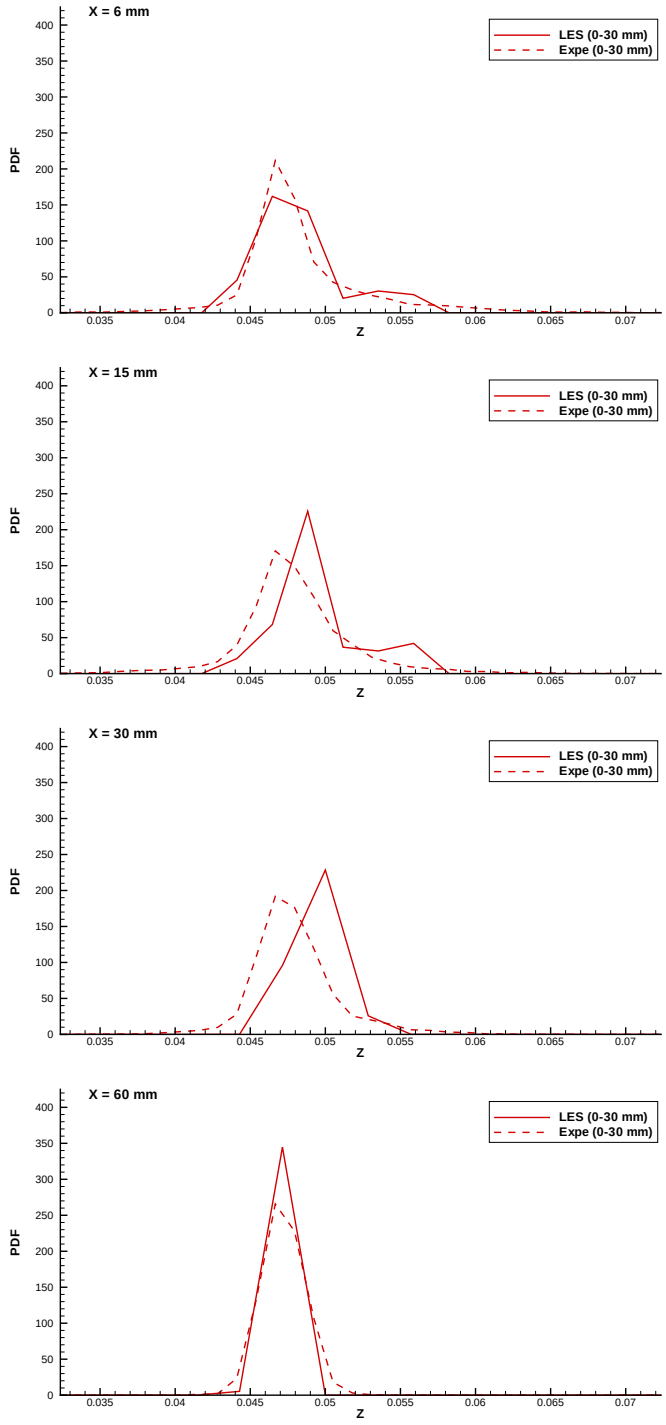

FIG. 6.44 – *PDF de la fraction de mélange calculées suivant différentes coupes à travers la chambre, entre r = 0 mm et r = 30 mm.*

de z prédite par la LES correspond exactement à celle mesurée expérimentalement et les PDF sont fortement monomodales (le mélange est très homogène).

Si on s'intéresse au mélange en X = 6 mm uniquement, en fonction de la position radiale r à travers la chambre, on note des différences importantes entre expérience et calcul. Les tendances observées sur ces tracés sont parfaitement cohérentes avec celles déterminées précédemment par observation du champ de $\widetilde{z}$. Dans la zone correspondant à la recirculation centrale, soit pour r compris entre 0 mm et 6 mm, les PDF sont fortement monomodales (mélange homogène), mais le calcul prédit une valeur

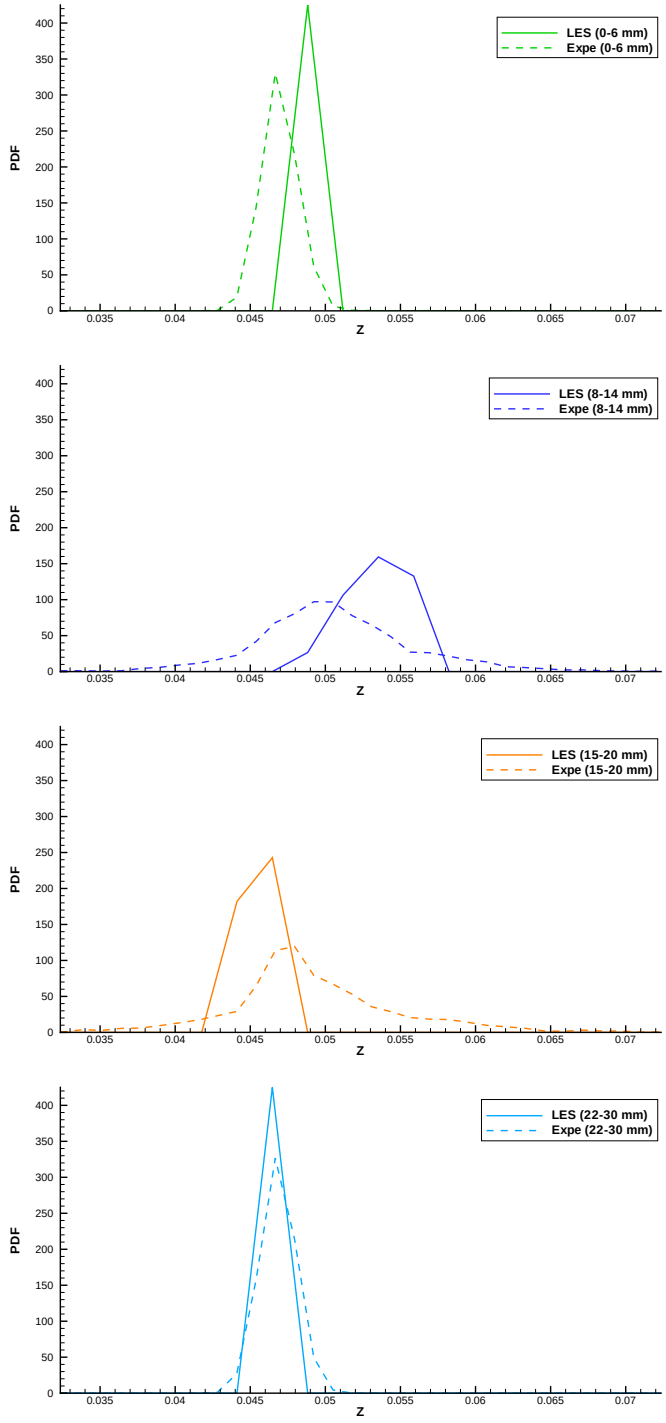

FIG. 6.45 – *PDF de la fraction de mélange calculées en $X = 6$ mm en fonction de la hauteur dans la chambre.*

moyenne de z trop élevée. Sur les profils suivant, soit au voisinage de la flamme, les PDF sont beaucoup plus étendues ce qui traduit le fait que le mélange y est assez inhomogène.

Les fonctions tracées à partir de la LES montrent clairement l'existence d'une zone plus riche que la moyenne en 8 mm $< r <$ 14 mm, et une zone plus pauvre en 15 mm $< r <$ 20 mm. Dans cette région, le mélange simulé est donc beaucoup plus stratifié que dans l'expérience, ce qui conduit à l'existence de cette zone plus riche au centre de la chambre. Sur le dernier profil, correspondant à 22 mm $< r$ 30 mm, les deux PDF présentées sont identiques et donnent une valeur moyenne de z cohérente avec la

valeur globale attendue.

La stratification dans les jets de gaz frais est reliée à la qualité du mélange se déroulant en amont, entre l'injection de carburant et l'entrée de la chambre. Là, on peut observer sur 6.43 que le carburant injecté pur ne se mélange pas correctement à l'air. Par ailleurs, les profils de vitesse axiale fluctuante (voir figure 6.35) présentés précédemment confirment le fait que le mélange n'est pas parfaitement modélisé sur le cas étudié (les niveaux calculés sont sous-estimés en comparaison à l'expérience). Ainsi, le mélange simulé n'est pas suffisamment intense pour permettre de restituer une distribution de richesse correcte en entrée de chambre.

La manière la mieux adaptée d'améliorer la modélisation du mélange turbulent en amont de la chambre consiste à raffiner le maillage. On se trouve ici confronté aux limites de la LES sur de tels cas (écoulement confiné entre deux parois) où des maillages excessivement fins sont nécessaires pour prédire correctement l'aérodynamique de l'écoulement, en particulier à proximité des parois.

Des PDF bidimensionnelles en z et en T ont également été tracées. Des tendances très similaires sont observées lorsque l'on compare calcul et expérience, mis à part en X = 60 mm où deux pics distincts sont observés sur les PDF issues du calcul. Près de l'entrée de la chambre, la forme de la PDF 2D est bien restituée par la simulation, même si on peut noter le décalage d'un des deux pics en direction des richesses plus élevées (dans l'expérience, les deux pics sont parfaitement alignés). La bonne correspondance des tracés tend à montrer la capacité de l'approche FPI à modéliser correctement le comportement de la flamme partiellement prémélangée, en particulier les distributions de température (assimilables à une variable d'avancement).

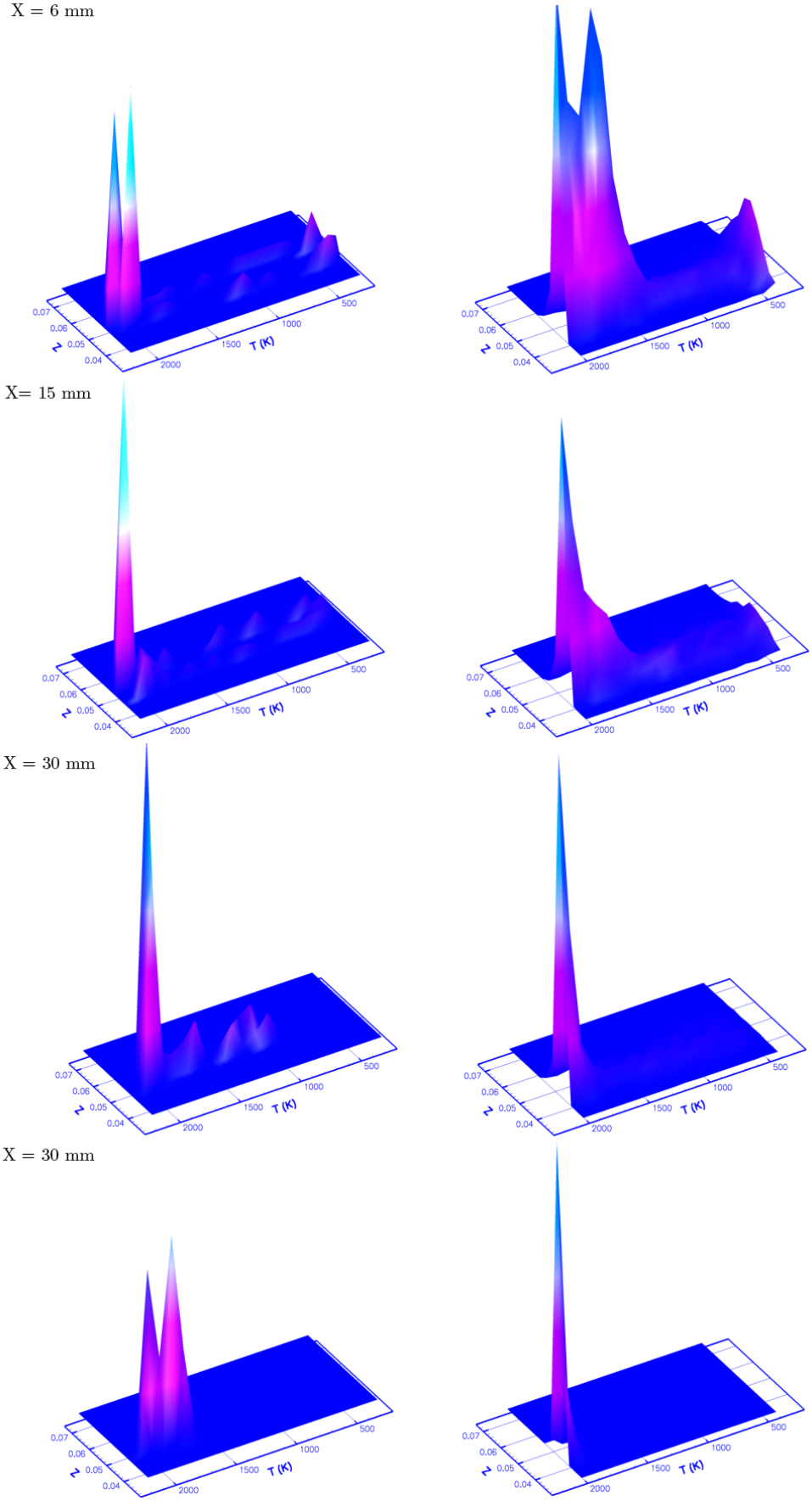

FIG. 6.46 – *PDF bidimensionnelles en z et en T suivant quatre coupes à travers la chambre. A gauche, LES, à droite, expérience.*

6.7 Simulation de la production de NO

6.7.1 Modèlisation de la formation de NO pour PRECCINSTA

Les modèles permettant de prédire la formation de NO développés au cours de ce travail sont maintenant évalués sur la configuration PRECCINSTA dans des conditions parfaitement prémélangées. Les résultats obtenus à l'aide des deux modèles fondés sur la création de tables FPI sont comparés à ceux obtenus à l'aide de l'approche PEUL qui peut être assimilée à une méthode de post-traitement stationnaire pour la chimie.

Mécanisme réactionnel pour la formation de NO :

Pour conserver une certaine consistance entre les calculs présentés, le même mécanisme réactionnel détaillé a été utilisé dans tous les cas. Ce schéma est basé sur le mécanisme GRI-Mech 3.0 [202] déja utilisé au cours des études précédentes, auquel on a ajouté un sous-mécanisme spécifique pour prendre en compte la formation de NO (le mécanisme de Hewson *et al.* [108], [107]). Pour ce faire, toutes les réactions impliquant NO ont été préalablement supprimées du mécanisme GRI-Mech d'origine. Le fait d'utiliser un schéma réactionnel spécifique à NO, découplé de GRI-Mech, facilite l'implantation du modèle FPI/cinétique.

La cinétique de Hewson *et al.* comporte 76 réactions élémentaires irréversibles (impliquant NO ou ses précurseurs), ce qui porte le nombre de réactions du mécanisme complet à 332. Par ailleurs, aucune espèce supplémentaire n'apparait dans le mécanisme spécifique à NO en comparaison à GRI-Mech.

Les figures 6.47 présentent les profils de température, de fractions massiques de CO et de NO ainsi que du taux de production de NO à travers une flamme méthane/air à richesse 0,83. Ces profils ont été obtenus à l'aide des schémas cinétiques GRI-Mech 3.0 et GRI-Mech augmenté du mécanisme de Hewson *et al.*.

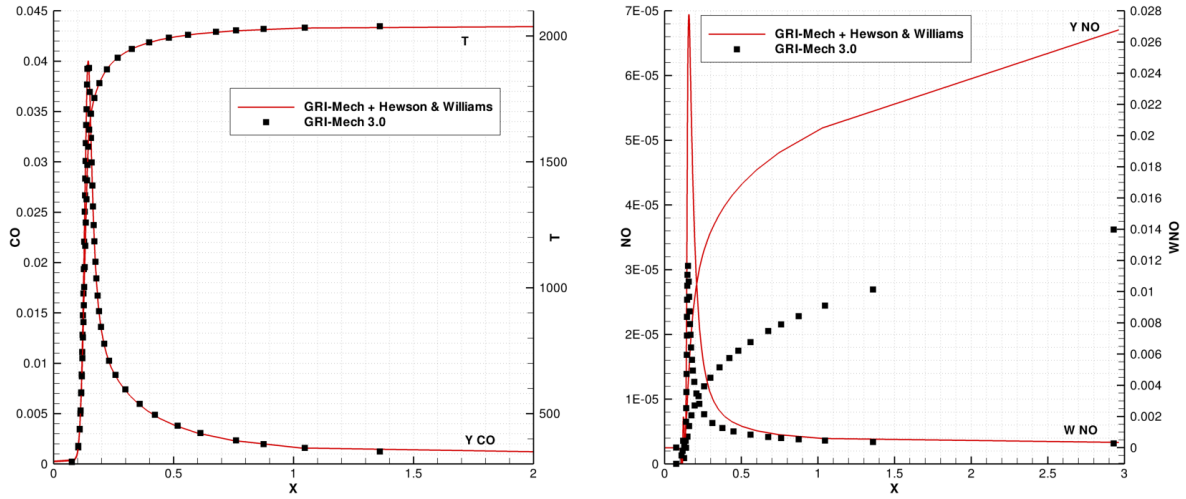

FIG. 6.47 – *Profils de T, Y_{CO}, Y_{NO} et $\dot{\omega}_{NO}$ à travers une flamme à richesse 0,83 et tracés à l'aide des mécanismes GRI-Mech 3.0 et GRI-Mech + Hewson et Williams.*

Les profils de température et de fraction massique de CO ne présentent aucune différence car la structure principale du mécanisme GRI-Mech n'a pas été modifiée. En revanche, on note que les niveaux de NO dans les gaz brûlés, prédits par le mécanisme utilisé, sont supérieurs d'un facteur proche de 2 par rapport au mécanisme d'origine. Ces écarts ne sont toutefois pas pénalisant pour l'étude proposée sachant que nous nous limiterons à la comparaison des tendances obtenues avec les différentes méthodes proposées[1].

[1]Le manque de données expérimentales sur la chambre PRECCINSTA ne permet pas de valider quantitativement les

Modèle FPI-NOx :

Les calculs FPI-NOx ont été réalisés dans les mêmes conditions que le cas FPI1. Le maillage grossier LM1 a été utilisé et le pas de temps des simulations a été fixé à $1{,}2.10^{-7}$ s. La variance SGS de c a été modélisée via une relation algébrique, et $\widetilde{\chi_c}$ a été approché suivant le modèle de Vervisch [220]. La constante du modèle a été fixée à 1.

Une table spécifique à l'espèce NO a été créée, contenant les valeurs de $\widetilde{Y_{NO}}$ et $\widetilde{\dot{\omega}_{NO}}$ indexées par les deux premiers moments statistiques de la variable d'avancement η. Celle-ci est définie par :

$$\eta = c + kY_{NO}, \tag{6.10}$$

avec $k = 1000$. Un des points limitant du modèle réside dans l'évaluation de $\widetilde{\eta''^2}$. Différentes méthodes ont été proposées précédemment. Dans le contexte présent, une fermeture à l'ordre 0 a été choisie. On supposera donc :

$$\widetilde{\eta''^2} \approx \widetilde{c''^2}. \tag{6.11}$$

Cette méthode est très simple à mettre en œuvre. En outre, étant donné que le comportement du modèle FPI-NOx n'est pas encore très bien connu, son utilisation permet de s'assurer de la cohérence des résultats obtenus. A l'avenir, une évaluation détaillée des capacités des différents modèles proposés pourra être réalisée.

Les tables FPI-NOx contiennent 320 points suivant $\widetilde{\eta}$ et 25 points suivant la variance SGS de η. La valeur maximale de Y_{NO} apparaissant dans ces tables est de 3.10^{-4}, ce qui correspond à environ 4,5 fois la valeur de Y_{NO} en $c = 1$.

A noter qu'au cours de ce calcul, une équation de transport pour un temps de résidence a également été résolue. Cette équation peut s'écrire (voir Ghirelli et al. [87]) :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tau_r}{\partial t} + \nabla.\left(\overline{\rho}\widetilde{\boldsymbol{u}}\tau_r + \overline{\rho}D\nabla\tau_r\right) = -\nabla.\boldsymbol{\tau}_\tau^t + \overline{\rho}, \tag{6.12}$$

où $\boldsymbol{\tau}_\tau^t$ est modélisé suivant une relation de type gradient. La grandeur τ_r peut être assimilée à l'âge moyen des particules fluides contenues dans chaque maille. Etant donné que la production de NO peut être directement corrélée au temps de résidence du mélange dans les zones de haute température (via le mécanisme de Zel'dovitch), l'étude des champs de τ_r peut s'avérer intéressante pour interpréter les distributions de Y_{NO} calculées.

Modèle FPI/cinétique :

Les conditions du calcul PRECCINSTA avec modèle FPI/cinétique pour la formation de NO sont identiques à celles du calcul FPI-NOx.

Le sous-mécanisme réactionnel spécifique à NO utilisé pour ces simulations a été décrit précédemment. Dans le cadre de l'approche cinétique, seules les réactions mettant directement en jeu NO, soit 26, sont retenues pour déterminer les termes sources chimiques de cette espèce. Les concentrations des radicaux apparaissant dans ces réactions élémentaires sont directement tirées des tables FPI classiques. Par conséquent, les données chimiques concernant 24 espèces minoritaires (en plus des espèces transportées) doivent être interpolées.

Modèle PEUL :

Les calculs PEUL sur la configuration PRECCINSTA prémélangée ont été effectués uniquement pour calculer la formation de NO au sein de la chambre. Les résultats obtenus fournissent ainsi un

niveaux de NO émis.

cas supplémentaire de comparaison pour évaluer les capacités des deux modèles fondés sur les tables FPI. Le modèle PEUL est décrit en annexes.

PEUL [233] a été utilisé comme modèle de post traitement sur les champs eulériens issus du cas FPI1 (correspondant au maillage grossier). Ces champs ont été préalablement projetés sur un maillage déraffiné comprenant environ 550 000 cellules (dénoté maillage PM4), et délimitant un domaine s'étendant de l'entrée des vrilles du swirler à la sortie de la chambre de combustion. Cette procédure permet d'alléger les calculs en réduisant considérablement la taille du maillage, sans altérer la qualité des résultats obtenus.

Le modèle PEUL requière la connaissance d'un temps turbulent pour évaluer, notamment, le temps caractéristique du modèle de micromélange IEM. En suivant les travaux de Colucci *et al.* [51] sur les modèles lagrangien de transport de PDF en LES, on peut évaluer un temps turbulent LES suivant :

$$\tau_t = \frac{C_t \Delta^2}{(D + D_t)} \approx \frac{C_t'' \Delta^2}{\nu_{SGS}}, \tag{6.13}$$

avec $D_t = \nu_{SGS}/Sc_t$. La constante C_t'' est directement reliée à la constante du modèle IEM par : $C_t'' = 1/C_{IEM}$. Dans les calculs PEUL présentés ci-après, la constante C_t'' a été fixée à 0,05. La viscosité de sous-maille est calculée par la formule de Smagorinsky.

Deux calculs PEUL sont présentés dans ce chapitre. Ceux-ci ont été réalisés en ensemençant l'écoulement par 30 000 et 60 000 particules. Les temps de restitution de ces deux calculs sur un processeur unique sont respectivement de l'ordre de 36 et 72 heures.

Résumé :

Le tableau 6.8 résume les conditions des différents calculs présentés. On rappelle ici que les simulations LES réalisées utilisent des conditions initiales et des paramètres numériques (maillage, pas de temps) identiques au cas PRECCINSTA parfaitement prémélangé présenté en début de chapitre. Les calculs PEUL se basent sur un champ moyen déjà convergé.

Cas	**Maillage**	**Modèle**	**Caractéristiques**	**Cste. variance**	**Δt (s)**
FPI1	PM1	FPI-NOx	tables : 320x25 points	1	$1{,}2.10^{-7}$
FPI2	PM1	FPI/cinétique	Hewson-Williams (24 esp.)	1	$1{,}2.10^{-7}$
Cas	**Maillage**	**Modèle**	**Initial**	**C_t''**	**Nb. part.**
PEUL1	PM4	PEUL	Champ moyen FPI1	0,05	30 000
PEUL2	PM4	PEUL	Champ moyen FPI1	0,05	60 000

TAB. 6.8 – *Récapitulatif des calculs de NO effectués sur la configuration PRECCINSTA prémélangée.*

6.7.2 Comparaison des champs de NO moyens

La figure 6.48 présente les champs moyens de Y_{NO} en coupe suivant l'axe z. Une nette différence de niveaux est relevée entre les calculs issus des modèles basés sur l'utilisation de tables et le calcul PEUL (ici correspondant à 30 000 particules). Les tendances observées entre ces différents champs sont également assez éloignées. Ainsi, alors qu'avec le modèle PEUL la majorité du NO formé l'est au sein de la zone de recirculation centrale, les approches basées sur FPI mettent en évidence l'existence de deux foyers de production principaux : la recirculation centrale et la recirculation dans les coins de la chambre.

Si on met en parallèle les champs de fraction massique de NO (figure 6.48) obtenus à l'aide des modèles proposés avec le champ du temps de résidence transporté par l'équation (6.12) (figure 6.49),

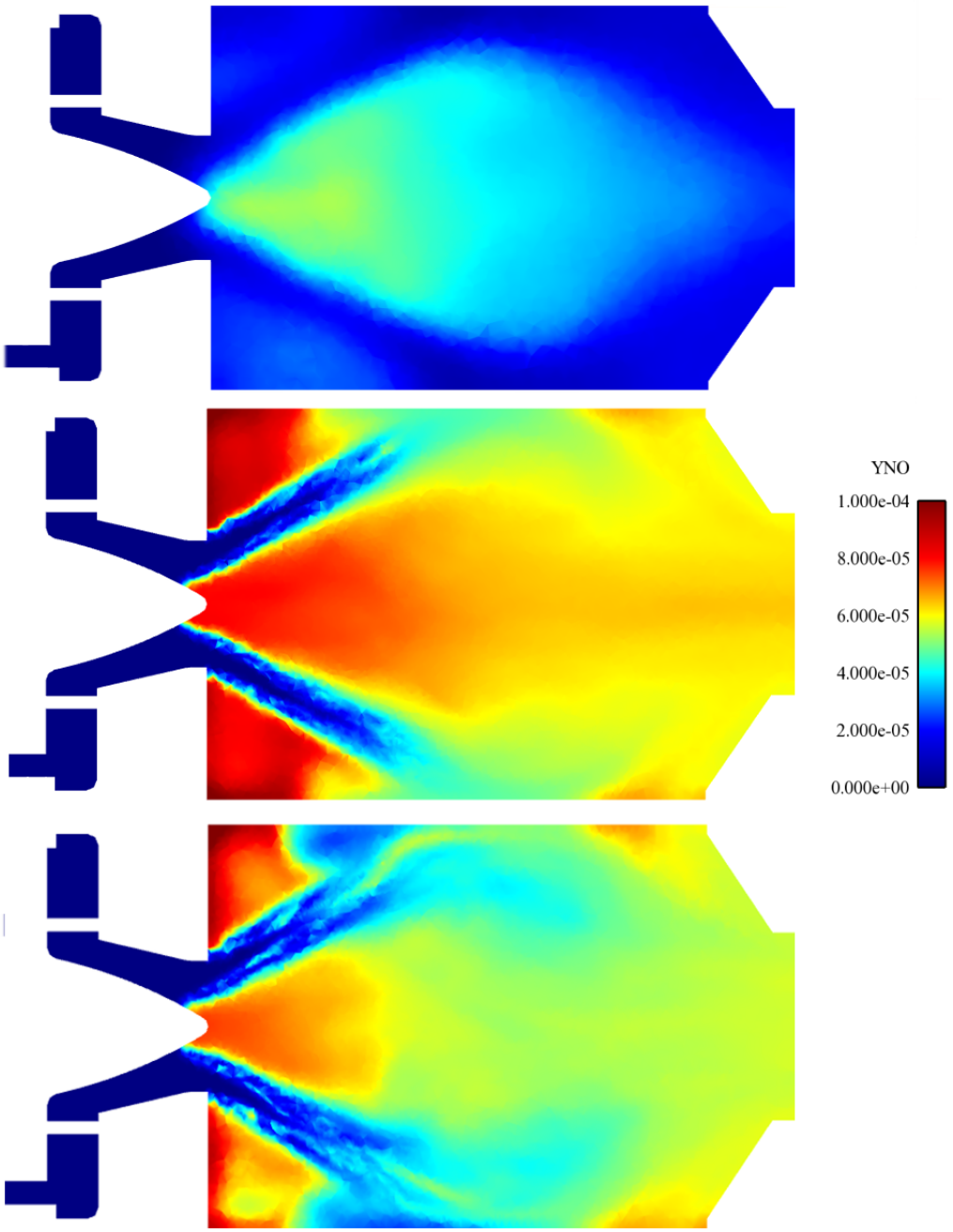

FIG. 6.48 – *Champs de la fraction massique de NO moyens. En haut, modèle PEUL (30 000 particules), au centre, modèle FPI-NOx, en bas, modèle FPI/cinétique.*

on note une forte corrélation entre ces deux grandeurs. Le calcul prédit ainsi que NO est formé de préférence dans les zones à haute température, où le mélange stagne.

Lorsque l'on compare les champs obtenus à l'aide des approches FPI-NOx et FPI/cinétique entre eux, on constate que les deux modèles proposés restituent des tendances très similaires. Toutefois, les niveaux calculés par le modèle FPI/cinétique semblent globalement légèrement inférieurs. Notons que les résultats obtenus à l'aide de FPI/cinétique sont moins convergés que ceux issus du calcul FPI-NOx.

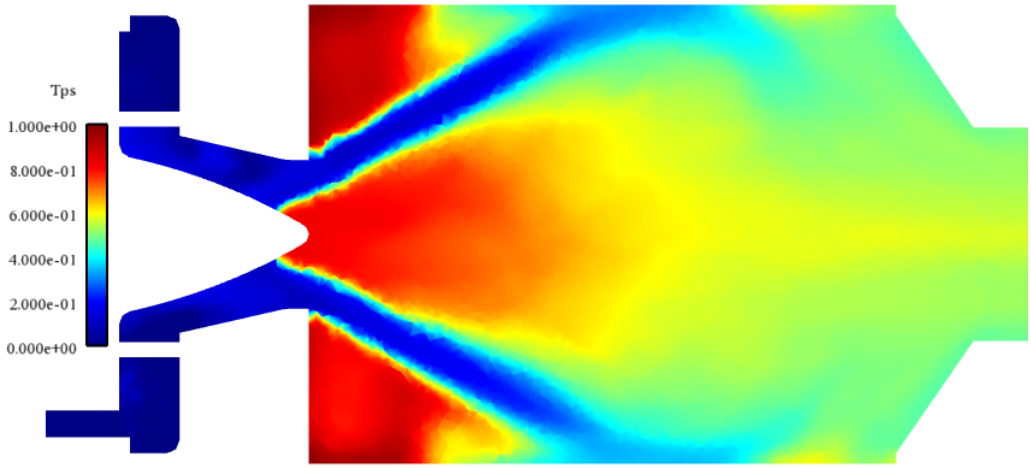

FIG. 6.49 – *Champ moyen du temps de résidence obtenu par résolution de l'équation (6.12).*

6.7.3 Comparaison des profils de Y_{NO} moyens à travers la chambre

Les figures 6.50 et 6.52 présentent respectivement les profils des fractions massiques de CO_2 et de NO à travers la chambre. Les résultats obtenus à l'aide des différents calculs PEUL sont détaillés sur la figure 6.51 sous deux formes : lissés et non lissés. Le lissage peut être intéressant lorsque la précision statistique des données est insuffisante.

Lors des comparaisons présentées, il faut garder en mémoire que la température prédite par les modèles employés étant surestimée au maximum de 150 K, les niveaux de NO déterminés ne sont pas représentatifs de la réalité.

Sachant que les profils de la fraction massique de CO_2 obtenus avec FPI ont été validés précédemment, la figure 6.50 fournit une référence pour évaluer les capacités prédictives du modèle PEUL. On peut noter ainsi la grande influence de la procédure de lissage qui tend à homogénéiser les profils. La position de la flamme ainsi que les niveaux de CO_2 dans les gaz brûlés sont bien retrouvés par PEUL. Cependant, suivant ce modèle, la flamme continue à brûler prés des parois, en $X = 3$ cm et $X = 4$ cm.

La figure 6.51 permet de visualiser l'influence de certains paramètres du modèle PEUL : le nombre de particules injectées et le lissage des résultats. Les niveaux prédits au sein des recirculations sont supérieurs dans le cas à 60 000 particules, ce qui montre que la convergence statistique des moyennes n'est pas tout à fait atteinte à 30 000 particules. Compte tenu de ces observations, il semble préférable, pour la suite, de conserver le calcul PEUL à 60 000 particules comme référence. Par ailleurs, on note la grande influence du processus de lissage sur la qualité des résultats, comme pour CO_2.

La figure 6.52 compare les profils de Y_{NO} à travers la chambre obtenus à l'aide des modèles FPI-NOx, FPI/cinétique et PEUL à 60 000 particules. A l'aide des approches fondées sur FPI, on relève, en $X = 0{,}6$ cm et $X = 1{,}5$ cm, des fractions massiques de NO plus élevées à proximité de la paroi supérieure du domaine (de l'ordre de 8.10^{-5} à 10^{-4}) et près de l'axe (de l'ordre de 7.10^{-5} à 8.10^{-5}). Ces régions correspondent aux zones de recirculation du mélange, identifiées sur la figure 6.8. Ceci traduit le fait que les modèles développés sont capables de tenir compte de la formation hors équilibre de NO due au mécanisme de Zel'dovitch.

Les profils 6.52 confirment le fait que les niveaux prédits par le modèle FPI/cinétique restent toujours inférieurs à ceux obtenus avec FPI-NOx, tout en restant très proches. Les écarts maximums observés sont de l'ordre de 8%. Comme cela a été observé précédemment lors de l'étude des champs moyens, PEUL sous-estime largement les fractions massiques de NO.

FPI-NOx prédit des niveaux de NO en sortie de chambre (voir figure 6.53) de l'ordre de $6{,}3.10^{-5}$,

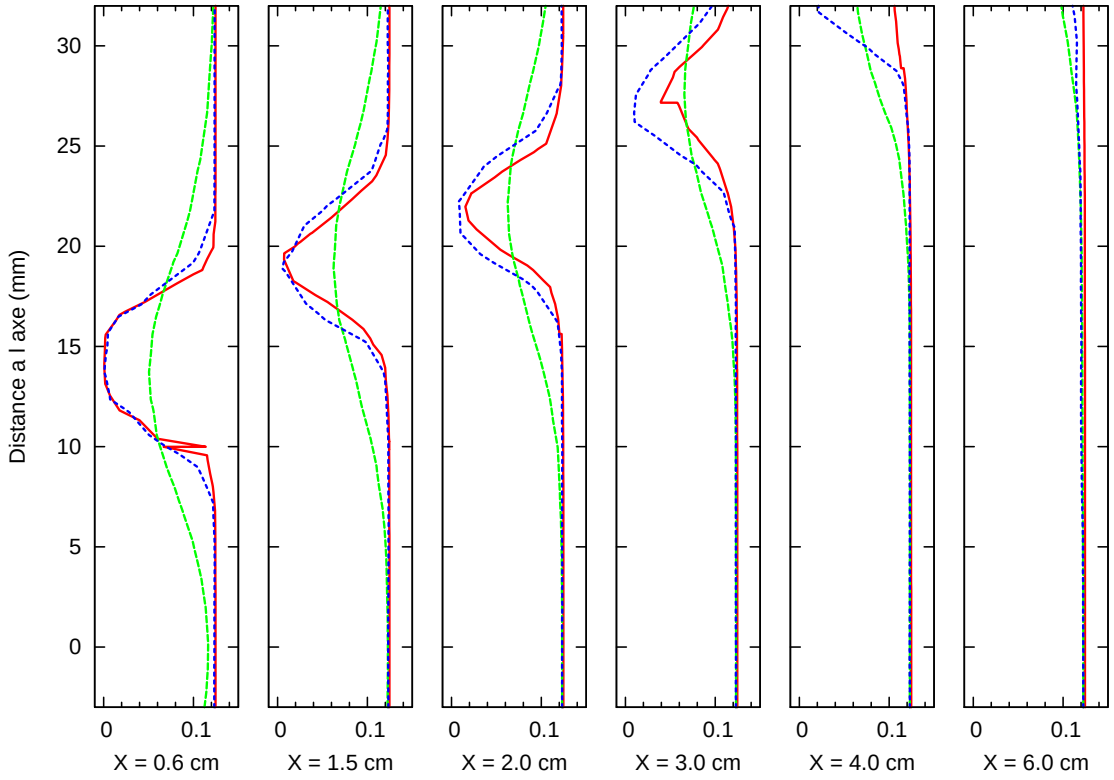

FIG. 6.50 – *Profils de $\widetilde{Y}_{CO_2}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI-NOx (rouge continu), PEUL stationnaire lissé (tirets verts) et PEUL stationnaire non lissé (petits tirets bleus). Les résultats PEUL correspondent au cas à 30 000 particules.*

ce qui correspond approximativement à la valeur relevée dans les tables d'origine en $c = 1$ (à $\approx 5\%$ près). Une valeur assez proche est observée à l'aide du modèle FPI/cinétique, environ $5{,}8.10^{-5}$, ce qui représente un écart de l'ordre de 8%. Les calculs PEUL sous-estiment ces résultats d'un facteur trois. A noter qu'en sortie de chambre, l'augmentation du nombre de particules PEUL initialement injectées n'a pas d'influence sur les niveaux de Y_{NO} moyens.

6.7.4 Interprétations

Les écarts observés peuvent être expliqués par l'analyse des modèles employés.

Comparaisons entre FPI-NOx et FPI/cinétique :

Nous avons observé précédemment que le modèle FPI/cinétique conduit à la restitution de niveaux de NO inférieurs à ceux prédits par l'approche FPI-NOx, à la fois dans les zones de recirculation et en sortie de chambre.

L'approche FPI/cinétique est fondée sur un calcul pseudo-laminaire des termes sources chimiques de NO, à l'aide d'un mécanisme réactionnel détaillé. Pour cela, la loi d'action de masse classique est employée dans laquelle on introduit directement les grandeurs thermochimiques filtrées. Cette méthode ne permet pas de tenir compte des fluctuations des concentrations des espèces précurseurs ainsi que de la température sur la formation de NO, ce qui induit de nombreuses erreurs lors de l'évaluation des sources chimiques.

Ces erreurs sont plus marquées au sein du front de flamme où certains précurseurs sont rapidement produits et consommés, notamment ceux liés aux voies de formation rapides (prompt-NO), par exemple

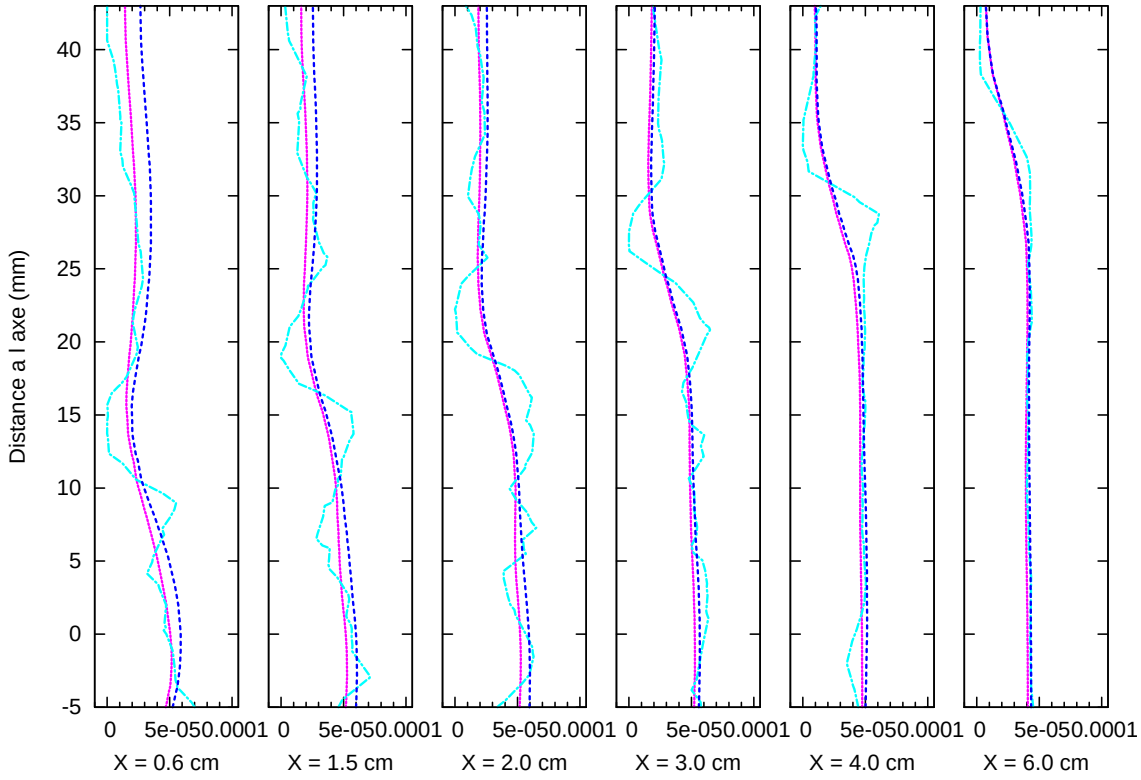

FIG. 6.51 – *Profils de $\widetilde{Y}_{NO}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas PEUL lissé à 60 000 particules (petits tirets bleus), PEUL lissé à 30 000 particules (pointillés cyan) et PEUL non lissé à 30 000 particules (pointillés roses).*

CH, CH_2, NNH, etc... La sous-estimation du NO produit via ces mécanismes conduit à une sous-estimation globale des niveaux relevés en sortie. A noter que dans le cas présent, où la flamme se développe relativement près de la stœchiométrie, le mécanisme prépondérant est le mécanisme du NO-thermique, ce qui explique que les écarts relevés en sortie restent relativement faibles.

Ce type de difficulté est généralement rencontré lors de l'utilisation de mécanismes réactionnels en régime turbulent suivant une approche pseudo-laminaire, comme c'est le cas dans ce travail sur PRECCINSTA[2].

Ce point constitue la principale limitation de la méthode FPI/cinétique, mais certaines améliorations, permettant de surmonter cette difficulté, peuvent toutefois être envisagées.

Comparaisons entre FPI et PEUL :

La différence majeure existant entre les modèles proposés et PEUL réside dans le fait que cette dernière approche a été uniquement développée et utilisée dans un cadre stationnaire. La modélisation du mélange turbulent, effectuée à la fois via le terme de dispersion turbulente et via le terme de micromélange, est alors très délicate voire impossible à réaliser avec précision. Lorsque l'on considère la formation de NO la difficulté est encore accrue du fait de la dynamique chimique particulièrement lente de cette espèce qui fait que sa production est un phénomène très sensible à l'instationnarité de l'écoulement.

Avec PEUL, l'effet du mélange sur la production de NO est essentiellement pris en compte via la dispersion turbulente des particules. Si ce phénomène est mal modélisé, la majorité des particules ont

[2]Sur PRECCINSTA, nous avons observé que l'utilisation de l'approche pseudo-laminaire conduisait à une sous-estimation importante des niveaux de CO simulés au sein de la flamme, et ceci pour des raisons similaires.

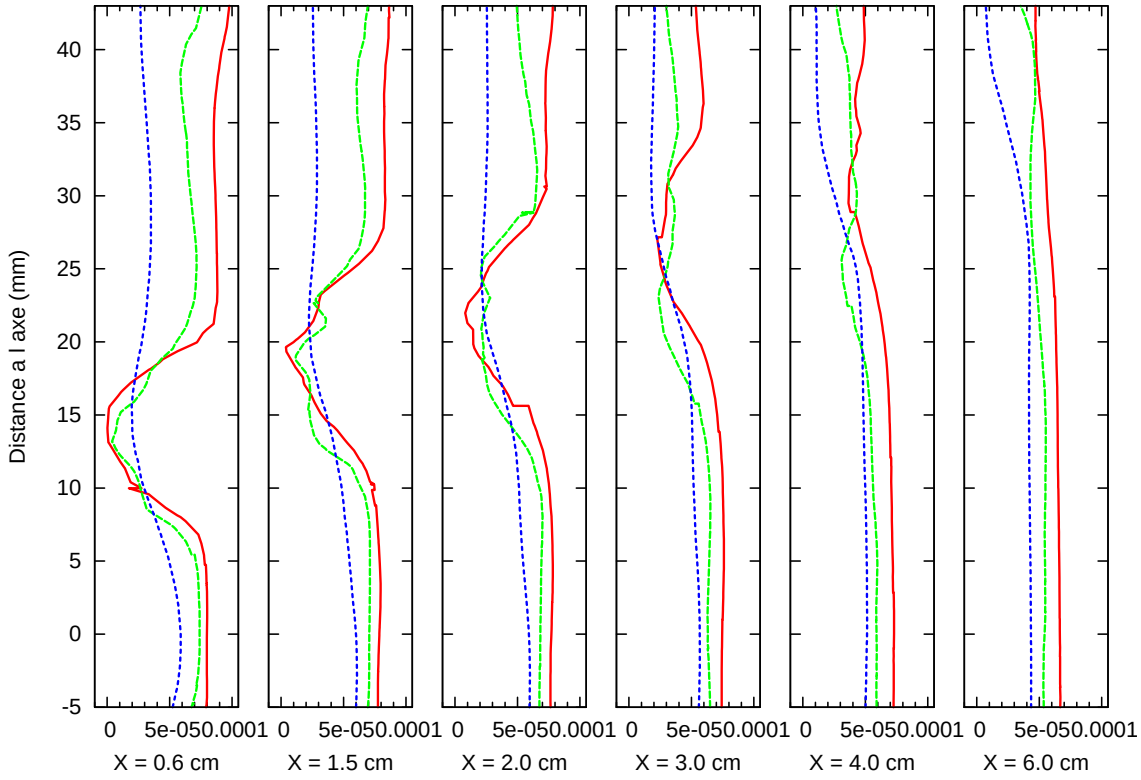

FIG. 6.52 – *Profils de $\widetilde{Y}_{NO}$ à travers la chambre PRECCINSTA pour les cas FPI-NOx (rouge continu), FPI/cinétique (tirets verts) et PEUL lissé à 60 000 particules (petits tirets bleus).*

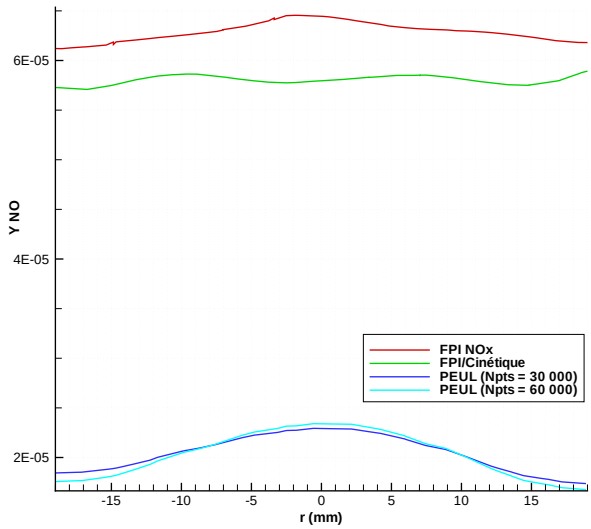

FIG. 6.53 – *Profils de $\widetilde{Y}_{NO}$ en $X = 15$ cm, pour les cas FPI-NOx (rouge), FPI/cinétique (vert) et PEUL à 30 000 (bleu) et 60 000 (cyan) points.*

tendance à suivre l'écoulement moyen et un faible nombre d'entre elles passe par les zones de recirculations. De ce fait, la précision statistique des moyennes dans ces régions est diminuée et peut conduire à la sous-estimation des niveaux prédits. Lorsque le nombre de particules injectées est augmenté, la précision statistique des moyennes dans ces zones est accrue et les niveaux relevés sont légèrement supérieurs (voir figure 6.52).

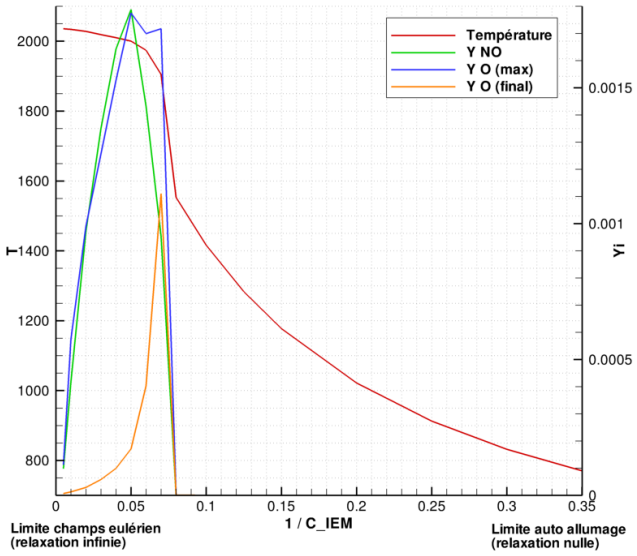

FIG. 6.54 – *Evolution de quelques grandeurs thermochimiques en fonction de la constante du modèle IEM pour une trajectoire particulière suivie par une particule injectée lors d'un calcul PEUL.*

Une autre interprétation possible des tendances observées est liée à l'imprécision du modèle de micromélange IEM. La figure 6.54 montre l'évolution de différentes grandeurs (dont Y_{NO} et T) en fonction de la constante de ce modèle pour une trajectoire particulière au sein de l'écoulement (dans tous les cas, la particule considérée suit exactement le même chemin). Les cas limites pouvant être rencontrés sont caractérisés ci-dessous :

- pour des valeurs élevées de C_{IEM} (soit, $1/C_{IEM}$ faible), on se rapproche d'un mélange infiniment rapide qui tend à ramener instantanément l'état des particules vers l'état du champ eulérien. Dans ce contexte, la relaxation est plus rapide que les processus chimiques conduisant à la formation des précurseurs de NO (dont l'atome O représenté ici), ce qui ne permet pas de modéliser correctement sa production ;
- pour des valeurs faibles de C_{IEM} (soit, $1/C_{IEM}$ grand), on tend vers le cas du réacteur homogène parfaitement prémélangé (terme de micromélange nul). L'évolution des espèces PEUL est alors essentiellement pilotée par la chimie. Au voisinage de cette limite, la température lagrangienne est très faible car les particules fluides traversent le domaine de calcul sans s'allumer complètement. La température finale est dans ce cas trop faible pour former NO.

Dans une zone intermédiaire, située au voisinage de $1/C_{IEM} = 0{,}05$, le niveau de NO formé est à son maximum. La température reste suffisamment élevée pour que cette espèce soit formée en quantité, et le mélange suffisamment fort pour que les particules se consument entièrement avant d'être évacuées du domaine. La limite de cette zone est atteinte très rapidement puisque pour $1/C_{IEM} = 0{,}08$, la combustion en sortie de chambre est incomplète et les niveaux de NO produits sont nuls.

Ce problème a par le passé été discuté par Correa [52] ou Ren et Pope [183] via l'étude de réacteurs partiellement mélangés (PaSR). Ces auteurs ont ainsi conclu que le modèle IEM restait toujours trop proche de la limite de mélange infiniment rapide avant que l'extinction de la flamme n'intervienne brusquement. L'utilisation de modèles de micromélange alternatifs, comme le modèle de Curl [54], semble préférable dans l'application étudiée.

6.8 Conclusion

Le modèle FPI couplé à une approche LES ont pu être validé sur le cas d'un brûleur pauvre swirlé, particulièrement favorable à l'utilisation de la LES. Les extensions du modèle aux flammes partiellement prémélangées et à la formation de NO ont également pu être testées.

Dans un premier temps, les calculs ont été réalisés dans le cadre d'une combustion parfaitement prémélangée. Globalement, lorsque l'on considère les résultats obtenus, de bons accords ont été trouvés entre le calcul et l'expérience, notamment au niveau des grandeurs thermochimiques moyennes. On a toutefois pu noter que les profils de Y_{CO} calculés présentaient deux pics distincts, là où l'expérience n'en prédit qu'un seul. Compte tenu de la physique de l'écoulement simulé, il semblerait que ces différences soient principalement imputables à des erreurs de mesure.

L'influence du raffinement du maillage a ensuite pu être vérifiée sur ces simulations. Cette influence est particulièrement marquée sur les profils de fluctuations de vitesses et de température. Le raffinement n'a en revanche que peu d'effets sur les profils des grandeurs moyennes. Les profils de T''_{RMS} ont mis en évidence le fait que le modèle de variance permet de compenser la perte de précision réalisée lorsqu'un maillage grossier est utilisé. Cette tendance est parfaitement conforme aux résultats attendus.

De même que lors de la simulation de la configuration de Nandula, ces calculs ont permis de montrer que l'approche FPI, telle qu'elle a été utilisée dans un cadre LES, est assez prédictive. Ainsi, la modification de la constante du modèle n'a que peu d'influence sur les profils des grandeurs moyennes (le raffinement du maillage joue très peu sur ces grandeurs également). En revanche, la constante possède un effet plus marqué sur les grandeurs fluctuantes. Un choix adéquat de celle-ci permet de compenser la perte de précision liée à la sous résolution du maillage et de retrouver des niveaux, par exemple de T''_{RMS}, en accord avec l'expérience.

Différents modèles de combustion turbulente ont également pu être comparés. Il apparaît que le modèle FPI développé constitue un très bon compromis entre les approches pseudo-laminaire et TFLES couramment utilisées avec le code CEDRE. Ainsi, le modèle pseudo-laminaire est incapable de prédire correctement la formation d'espèces intermédiaires polluantes telles que CO, alors que la TFLES amorti les battements de la flamme turbulente.

A l'issue de ces calculs, la configuration complète, avec injection de carburant dans les vrilles, a été étudiée à l'aide du modèle FPI étendu à la combustion partiellement prémélangée. Les résultats obtenus sur ce cas on mis en évidence une mauvaise prédiction du mélange turbulent entre l'oxydant et le carburant dans l'injecteur. Ceci pourrait toutefois être surmontée en raffinant d'avantage le maillage en amont de l'entrée de la chambre. Cette difficulté à prédire le mélange entre les réactifs se traduit par une importante stratification de la richesse en entrée de chambre.

Les profils de température et de fractions massiques montrent de très bons accords avec l'expérience. Ainsi, en comparaison aux calculs parfaitement mélangés, l'ouverture de la flamme semble mieux prédite et sa structure mieux restituée. Ces calculs doivent cependant être prolongés afin d'étudier de façon approfondie les comportements du modèle sous ces conditions (une étude de sensibilité des modèles devrait être menée).

Pour finir, les modèles FPI-NOx et FPI/cinétique, permettant l'extension de FPI à la prise en compte de la formation de NO, ont été testés et comparés au modèle stationnaire PEUL de l'ONERA. Les simulations effectuées ont permis de vérifier la capacité des modèles proposés à prendre en compte la formation de NO dans les gaz chauds, à l'équilibre. En particulier, nous avons pu mettre en évidence le lien entre la quantité de NO produite et le temps de séjour des particules fluides dans la géométrie. On a pu noter que FPI/cinétique tend à restituer des niveaux de NO légèrement inférieurs à ceux prédits par FPI-NOx. Dans ce cas où le front de flamme est sous-résolu, la fermeture pseudo-laminaire employée s'avère en effet particulièrement imprécise (impossibilité de modéliser les pics de certains précurseurs de NO). Lorsque l'on considère les résultats PEUL, les niveaux relevés sont trois fois inférieurs à ceux obtenus avec FPI. Toutefois, étant donné les limitations de l'approche dans le cas présent, il n'est pas possible de conclure sur la pertinence des résultats observés.

Conclusion

Résultats importants

L'objectif principal de cette thèse était de proposer et de valider une approche numérique permettant de caractériser la formation des principaux polluants au sein de foyers aéronautiques. Pour cela, nous avons choisi d'utiliser le code CEDRE de l'ONERA, adapté à la résolution des équations de Navier-Stokes multiespèces dans des configurations complexes. De nombreux modèles ont été développés au sein de ce code de manière à atteindre les objectifs fixés tout en respectant les contraintes liées à une utilisation du code dans un contexte industriel. Un résumé de la démarche proposée dans ce mémoire ainsi que des principaux résultats obtenus est rappelé ici.

Dans un premier temps, le modèle de réduction de la chimmie FPI a été implanté dans le code CEDRE. Celui-ci a été retenu car il présente la capacité de tenir compte d'une chimie détaillée via la création de tables, pour un coût de calcul réduit. Du fait de l'architecture du code, le couplage entre les tables FPI et CEDRE a été réalisé via les termes sources chimiques des espèces transportées, ce qui constitue un mode de couplage faible. Celui-ci introduit différentes limitations pouvant conduire à une mauvaise estimation de la structure des flammes simulées. Le modèle ne permet notamment pas de conserver la masse des atomes dans l'écoulement ce qui induit un décalage entre l'état thermochimique local (dans le domaine de calcul) et tabulé. Pour assurer la compatibilité entre les données tabulées et transportées, il s'est avéré nécessaire de corriger les termes sources FPI en faisant intervenir un terme de rappel dépendant d'un temps caractéristique chimique. Cette méthode originale a été validée avec succès sur le cas simple d'une flamme laminaire de prémélange libre, à différentes richesses.

Les interactions entre les processus chimiques et la turbulence ont été modélisées à l'aide de PDF présumées sous la forme de fonctions β. Cette méthode bien connue possède deux avantages majeurs : d'une part, elle permet de considérer l'effet de la turbulence sur toutes les grandeurs chimiques (dans le régime des flammelettes) et d'autre part, elle permet la construction préalable de tables, ce qui facilite grandement son implémentation dans le code de CFD. Les tables FPI "filtrées" ainsi créées, sont indexées par les deux premiers moments statistiques de la variable d'avancement et, éventuellement, de la fraction de mélange. Les variances de ces grandeurs doivent alors être évaluées soit via la résolution d'équations de transport spécifiques, soit à l'aide de relations algébriques. Dans les deux cas, les taux de dissipation scalaires doivent être modélisés.

L'approche FPI/PDF présumées permet d'appréhender la production de la plupart des espèces majoritaires et minoritaires dans l'écoulement. Toutefois, lorsque l'on considère l'espèce NO, l'approche telle qu'elle a été proposée ne peut plus être appliqué directement. En effet, NO possède une dynamique chimique lente et les approches classiques basées sur le concept de flammelettes (comme FPI), ne sont plus valides. Pour cette raison, deux méthodes originales, basées sur l'utilisation des proprietés thermochimiques pouvant être interpolées dans les tables FPI, ont été proposées. La première est fondée sur la création de tables spécifiques à NO, indexées par une variable d'avancement capable de représenter l'évolution de l'état chimique des gaz hors équilibre. Dans ce cas, les tables FPI-NOx sont construites en extrapolant les termes sources chimiques issus des tables d'origine dans les gaz brûlés. La seconde méthode permet de calculer les taux de production de NO par une approche cinétique en s'appuyant sur un sous mécanisme réactionnel détaillé pour cette espèce. Les concentrations des précurseurs entrant en jeu lors de la formation/disparition de NO sont alors interpolées dans la table FPI classique.

Une fois les modèles détaillés, nous avons procédé à une première validation de ceux-ci sur le cas simple d'une flamme turbulente de prémélange pauvre, étudiée expérimentalement pas Nandula *et al.* [149], [150]. Dans la configuration retenue, la flamme est stabilisée par un accroche-flamme de forme conique placé au sein d'une chambre à section carrée. Cette flamme de prémélange est une des rares

disponible dans la littérature, pour laquelle on dispose d'une base de données expérimentale détaillée concernant l'état thermochimique des gaz. Sur ce cas, de nombreux calculs RANS paramétriques et LES ont été réalisés.

Les calculs RANS avaient pour but de comparer entre eux les modèles de variance (résolution d'une équation de transport ou relations algébriques) et de dissipation scalaire proposés. Les résultats obtenus à l'aide de ces différentes approches n'ont pas montré de différences majeures. Par conséquent, la méthode retenue lors des calculs LES consiste à évaluer la variance (de z ou de c) à l'aide d'une relation algérbique dérivée à partir d'une dissipation scalaire évaluée suivant le modèle de Vervisch *et al.*.

Par ailleurs, il a été observé que l'approche RANS surestime largement l'épaisseur de la flamme turbulente ainsi que les niveaux maximum de CO (d'un facteur proche de 5). Il a également été montré que les résultats obtenus étaient particulièrement sensibles aux constantes utilisées. L'approche RANS s'est donc révélée très utile pour la réalisation de calculs paramétriques des différents modèles, mais inadaptée à la résolution précise de la structure de la flamme et de ses émissions.

Les calculs LES menés par la suite sur la flamme de Nandula ont permis de montrer l'applicabilité de l'approche dans le cadre de simulations instationnaires. La comparaison des différents calculs a conduit à des conclusions identiques à celles formulées dans un contexte RANS. La LES présente toutefois deux avantages majeurs : d'une part, elle permet de retrouver des niveaux corrects de CO dans le front de flamme et, d'autre part, elle est plus prédictive (l'influence des constantes est moindre).

Il a par ailleurs été observé que les calculs LES ne permettent pas de reproduire correctement le champ aérodynamique au sein de la chambre. Cette difficulté peut être attribuée au fait que les maillages employés ne sont pas suffisamment résolus pour restituer convenablement le décollement de l'écoulement au nez de l'accroche flamme.

De façon générale, on a pu noter que FPI était incapable de restituer les niveaux expérimentaux de CO dans les gaz brûlés. Une analyse plus approfondie des caractéristiques de la flamme a montré que le cas étudié évolue en fait hors du régime des flammelettes, dans un domaine peu favorable à l'utilisation de FPI. Le régime observé effectivement est caractérisé par une extinction partielle du front de flamme et par la formation locale de poches, pouvant conduire à une composition des gaz brûlés hors équilibre. La configuration retenue s'est donc révélée *a posteriori* inappropriée aux validations proposées.

Les méthodes développées ont pour finir été employées sur un cas représentatif de configurations réelles : le brûleur PRECCINSTA. Cet injecteur swirlé a été largement étudié par le passé, de sorte que l'on dispose de nombreux résultats numériques et expérimentaux. Seuls des calculs LES ont été menés sur ce cas. En première approximation, la géométrie initiale a été simplifiée de manière à obtenir un prémélange parfait en entrée de chambre, ce qui facilite grandement la mise en œuvre des calculs. Deux maillages différents ont été testés et les résultats FPI ont également été comparés à ceux obtenus à l'aide d'autres modèles de combustion turbulente (notamment le modèle de flamme épaissie).

Les calculs FPI donnent de très bons résultats, en particulier lorsque l'on considère les profils de température et de fraction massique de CO_2 moyens. On notera cependant que les profils de Y_{CO} simulés présentent une forme en double pic qui ne se retrouve pas sur l'expérience. Cette différence peut toutefois être imputable à des erreurs de mesure compte tenu de la physique de l'écoulement.

L'utilisation d'un maillage plus raffiné n'apporte pas d'améliorations notables sur les grandeurs moyennes dans l'écoulement. Cependant, si on compare les températures RMS, une nette amélioration des niveaux prédits est relevée. Des tendances identiques ont été observées en augmentant la constante du modèle de variance de sous-maille.

Contrairement à l'approche pseudo-laminaire, les concentrations des espèces sont restituées avec une plus grande précision grâce à FPI (en particulier CO). En outre, comparé à la flamme épaissie, le modèle FPI améliore la précision des fluctuations turbulentes du front de flamme simulées. Ainsi, FPI constitue une excellente alternative à ces deux modèles.

L'extension de FPI à la combustion partiellement prémélangée a également été abordée au cours

de cette thèse. Cette fonctionnalité du modèle est particulièrement intéressante en vue de la simulation d'applications industrielles sachant que les foyers actuels s'orientent vers ce type de combustion. Un seul calcul a été effectué dans ce contexte du fait des temps de calcul importants requis.

Bien que les résultats aient prouvé la capacité de FPI à simuler une flamme en présence d'inhomogénéités de richesse, certaines difficultés, liées à la modélisation du mélange turbulent entre oxydant et carburant, ont été mises en évidence. Il est en effet apparu que les deux réactifs ne se mélangent pas suffisamment vite dans les vrilles, ce qui provoque une stratification importante du mélange en entrée de chambre. Ceci conduit à la présence d'une zone plus riche que la moyenne au sein de la recirculation centrale, et à une estimation incorrecte de certaines espèces dans les gaz brûlés. Afin de réduire ce phénomène de stratification, il semble nécessaire de raffiner le maillage en amont de la chambre. Malgré cette difficulté, la méthode s'est révélée particulièrement apte à restituer la structure correcte de la flamme partiellement prémélangée. Les profils des fractions massiques des espèces majoritaires sont ainsi en bon accord avec les résultats expérimentaux.

A la suite de ces tests plutôt concluants, la production de NO au sein de la configuration parfaitement prémélangée a été évaluée à l'aide des modèles dédiés FPI-NOx et FPI/cinétique. Les résultats ainsi obtenus ont pu être comparés à ceux issus de calculs réalisés avec un modèle de post traitement stationnaire eulérien-lagrangien, résolvant les équations de conservation pour les PDF jointes position/composition (modèle PEUL). Compte tenu du fait que l'on ne dispose pas de données expérimentales concernant la caractérisation de l'espèce NO au sein de l'écoulement, il a malheureusement été impossible de conclure sur la validité des approches développées.

Les niveaux de NO prédits par PEUL sont toujours sous-estimés d'un facteur proche de 3 par rapport à ceux issus des calculs FPI-NOx. Ceci peut s'expliquer par les nombreuses approximations que contiennent PEUL, notamment au niveau du modèle de micromélange. L'analyse des champs de NO obtenus avec la méthode FPI-NOx a montré que la formation de cette espèce était correlée avec le temps de résidence de l'écoulement dans la chambre. Ainsi, NO est formé de préférence au sein des zones de recirculation, là où le mélange à haute température stagne. En sortie de chambre en revanche, les niveaux relevés sont proches de ceux déterminés derrière une flamme laminaire de prémélange en $c = 1$. Compte tenu des limitation de l'approche PEUL, on serait tenté de donner plus de crédit aux résultats obtenus avec FPI-NOx.

Perspectives

Le travail présenté dans ce mémoire a contribué à révéler et à surmonter certains points délicats quant à la modélisation et à l'exploitation numérique de l'approche FPI dans un contexte industriel. Ainsi, l'implémentation dans CEDRE du modèle FPI/PDF présumées ayant été validée sur les cas de calculs discutés, plusieurs voies d'amélioration, à la fois en terme de modélisation et d'applications, peuvent être envisagées.

Du point de vue de la modélisation, la création de tables FPI ainsi que leur couplage avec le code CEDRE de l'ONERA s'est révélé très satisfaisant au cours des tests réalisés. FPI constitue donc une base solide permettant d'effectuer des calculs de flammes prémélangées ou partiellement prémélangées avec CEDRE en tenant compte d'une chimie complexe.

Concernant l'approche à PDF présumées, il a été établi par Fiorina et al. [77] que l'utilisation de β-PDF ne permet pas de retrouver une vitesse de flamme turbulente correcte. Pour corriger cette difficulté, les auteurs ont proposé un modèle basé sur un filtrage explicite des tables. Par ailleurs, Moureau *et al.* [145] ont également développé une approche qui peut se révéler intéressante dans ce contexte. Les auteurs introduisent une méthode de couplage entre le champ d'une fonction G et un champ de variable d'avancement dans le cadre d'une chimie simple, pouvant être étendue à l'utilisation de tables FPI. Toutefois, de notre point de vue, cette méthode n'est pas encore assez mûre pour pouvoir être appliquée dans un contexte industriel.

Un gros travail doit également être accompli concernant l'extension de FPI à la prédiction de la formation de NO. En particulier, les modèles présentés n'ont pas pu être validés par comparaison à l'expérience. Il serait donc intéressant à l'avenir de définir un nouveau cas test de validation pour lequel on dispose de mesures expérimentales de concentration de NO, et qui serait adapté à l'utilisation de l'approche FPI-NOx. De cette manière, une validation et une analyse plus approfondies de la méthode pourraient être menées afin d'identifier ses points forts et ses points faibles. Il serait notamment possible d'évaluer la pertinence de l'utilisation d'une fonction gaussienne pour modéliser la PDF de la nouvelle variable d'avancement.

Les principales perspectives envisagées à l'issue de cette thèse concernent essentiellement l'application et l'extension de FPI à différents types de configurations. En effet, au cours de cette thèse, FPI n'a été employé que dans le cadre de flammes parfaitement prémélangées (et partiellement prémélangée sur PRECCINSTA). Ainsi, l'extension du modèle aux flammes de diffusion pourrait s'avérer utile à l'avenir(Rullaud [188]). L'utilisation de FPI prémélange/diffusion pourrait permettre de simuler une large gamme de cas différents, depuis les flammes jets turbulentes jusqu'aux brûleurs industriels avancés pour lesquels une flamme de diffusion pilote est créée pour stabiliser la combustion.

Pour finir, l'extension de FPI aux flammes non adiabatiques a été discutée rapidement dans ce mémoire et validée sur un cas laminaire très simple. A l'avenir, le couplage entre ce type de table et un modèle de turbulence peut se révéler très intéressant. Il a en effet été noté dans ce mémoire que la formation de NO était particulièrement sensible à la température de flamme, et donc aux pertes thermiques. La formation des suies est également particulièrement influencée par les pertes thermiques étant donné que ces particules rayonnent beaucoup. Une thèse est d'ailleurs actuellement en cours à l'ONERA concernant la prédiction de la formation des suies en se basant sur FPI.

Annexes

Annexe A

Mécanisme de Smooke et Giovangigli (S&G) à 16 espèces et 25 réactions

Unités : cm-mol-K-s-J.

		A	β	Ea
01	$O_2 + H \longrightarrow OH + O$	$2.00E+14$	0.0	16800
02	$H_2 + O \longrightarrow OH + H$	$1.80E+10$	1.0	8827
03	$H_2 + OH \longrightarrow H_2O + H$	$1.17E+09$	1.3	3626
04	$OH + OH \longrightarrow H_2O + O$	$6.00E+08$	1.3	0
05	$H + O_2 + M \longrightarrow HO_2 + M$	$2.30E+18$	-0.8	0
06	$H + HO_2 \longrightarrow OH + OH$	$1.50E+14$	0.0	1004
07	$H + HO_2 \longrightarrow H_2 + O_2$	$2.50E+13$	0.0	700
08	$OH + HO_2 \longrightarrow H_2O + O_2$	$2.00E+13$	0.0	1000
09	$CO + OH \longrightarrow CO_2 + H$	$1.51E+07$	1.3	-760
10	$CH_4 \longrightarrow CH_3 + H$	$2.30E+38$	-7.0	114357
11	$CH_4 + H \longrightarrow CH_3 + H_2$	$2.20E+04$	3.0	8751
12	$CH_4 + OH \longrightarrow CH_3 + H_2O$	$1.60E+06$	2.1	2460
13	$CH_3 + O \longrightarrow CH_2O + H$	$6.80E+13$	0.0	0
14	$CH_2O + H \longrightarrow HCO + H_2O$	$2.50E+13$	0.0	3992
15	$CH_2O + OH \longrightarrow HCO + H_2O$	$3.00E+13$	0.0	1194
16	$HCO + H \longrightarrow CO + H_2$	$4.00E+13$	0.0	0
17	$HCO + M \longrightarrow CO + H + M$	$1.60E+14$	0.0	14700
18	$CH_3 + O_2 \longrightarrow CH_3O + O$	$7.00E+12$	0.0	25653
19	$CH_3O + H \longrightarrow CH_2O + H_2$	$2.00E+13$	0.0	0
20	$CH_3O + M \longrightarrow CH_2O + H + M$	$2.40E+13$	0.0	28813
21	$HO_2 + HO_2 \longrightarrow H_2O_2 + O_2$	$2.00E+12$	0.0	0
22	$H_2O_2 + M \longrightarrow OH + OH + M$	$1.30E+17$	0.0	45505
23	$H_2O_2 + OH \longrightarrow H_2O + HO_2$	$1.00E+13$	0.0	1800
24	$OH + H + M \longrightarrow H_2O + M$	$2.20E+22$	-2.0	0
25	$H + H + M \longrightarrow H_2 + M$	$1.80E+18$	-1.0	0

Les efficacités de troisième corps utilisées sont les suivantes : CH_4 : 6.5, CO_2 : 1.5, CO : 0.75, N_2 : 0.40, O_2 : 0.40, H_2O : 6.5, et 1. pour toutes les autres espèces.

Annexe B

Construction de tables chimiques étendues : application aux flammes non adiabatiques

B.1 Extension de FPI aux flammes non adiabatiques

Dans le cadre de notre travail, le modèle FPI a été étendu aux flammes non adiabatiques suivant la méthode proposée par Van Oijen [155] pour le modèle FGM.

Cette méthode est fondée sur la réalisation d'une série de calculs de flammes laminaires dont l'enthalpie initiale du mélange est variée. Dans un premier temps, on modifie l'enthalpie des gaz frais en altérant la température initiale du mélange sur une plage relativement restreinte (par exemple entre 240 et 360 K, par pas de 30 ou 40 K). Afin de faire varier davantage l'enthalpie, on modifie la composition des gaz frais. Pour cela, une certaine proportion des réactifs est transformée en produits de combustion (généralement H_2O et CO_2). La fraction de gaz brûlés initiale est évaluée de telle sorte que la conservation des atomes soit vérifiée par rapport au calcul précédent.

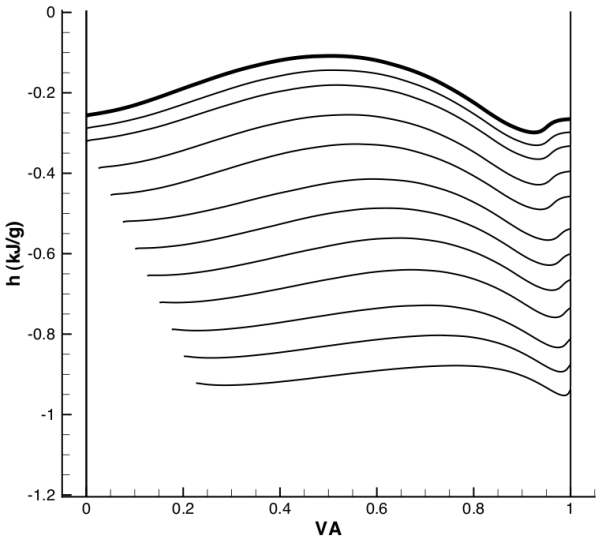

Fig. B.1 – *Evolution de h en fonction de la variable d'avancement à travers différentes flammes calculées à partir de mélanges initiaux possédant des enthalpies différentes (la flamme de référence est en gras).*

Les tables ainsi obtenues comprenent deux dimensions : la variable d'avancement c et l'enthalpie du mélange h. La figure B.1 présente un exemple de table construite sous ces conditions avec le mécanisme réactionnel de Smooke et Giovangigli [203] pour le méthane, à richesse 1.

B.2 Validation de la méthode

B.2.1 Présentation du cas test

Le modèle FPI pour les flammes non adiabtiques est validé à travers l'étude de flammes laminaires librement propagatives 1D pour lesquelles des pertes thermiques radiatives sont considérées [194]. Ce cas a, par le passé, été utilisé par Fiorina *et al.* [74] pour valider l'extension de la version originale de FPI à ce type de flamme.

Les pertes thermiques ont été simplement modélisées via l'hypothèse de milieu optiquement mince. Sous cette hypothèse, on peut écrire le terme source d'énergie correspondant aux pertes thermiques radiatives sous la forme suivante [16] :

$$\dot{Q}_t = -4\sigma\alpha \left(T^4 - T_0^4\right), \tag{B.1}$$

où T_0 est la température de référence du milieu environnant supposée égale à 300 K, σ est la constante de Stefan-Boltzman valant 5,67 x 10^{-8} W.m^{-2}.K^{-4}, et α représente le coefficient moyen d'absorption de Planck. En général, ce coefficient est évalué suivant : $\alpha = \sum_{i=1}^{N} P_i \alpha_i$, où α_i représente les coefficients d'absorption de chaque espèce et P_i les pressions partielles correspondantes. Les coefficients d'absorption par espèce peuvent ensuite être déterminés à partir de polynômes de degré 4 dépendant de la température (voir Ju et al. [114] pour plus de précisions).

Nous ne présentons ici que des résultats relatifs à une flamme méthane/air stœchiométrique dans les conditions atmosphériques. Pour simuler différents niveaux de pertes thermiques, le coefficient d'absorption moyen α a été considéré comme un paramètre variable. En fait, trois flammes correspondant à trois valeurs de α constantes (10 m^{-1}, 20 m^{-1}, 40 m^{-1}) sont ici présentées. A noter que pour ces calculs, la procédure permettant la conservation du taux de dégagement de chaleur à travers la flamme a été utilisée avec le code CEDRE.

B.2.2 Résultats

Les profils de température à travers ces trois flammes, obtenus à l'aide de PREMIX (cas de référence) et du code CEDRE, sont tracés figure B.2.

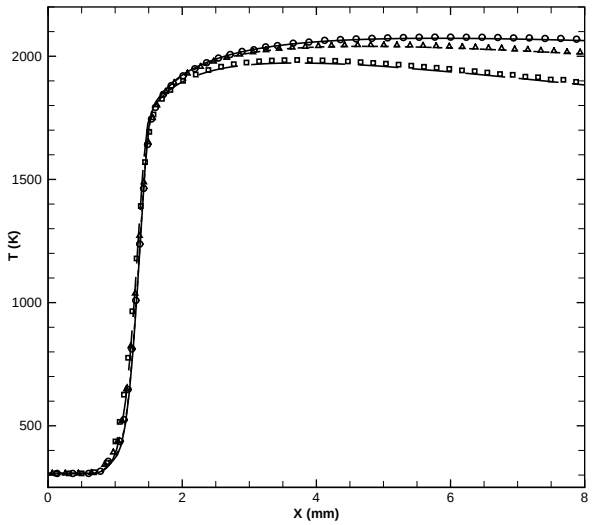

FIG. B.2 – *Profils de température à travers trois flammes laminaires de prémélange librement propagatives soumises à des pertes thermiques radiatives (symboles, calculs PREMIX, lignes, calculs CEDRE). Traits pleins + ronds : α = 10 m^{-1}, petits tirets + triangles : α = 20 m^{-1}, longs tirets + carrés : α = 40 m^{-1}.*

D'excellents accords sont relevés entre les résultats CEDRE et PREMIX, validant ainsi la méthode FPI bidimensionnelle pour les flammes non adiabatiques. Des écarts assez faibles sont toutefois observés ($< 1\%$), augmentant lorsque le coefficient d'absorption moyen augmente. Des résultats similaires sont observés lorsque l'on compare les profils des espèces principales transportées par CEDRE.

Annexe C

Conservation de la masse et de l'énergie lors du couplage FPI/CEDRE

A titre d'exemple, nous ne considérons ici que des flammes méthane/air sous des conditions atmosphériques (les mécanismes réactionnels de Smooke et Giovangigli [203] et GRI-Mech 3.0 [202] ont été utilisés). La procédure proposée est toutefois transposable à d'autres carburants et conditions opératoires.

C.1 Problématique

CEDRE étant un code basé sur des méthodes numériques conservatives, la conservation de la masse durant le calcul est toujours assurée. Suivant ce principe et en considérant que le nombre d'espèces transportées par le code de CFD est réduit par rapport à celles contenues au sein du schéma réactionnel détaillé, la répartition de la masse totale entre les espèces suivies par CEDRE et par PREMIX est différente. Ainsi, si on considère que N_e est le nombre d'espèces PREMIX et N_r le nombre d'espèces CEDRE, on a :

$$\sum_{i=1}^{N_e} Y_i^{PREMIX} = 1 \quad \text{et} \quad \sum_{i=1}^{N_r} Y_i^{CEDRE} = 1, \tag{C.1}$$

où les fractions massiques PREMIX sont celles directement évaluées dans la table et les fractions CEDRE sont celles transportées par le code, avec leurs taux de réactions interpolés dans les tables. En considérant une espèce M particulière, sachant que $N_r < N_e$, on a donc :

$$Y_M^{PREMIX} \neq Y_M^{CEDRE}. \tag{C.2}$$

Ainsi, la composition du système transporté par CEDRE peut s'avérer différente de la composition observée dans le calcul PREMIX du fait que le nombre d'espèces vu par CEDRE est inférieur au nombre d'espèces vues par PREMIX. Cette différence est liée au fait que la masse des espèces non transportées par CEDRE est réparties sur celle des espèces transportées de manière à conserver la relation $\sum_{i=1}^{N_r} Y_i^{CEDRE} = 1$.

Pour limiter au maximum ce phénomène, le jeu d'espèces transportées doit être choisi soigneusement et une procédure doit être introduite pour s'assurer que la composition du mélange transporté n'est pas trop altérée au cours du calcul.

Un problème identique se pose lorsque l'on considère la conservation de l'énergie à travers la flamme. Le fait de ne transporter qu'un nombre réduit d'espèces ne permet en effet pas de retrouver localement l'énergie totale du système de référence déterminé par PREMIX. Une procédure analogue à celle utilisée pour assurer la conservation de la composition du mélange doit donc être employée. A noter que l'énergie totale du mélange étant directement liée à sa composition, le fait d'imposer la conservation de ces deux grandeurs à la fois conduit à un problème mal posé.

C.2 Choix des espèces transportées

Les figures C.1 représentent l'évolution de la somme des fractions massiques des espèces pour différents systèmes transportés réduits, à travers quatre flammes à richesse variable. Les espèces majoritaires dans le mélange représentent plus de $99,2\%$ de la masse totale sur une large gamme de richesse. Avec une erreur inférieure à 1%, on peut donc supposer que le transport des espèces majoritaires seules est suffisant.

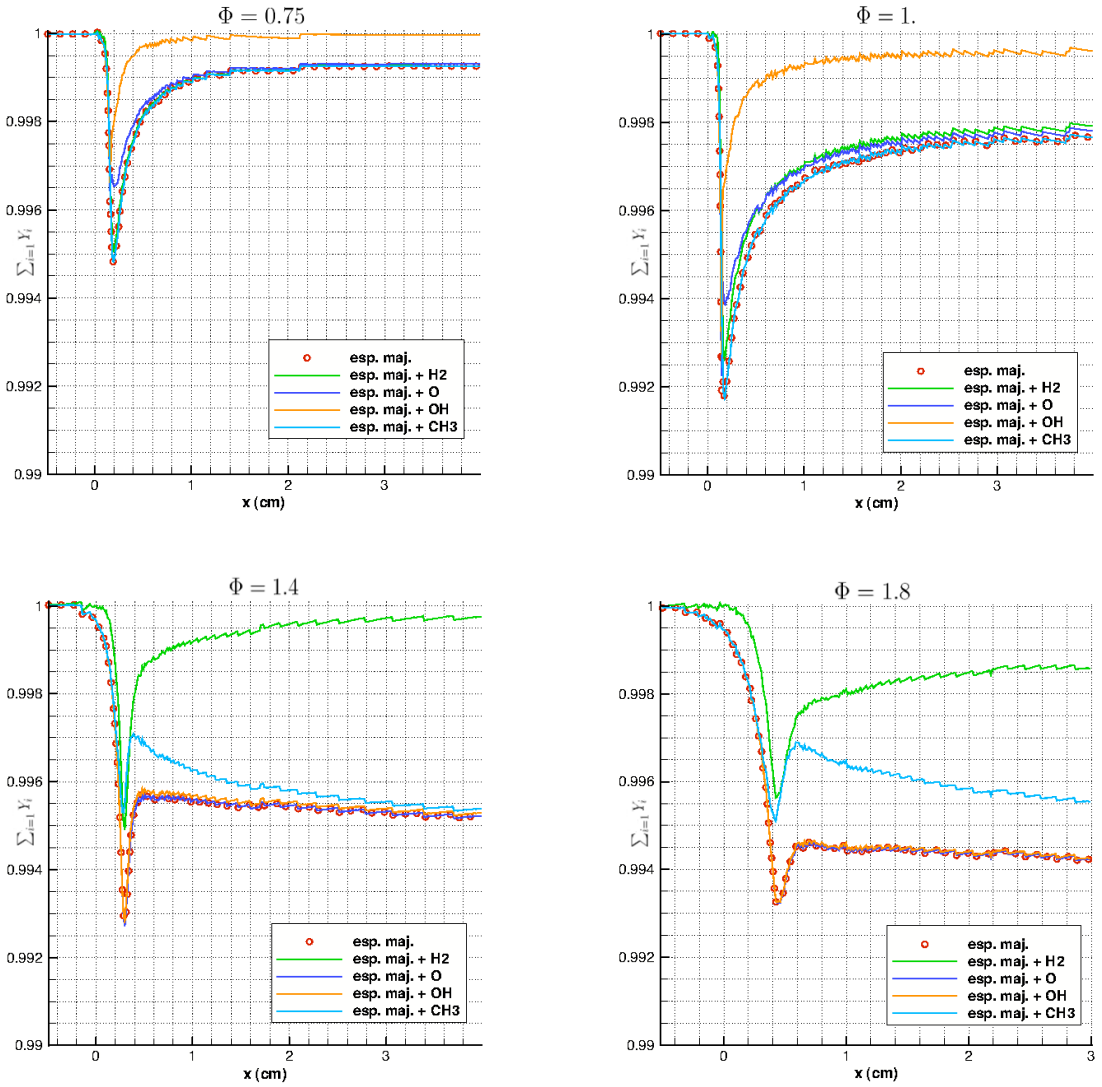

FIG. C.1 – *Evolution de la somme des fractions massiques des espèces contenues dans différents systèmes réduits à travers quatre flammes méthane/air.*

Notons que Galpin *et al.* [83], [100] se basent sur des fractions massiques intégrées à travers chaque flamme pour déterminer les espèces à transporter. En se basant sur ce critère, il semble nécessaire d'ajouter H_2 pour permettre une conservation correcte de la composition du mélange à richesse élevée.

Si on considère maintenant l'évolution du dégagement de chaleur, on peut étudier en particulier l'intégrale à travers la flamme de $\dot{\omega}_T$, soit :

$$\dot{\Omega}_T = -\int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{i=1}^{N} \dot{\omega}_i h_{f,i}^0 dx, \tag{C.3}$$

où $h^0_{f,i}$ représente l'enthalpie de formation de l'espèce i à la pression et à la température de référence.

Le tableau C.1 présente les écarts en pourcentage entre le $\dot{\Omega}_T$ calculé pour différents jeux réduits d'espèces, et le $\dot{\Omega}_T$ réel, issu des calculs PREMIX de référence. Pour compléter cette analyse, la figure C.2 présente les profils des dégagements de chaleur obtenus à partir des différents systèmes étudiés à travers la flamme stœchiométrique.

Richesses	0,75	1	1,4
esp. maj.	$-0,42\%$	$+0,5\%$	$+0,17\%$
esp. maj. + H	$+0,12\%$	$+0,41\%$	$+0,69\%$
esp. maj. + O	$-0,44\%$	$+0,29\%$	$+0,03\%$
esp. maj. + OH	$-0,46\%$	$+0,28\%$	$+0,2\%$

TAB. C.1 – *Ecarts obtenus entre le dégagement de chaleur integré sur la flamme PREMIX et celui obtenu en prenant un jeu réduit d'espèces (les enthalpies de formation à 0 K de H, O et OH sont respectivement : 216,26 MJ/kg, 15,57 MJ/kg et 2,31 MJ/kg).*

Les écarts relevés dans le tableau C.1 restent toujours inférieurs à 1%. Dans le cas étudié, on peut donc conclure que le transport des seules espèces majoritaires n'aboutit pas à une modification notable de la température d'équilibre au sein des flammes simulées. Si on s'intéresse aux profils tracés sur la figure C.2, l'adjonction de l'espèce H permet de retrouver un profil de dégagement de chaleur très proche de celui observé avec une chimie complexe, là où les autres jeux d'espèces présentent un pic légèrement décalé vers les gaz brûlés.

Par ailleurs, Galpin [83], en utilisant une méthode légèrement différente, conclut que l'introduction de l'espèce H au jeu d'espèces transportées est nécessaire pour garantir un dégagement de chaleur consistant avec les données de la table.

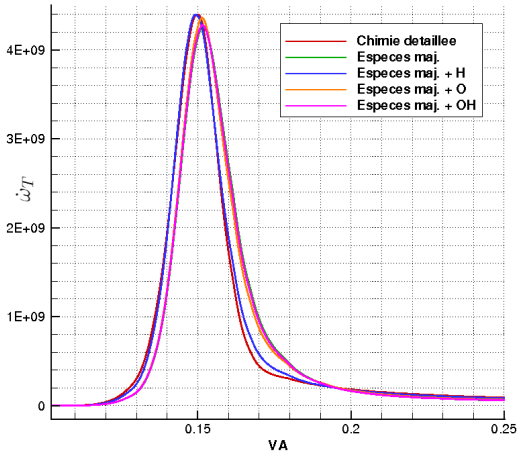

FIG. C.2 – *Profils de dégagements de chaleur correspondants à des jeux d'espèces transportées réduits, à travers une flamme méthane/air stœchiométrique.*

Il apparaît que, pour les applications visées, le transport des six espèces majoritaires issues de la combustion du méthane dans l'air est suffisant pour garantir la conservation de plus de 99% de la masse totale du système sans pour autant modifier le dégagement de chaleur global à travers la flamme.

C.3 Procédure de conservation de la masse

Pour que les concentrations des espèces majoritaires ne soient pas affectées par le fait que seul un système réduit est transporté, il est nécessaire de développer une procédure spécifique permettant de retrouver la composition exacte de l'écoulement. Pour cela on procède en répartissant la masse des espèces minoritaires non transportées sur de nouvelles espèces "virtuelles" transportées.

Pour chacun des éléments présents (C, H, O, N, et éventuellement d'autres), on définit une nouvelle espèce "virtuelle" qui aura pour rôle de compenser la masse contenue dans les espèces minoritaires non transportées par CEDRE. Les taux de réaction de ces espèces sont reconstruits de telle sorte que le principe de conservation des atomes soit respecté. Ces espèces virtuelles sont ensuite ajoutées dans le calcul aux espèces majoritaires initiales.

Dans le cas présent, neuf espèces doivent donc être transportées puisqu'une espèce virtuelle doit être ajoutée pour H, O et C (il n'est pas nécessaire de considérer une espèce virtuelle pour N dans la mesure où la formation de NO est négligée, soit $Y_{N_2} = cte$).

Pour faciliter le calcul des propriétés thermodynamiques du mélange, les espèces "virtuelles" sont assimilées à des espèces réelles existantes. Ces espèces physiques sont choisies de sorte telle que le dégagement de chaleur total ne soit pas faussé :

- pour la conservation de l'atome H, on choisit d'ajouter l'espèce H_2 dont l'enthalpie de formation nulle ne modifie pas le dégagement de chaleur,
- on attribue l'espèce HO_2 pour la conservation de O, car son enthalpie de formation reste faible (si HO_2 est absente, on peut choisir OH en remplacement),
- pour la conservation de C, C_2H_4 est retene (que l'on peut remplacer, par exemple, par CH_3).

Sachant que la conservation des atomes impose :

$$\dot{\omega}_l = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\mu_i^l \mathcal{M}_i}{M_l} \dot{\omega}_i = 0, \tag{C.4}$$

avec $\dot{\omega}_l$ le taux de production chimique lié à l'atome l, la résolution d'un simple système linéaire donne accès aux termes sources chimiques des espèces "virtuelles". Ceux-ci peuvent s'écrire sous la forme condensée suivante :

$$\dot{\omega}_j = -\frac{M_j}{\mu_j^l} \sum_{i=1}^{N} \mu_i^l \frac{\dot{\omega}_i}{M_i}, \tag{C.5}$$

où l'indice j représente les espèces rajoutées, i représente les espèces majoritaires, l représente l'atome que l'on souhaite conserver ($j \Leftrightarrow HO_2$ pour $l \Leftrightarrow O$, $j \Leftrightarrow H_2$ pour $l \Leftrightarrow H$ et $j \Leftrightarrow C_2H_4$ pour $l \Leftrightarrow C$).

La figure C.3 schématise la procédure de conservation de la masse discutée ici.

Lors des calculs de validation réalisés durant cette étude, il a été observé que l'utilisation ou non de la procédure de conservation de la masse n'avait pas d'influence significative sur les résultats obtenus. Toutefois, alors que les conditions rencontrées au sein des applications visées par cette thèse ne justifient pas l'utilisation de cette procédure, on peut penser que sous d'autres conditions, l'utilisation de celle-ci peut se révéler particulièrement intéressante. Ceci est notamment le cas lorsque l'on étudie d'autres carburants, ou bien lorsque l'on opère dans des conditions de richesse très différentes (notamment à richesse élevée).

C.4 Procédure de conservation du dégagement de chaleur

Pour assurer la conservation de l'énergie du système, on procède à l'ajout de deux nouvelles espèces "virtuelles" au jeu d'espèces transportées. Les sources chimiques de ces espèces doivent ensuite être recalculées de manière à ce que le taux de dégagement de chaleur du système résultant soit égal au taux de dégagement de chaleur local interpolé dans la table. Les espèces ajoutées sont assimilées à

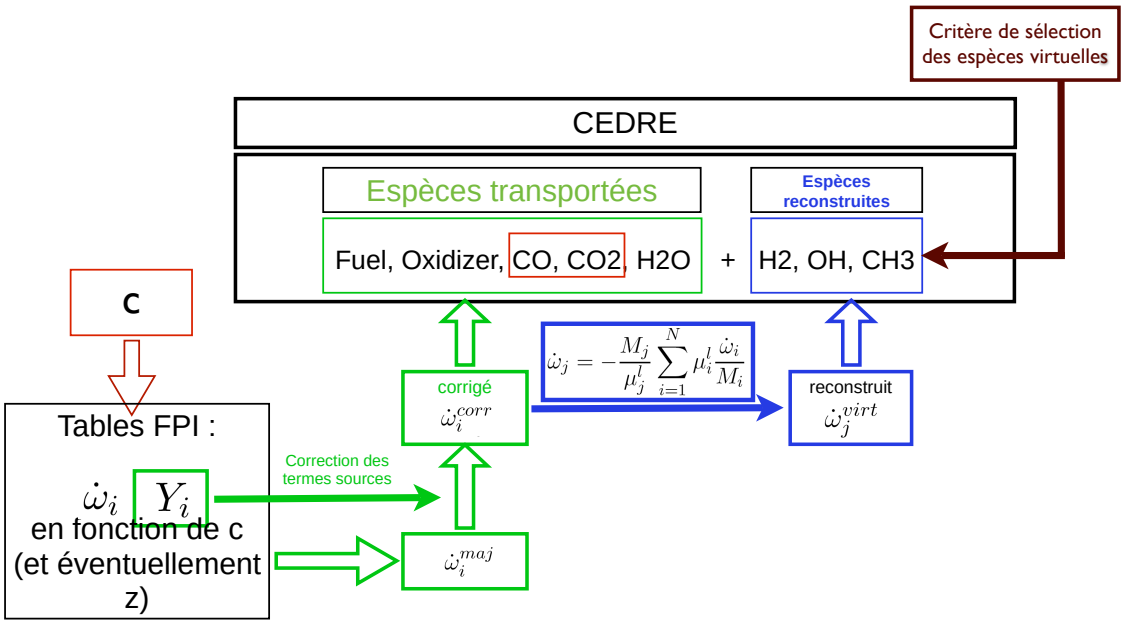

FIG. C.3 – *Schéma résumant la procédure de conservation de la masse discutée précédemment.*

des espèces réelles et possèdent leur proprietés thermophysiques. Celles-ci sont choisies de la façon suivante :

- la première doit posséder une enthalpie de formation positive de sorte que lorsque le dégagement de chaleur observé dans le calcul CFD est supérieur au dégagement de chaleur interpolé, le taux de production de cette espèce demeure positif,
- la seconde doit posséder une enthalpie de formation négative de sorte que lorsque le dégagement de chaleur calculé par le code de CFD est inférieur au dégagement de chaleur interpolé, le taux de formation de cette espèce soit positif.

En pratique, les espèces H et H_2O_2 peuvent respectivement être utilisées. Leurs taux de production chimiques recalculés sont alors donnés par les relations suivantes :

$$\dot{\omega}_H = \frac{1}{h^0_{f,H}}\left(\dot{\omega}_T - \dot{\omega}_T^{tab}\right) \quad \text{lorsque} \quad \dot{\omega}_T > \dot{\omega}_T^{tab}, \tag{C.6}$$

$$\dot{\omega}_{H_2O_2} = \frac{1}{h^0_{f,H_2O_2}}\left(\dot{\omega}_T - \dot{\omega}_T^{tab}\right) \quad \text{lorsque} \quad \dot{\omega}_T < \dot{\omega}_T^{tab}. \tag{C.7}$$

Les taux de formation de ces deux espèces sont toujours positifs, elles ne peuvent donc qu'être produites. Ceci n'est pas particulièrement gênant dans la mesure où les écarts entre les dégagements de chaleur calculés et tabulés restent toujours faibles. De plus, l'espèce H sera généralement produite au détriment de H_2O_2 et celle-ci étant très légère, elle n'altère que faiblement la masse totale du système.

Les méthodes de conservation de la masse et de l'énergie ne peuvent pas être utilisées conjointement. En effet, étant donné que masse et énergie sont intimement liées au sein de l'écoulement, imposer la conservation de ces deux grandeurs conduirait à un problème sur-déterminé. Ainsi, suivant les caractéristiques du calcul réalisé, il est nécessaire de choisir parmi l'application de ces deux méthodes.

De même que dans le cas de la procédure de conservation de la masse, la méthode proposée ici n'a pas été appliquée aux calculs réalisés dans le cadre de cette thèse. Toutefois, pour des conditions opératoires différentes, cette procédure peut se révéler nécessaire.

Annexe D

Le modèle PEUL de l'ONERA

Le modèle PEUL (pour "Probabiliste EUlérien Lagrangien"), développé à l'ONERA (Gilbank [92], Caillau [39]), est une approche hybride couplant la résolution d'un champ eulérien à une méthode lagrangienne de suivi de particules. Cette approche est équivalente à la résolution d'une équation de transport pour les PDF jointes position/composition par une méthode de Monte-Carlo. Pour ce faire, le domaine de calcul est ensemencé par un nombre N de particules fluides repérées par leurs coordonnées dans l'espace physique et leur composition. Celles-ci sont ensuite transportées dans l'écoulement par une approche lagrangienne. Ces particules échangent avec un champ eulérien obtenu au préalable par la résolution des équations de Navier-Stokes.

D.1 La méthode de Monte-Carlo

Le but de la méthode proposée par Pope [177] est de résoudre l'équation de transport pour une PDF jointe position/composition (équation (3.48)). On approche pour cela cette fonction par une PDF "fine-grained" (Pope [178]), notée $P_N(\boldsymbol{\Psi}, \boldsymbol{x}, t)$, équivalente à la somme non pondérée de N produits de fonctions de Dirac :

$$P_N(\boldsymbol{\Psi}, \boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \delta(\boldsymbol{\Psi} - \boldsymbol{\Phi}^n)\, \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^n). \tag{D.1}$$

La PDF $P_N(\boldsymbol{\Psi}, \boldsymbol{x}, t)$ est construite en réalisant une moyenne d'ensemble sur N particules. $\boldsymbol{\Phi}^n$ représente le vecteur des réalisations de la $n$ième particule, c'est à dire l'ensemble des valeurs de $\boldsymbol{\Psi}$ atteintes par la particule n au point $\boldsymbol{x}$ et à l'instant t. $\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^n)$ représente la probabilité que la particule n se trouve au point $\boldsymbol{x}$. La fonction de Dirac associée à un vecteur quelconque $\boldsymbol{\Gamma}$ est définie par :

$$\delta(\boldsymbol{\Gamma}) = \prod_{i=1}^{N} \delta(\Gamma_i). \tag{D.2}$$

La PDF discrète P_N peut être reconstruite à partir de la connaissance des proprietés de N particules fluides. En exprimant l'espérance mathématique de la PDF discrète à l'aide de l'opérateur $\langle . \rangle$, on retrouve la densité de probabilité continue [178] :

$$\langle P_N(\boldsymbol{\Psi}, \boldsymbol{x}, t) \rangle = P(\boldsymbol{\Psi}, \boldsymbol{x}, t). \tag{D.3}$$

Cette proprieté est particulièrement importante pour la méthode de résolution de Monte-Carlo. La figure D.1 présente une représentation du lien entre PDF fine-grained et continue, où les N particules possèdent une composition $\boldsymbol{\Psi}$ différente. En utilisant cette proprieté, Pope [178] montre que l'erreur sur la moyenne d'une grandeur quelconque dépendant de $\boldsymbol{\Psi}$ calculée à partir de la PDF discrète décroit en $N^{-1/2}$.

En considérant une cellule du maillage eulérien contenant N particules, chacune possédant une composition $\boldsymbol{\Psi}$, il est possible de reconstruire la PDF position/composition dans cette maille. Lorsque le nombre de particules N tend vers l'infini, on peut assimiler la PDF fine-grained P_N à la PDF continue P.

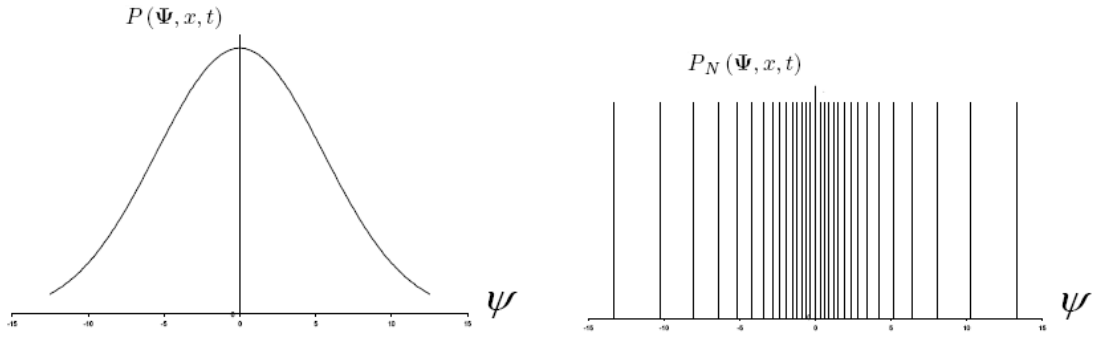

FIG. D.1 – *Exemple de PDF discrète (à droite) et de la PDF continue équivalente lorsque N tend vers l'infini.*

D.2 Suivi lagrangien des particules

Les particules sont transportées dans l'écoulement via la résolution d'équations lagrangiennes. Une première équation est nécessaire pour déterminer l'évolution de la trajectoire de la particule dans l'écoulement et une seconde pour faire évoluer sa composition :

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \widetilde{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{u}'', \tag{D.4}$$

$$\frac{d\boldsymbol{\Psi}}{dt} = \boldsymbol{D} + \dot{\boldsymbol{\omega}}, \tag{D.5}$$

où $\widetilde{\boldsymbol{u}}$ est la vitesse moyenne de l'écoulement, $\boldsymbol{u}''$ sont les fluctuations de vitesse (associées au terme de dissipation turbulente de l'équation de conservation de la PDF), $\boldsymbol{D}$ est un terme de micromélange (associé au terme de micromélange de l'équation pour la PDF) et $\dot{\boldsymbol{\omega}}$ est le terme source chimique. Ces termes nécessitent différents modèles de fermeture :

- dans PEUL, le modèle de dispersion turbulente utilsé est le modèle SCOPE [39]. Un tirage aléatoire d'un réel X, compris entre 0 et 1, est réalisé pour chaque particule à chaque instant et est comparé à un temps turbulent τ_t. Si $X < \Delta t/\tau_t$, on détermine de nouvelles fluctuations de vitesse. Dans ce cas, les fluctuations sont évaluées en supposant que les corrélations temporelles le long d'une même trajectoire suivent une loi de Poisson. Si $X > \Delta t/\tau_t$, la particule conserve les mêmes fluctuations qu'à l'itération précédente ;
- le terme de micromélange $\boldsymbol{D}$ est associé à la diffusion moléculaire. Dans PEUL, on utilise le modèle IEM [7]. Celui-ci propose de modéliser le micromélange en relaxant la composition de chaque particule vers la composition moyenne dans la maille avec un temps τ_t :

  $$\boldsymbol{D} = 2C_{IEM}\frac{\widetilde{\boldsymbol{\Psi}} - \boldsymbol{\Psi}}{\tau_t}. \tag{D.6}$$

  La moyenne du vecteur composition $\widetilde{\boldsymbol{\Psi}}$ doit être calculée par une moyenne d'ensemble pondérée par le temps de séjour de chaque particule dans la maille ;
- pour finir, le vecteur des termes sources chimiques associés à chaque particule peut être évalué à l'aide d'un mécanisme réactionnel détaillé. Ces sources sont déterminées localement en fonction du vecteur des compositions lagrangiennes $\boldsymbol{\Psi}$.

Dans le modèle PEUL, la vitesse moyenne de propagation des particules est donnée par un champ eulérien préalablement calculé. Si le couplage entre le champ eulérien et les particules se fait dans les deux sens ("two-way" coupling), on tient compte de la rétroaction de la combustion sur l'évolution du champ eulérien. Dans le cas d'un "one-way" coupling, on néglige l'influence des particules sur le champ eulérien.

D.3 Couplage entre les particules et le champ eulérien

Le modèle PEUL n'a été couplé aux champs eulérien que via une approche "one-way" stationnaire. Un champ moyen déja convergé est donc fourni avant d'ensemencer l'écoulement par les particules. Dans ce contexte, PEUL peut être vu comme un modèle de post-traitement pour modéliser les effets de chimie complexe.

Le calcul PEUL se déroule en cinq étapes :

- d'abord, un champ eulérien (RANS ou LES moyenné) convergé doit être établi (souvent à l'aide d'un mécanisme cinétique réduit). Ce champ fournit au calcul lagrangien les vitesses moyennes, les concentrations initiales des particules et les temps turbulents de mélange ;
- N particules sont ensuite injectées. Celles-ci sont réparties dans les premières cellules à l'entrée du domaine de calcul. Leurs concentrations sont fixées par la composition des gaz dans ces mailles ;
- les particules sont alors transportées dans l'écoulement jusqu'à ce qu'elles soient toutes sorties du domaine ou éliminées lorsque, par exemple, elles restent piégées dans des zones de recirculation. A chaque itération lagrangienne, les équations (D.4) et (D.5) sont résolues ;
- les nouvelles concentrations des espèces dans chaque maille sont recalculées par des moyennes d'ensemble et le champ eulérien d'origine est alors modifié ;
- pour finir, une nouvelle itération PEUL est effectuée si besoin, à partir du champ eulérien modifié pour lequel les concentrations ont été mises à jour. Les itérations PEUL sont arrêtées lorsque les moyennes d'ensemble des concentrations sont convergées.

Le schéma D.2 résume le fonctionnement du modèle PEUL tel qu'il a été utilisé dans le cadre de ce travail, c'est à dire combiné au modèle FPI (qui fournit les champs de composition initiaux) suivant une méthode de couplage "one-way" stationnaire.

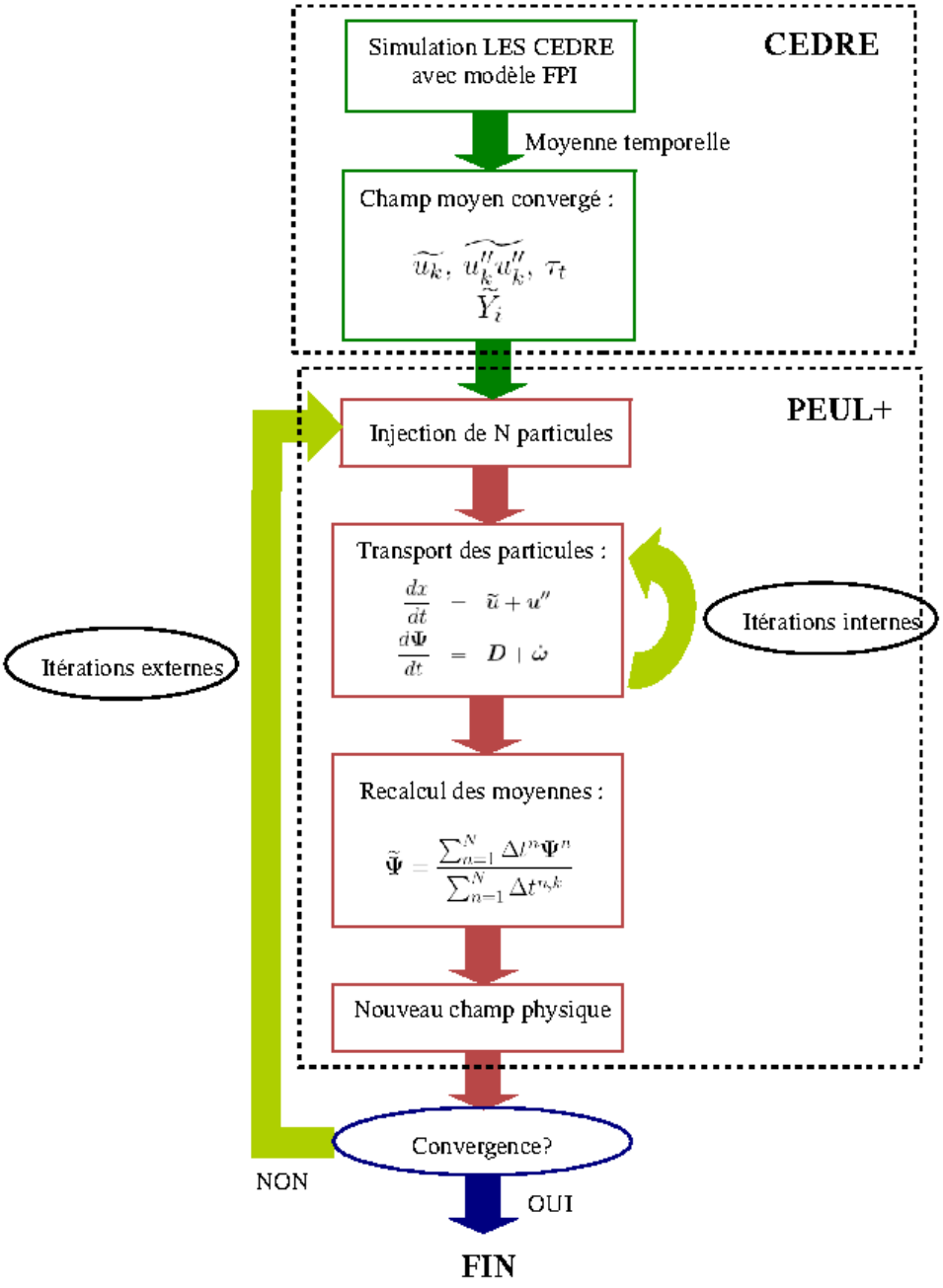

FIG. D.2 – *Représentation schématique du fonctionnement du modèle PEUL.*

Annexe E

Difficultés numériques d'évaluation des β-PDF

Les β-PDF peuvent prendre différentes formes caractéristiques suivant les valeurs des paramètres a et b (voir figure E.1). En particulier, si a ou/et b sont inférieurs à 1, la PDF tend vers l'infini lorsque le scalaire de référence vaut respectivement 0 ou/et 1 et son évaluation peut être problématique. C'est sous ces conditions qu'un traitement numérique particulier doit être appliqué. Lorsque a et b sont supérieurs à 1, la PDF s'annule en 0 et en 1 ce qui ne présente pas de difficulté particulière.

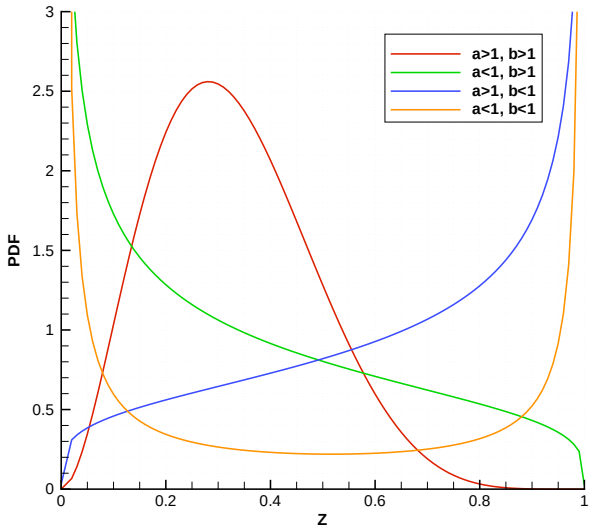

Fig. E.1 – *Formes caractéristiques prises par la β-PDF suivant la valeur des coefficients a et b.*

Parmi les algorithmes possibles pour faciliter l'évaluation des PDF, on peut retenir par exemple la méthode proposée par Liu *et al.* [129]. En partant de l'hypothèse que $a < 1$ et $b < 1$, et en posant certaines simplifications, Liu *et al.* montrent que l'intégrale définissant la fonction Γ peut être réécrite sous la forme :

$$\begin{aligned}\int_0^1 \Psi^{a-1}(1-\Psi)^{b-1}\,d\Psi &= \int_0^\epsilon \Psi^{a-1}(1-\Psi)^{b-1}\,d\Psi + \int_\epsilon^{1-\epsilon} \Psi^{a-1}(1-\Psi)^{b-1}\,d\Psi + \int_{1-\epsilon}^1 \Psi^{a-1}(1-\Psi)^{b-1}\,d\Psi \\ &\approx \frac{\epsilon^a}{a} + \int_\epsilon^{1-\epsilon} \Psi^{a-1}(1-\Psi)^{b-1}\,d\Psi + \frac{\epsilon^b}{b}, \end{aligned} \tag{E.1}$$

où ϵ doit être choisi suffisamment petit (de l'ordre de 10^{-6}). Dans cette relation, l'intégrale de ϵ à $1-\epsilon$ est parfaitement définie et facilement calculable numériquement. Les intégrales sur les intervalles $[1-\epsilon; 1]$ et $[0; \epsilon]$ sont approximées en utilisant des développements limités de ces fonctions.

Une relation du même type est ensuite utilisée pour approcher les intégrales de convolution donnant

accès aux grandeurs filtrées. On écrit ainsi pour une grandeur quelconque Φ fonction de Ψ :

$$\widetilde{\Phi} = \frac{\int_0^1 \Phi(\Psi)\,\Psi^{a-1}(1-\Psi)^{b-1}\,d\Psi}{\int_0^1 \Psi^{a-1}(1-\Psi)^{b-1}\,d\Psi} \tag{E.2}$$

$$\approx \frac{1}{\beta(a,b)}\left[\Phi_1\frac{\epsilon^a}{a} + \int_\epsilon^{1-\epsilon}\Phi(\Psi)\,\Psi^{a-1}(1-\Psi)^{b-1}\,d\Psi + \Phi_2\frac{\epsilon^b}{b}\right], \tag{E.3}$$

où Φ_1 et Φ_2 représentent respectivement les valeurs de Ψ prises dans les gaz frais et dans les gaz brûlés. Lorsque seulement l'un des deux coefficients a ou b est inférieur à 1, la relation (E.3) peut toujours être appliquée.

Dans ce travail, une méthode différente a été développée et utilisée. Ici, la β-PDF n'est définie que sur l'intervalle $]0;1[$, le domaine étant fermé grâce à l'adjonction de fonctions de Dirac centrées en 0 et en 1. On écrit ainsi :

$$\widetilde{P}(\Psi;x,t) = \alpha(x,t)\,\delta(0) + \gamma(x,t)\,\delta(1) + \widetilde{P}_\beta(\Psi;x,t)\,H(0)\,H(1), \tag{E.4}$$

avec $\widetilde{P}_\beta$ la β-PDF définie sur l'intervalle $]\,0,1\,[$, et H la fonction de Heaviside. Les paramètres α et γ représentent l'amplitude des pics de Dirac centrés respectivement en 0 et 1. α (respectivement γ) sera différent de 0 lorsque a (respectivement b) sera inférieur à 1.

En se servant des proprietés élémentaires des PDF, il est possible de déterminer des relations simples exprimant ces deux coefficients en fonction de grandeurs connues ou facilement calculables :

$$\int_0^1 \widetilde{P}(\Psi;x,t)\,d\Psi = \int_0^\epsilon \alpha(x,t)\,\delta(0)\,d\Psi + \int_{1-\epsilon}^1 \gamma(x,t)\,\delta(1)\,d\Psi + \underbrace{\int_\epsilon^{1-\epsilon}\beta(\Psi;x,t)\,d\Psi}_{A}$$

$$= \alpha(x,t) + \gamma(x,t) + A = 1, \tag{E.5}$$

$$\int_0^1 \widetilde{P}(\Psi;x,t)\,\Psi d\Psi = \int_0^\epsilon \alpha(x,t)\,\delta(0)\,\Psi d\Psi + \int_{1-\epsilon}^1 \gamma(x,t)\,\delta(1)\,\Psi d\Psi + \underbrace{\int_\epsilon^{1-\epsilon}\beta(\Psi;x,t)\,\Psi d\Psi}_{B}$$

$$= \gamma(x,t) + B = \widetilde{\Psi}, \tag{E.6}$$

où ϵ est petit, $< 10^{-6}$. On trouve finalement :

$$\gamma(x,t) = \widetilde{\Psi} - B, \tag{E.7}$$

$$\alpha(x,t) = 1 - A - \widetilde{\Psi} + B. \tag{E.8}$$

Les intégrales A et B sont facilement calculables sur l'intervalle $[\epsilon;1-\epsilon]$, ce qui permet l'évaluation des coefficients α et γ. La PDF est alors parfaitement définie sur la totalité du domaine d'intégration $[0;1]$ et les difficultés numériques aux limites sont évitées. Cette méthode s'est avérée plus satisfaisante que la précédente, et a donc été retenue.

Annexe F

Une PDF de c basée sur la densité de surface de flamme

Selon Bray [29], [31], une définition assez précise de la PDF de la variable d'avancement peut être donnée par l'association de deux pics de Dirac localisés respectivement en 0 et en 1, couplés à une fonction définie sur l'intervalle $]\,0;1\,[$ permettant de tenir compte d'une chimie non infiniment rapide. On peut ainsi écrire pour c :

$$\widetilde{P}\left(c^*;x,t\right) \quad = \quad \alpha\left(x,t\right)\delta\left(c^*\right)+\beta\left(x,t\right)\delta\left(1-c^*\right)+F\left(c^*;x,t\right), \tag{F.1}$$

où α et β sont deux coefficients évalués à partir des proprietés élémentaires des PDF. La fonction F doit ensuite être approchée, en général à partir des différentes grandeurs physiques caractéristiques de la flamme.

Domingo *et al.* [56] ainsi que Bray *et al.* [31] proposent de définir F à partir du concept de densité de surface de flamme (précédemment introduit au sens LES par Boger *et al.* [17] et Hawkes et Cant [104]). En suivant Vervisch *et al.* [215], la densité de surface de flamme peut être reliée à l'amplitude du gradient de c et à la PDF de c suivant :

$$\Sigma\left(c^*;x,t\right)=\overline{|\nabla c||c^*}\widetilde{P}\left(c^*;x,t\right). \tag{F.2}$$

Ainsi, la PDF en c peut également être exprimée en fonction de la densité de surface de flamme :

$$\widetilde{P}\left(c^*;x,t\right)=\frac{\Sigma\left(c^*;x,t\right)}{\overline{|\nabla c||c^*}}. \tag{F.3}$$

La PDF peut donc être directement reliée à la fonction F apparaissant dans la relation (F.1). On peut écrire :

$$F\left(c^*;x,t\right)=\frac{\Sigma\left(c^*;x,t\right)}{\overline{|\nabla c||c^*}}H\left(c^*\right)H\left(1-c^*\right). \tag{F.4}$$

La fonction de Heaviside est introduite de manière à limiter F à l'intervalle $]\,0;1\,[$. Le terme $\overline{|\nabla c||c^*}$ représente la valeur filtrée du gradient de la variable d'avancement conditionnée à c^*. Il peut directement être évalué à partir des données contenues dans les tables FPI, sous l'hypothèse de flammelettes laminaires. Pour cela, le gradient de c est filtré en utilisant un filtre dont la taille caractéristique de coupure peut être déterminée grossièrement en fonction du maillage LES utilisé [56] :

$$\overline{|\nabla c||c^*}=\overline{\Sigma}\left(c^*\right)=\int_{-\infty}^{+\infty}|\nabla c|^{tab}G_{\Delta}\left(x-x'\right)dx', \tag{F.5}$$

où G_{Δ} représente le filtre dont la taille de coupure est Δ.

L'influence du choix de la taille du filtre est illustré sur la figure F.1. Lorsque Δ augmente, la fonction F tend vers une valeur constante sur l'ensemble du domaine $]\,0;1\,[$. En pratique, lors de simulations numériques d'écoulements réactifs turbulents par une approche LES, la taille des plus petites mailles est généralement plus grande d'un ordre de grandeur par rapport à l'épaisseur caractéristique

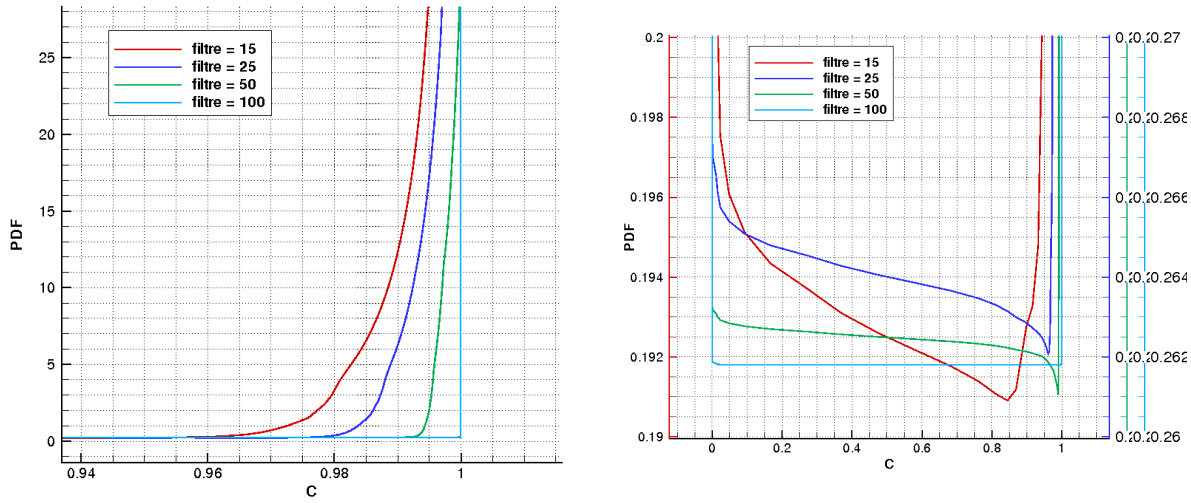

FIG. F.1 – *Zoom autour de $c = 1$ de différentes FSD-PDF obtenues pour des tailles de filtre relatives différentes. Ces PDF ont été calculées pour $\widetilde{c} = 0{,}5$ et $\frac{\widetilde{c''^2}}{\widetilde{c}(1-\widetilde{c})} = 0{,}9$.*

des flammes simulées. On peut ainsi supposer le filtre suffisamment grand pour que la grandeur $\overline{\Sigma}$ puisse être considérée constante et donc indépendante de c^*.

Boger *et al.* [17] montrent, grâce à l'analyse de résultats de calculs DNS, que la densité de surface de flamme $\Sigma(c^*; x, t)$ peut être considérée indépendante de la position c^* dans la flamme et prend une forme parabolique. Le modèle suivant a ainsi été proposé :

$$\Sigma(x,t) = \gamma(x,t)\,\widetilde{c}(x,t)\,(1-\widetilde{c}(x,t))\,. \tag{F.6}$$

En introduisant cette expression dans (F.1), il vient :

$$\widetilde{P}(c^*;x,t) = \alpha(x,t)\,\delta(c^*) + \beta(x,t)\,\delta(1-c^*) + \gamma(x,t)\,\frac{\widetilde{c}(x,t)\,[1-\widetilde{c}(x,t)]}{\overline{\Sigma}}\,H(c^*)\,H(1-c^*)\,. \tag{F.7}$$

Les paramètres α, β et γ restent à déterminer. Par définition, les premiers moments statistiques de la PDF en c s'écrivent :

$$\int_0^1 \widetilde{P}(c^*)\,dc^* = 1, \tag{F.8}$$

$$\int_0^1 c^*\,\widetilde{P}(c^*)\,dc^* = \widetilde{c}, \tag{F.9}$$

$$\int_0^1 c^{*2}\,\widetilde{P}(c^*)\,dc^* = \widetilde{c^2}. \tag{F.10}$$

En remplaçant la PDF définie par (F.7) dans les relations précédentes, des contraintes supplémentaires sur α, β et γ sont établies :

$$\alpha + \beta + I_0\gamma\widetilde{c}(1-\widetilde{c}) = 1, \tag{F.11}$$

$$\beta + I_1\gamma\widetilde{c}(1-\widetilde{c}) = \widetilde{c}, \tag{F.12}$$

$$\beta + I_2\gamma\widetilde{c}(1-\widetilde{c}) = \widetilde{c''^2} + \widetilde{c}^2, \tag{F.13}$$

où les intégrales I_0, I_1 et I_2 sont exprimées suivant :

$$I_0 = \int_{0^+}^{1^-} \frac{1}{\overline{\Sigma}} dc^*, \tag{F.14}$$

$$I_1 = \int_{0^+}^{1^-} \frac{c^*}{\overline{\Sigma}} dc^*, \tag{F.15}$$

$$I_2 = \int_{0^+}^{1^-} \frac{c^{*^2}}{\overline{\Sigma}} dc^*. \tag{F.16}$$

En combinant les relations précédentes, on obtient les expressions suivantes :

$$\alpha = 1 - \frac{A\,(I_1 - I_0) - \widetilde{c}\,(I_1 - I_0)}{I_1 - I_2}, \tag{F.17}$$

$$\beta = \frac{AI_1 - \widetilde{c} I_2}{I_1 - I_2}, \tag{F.18}$$

$$\gamma = \frac{1}{\widetilde{c}\,(1 - \widetilde{c})} \frac{\widetilde{c} - A}{I_1 - I_2}, \tag{F.19}$$

Avec $A = \widetilde{c}^2 + \widetilde{c''^2}$.

Pour finir, deux contraintes de réalisabilité doivent être prises en compte de manière à assurer la positivité des coefficients α et β. Après quelques développements, on trouve :

$$\widetilde{c''^2} > \widetilde{c}\left(\frac{I_2}{I_1} - \widetilde{c}\right), \tag{F.20}$$

$$\widetilde{c''^2} > \frac{I_1\left(1 - \widetilde{c}^2\right) - (1 - \widetilde{c})\,(I_2 + \widetilde{c} I_0)}{I_0 - I_1}. \tag{F.21}$$

Il apparaît que les paramètres α, β et γ peuvent être évalués en fonction uniquement des deux premiers moments statistiques de c. Ainsi, par extension, le calcul des grandeurs chimiques filtrées $\widetilde{\omega}_i$ et $\widetilde{Y}_i$ à partir des données tabulées peut être effectué grâce à la seule connaissance de $\widetilde{c}$ et $\widetilde{c''^2}$. La densité de surface de flamme filtrée, $\overline{\Sigma}$, supposée constante, peut être évaluée à partir des données chimiques tabulées, indépendamment des grandeurs issues du calcul de CFD.

Selon les critères définis par (F.20) et (F.21), la FSD-PDF n'est valide que pour des valeurs suffisamment élevées de $\widetilde{c''^2}$. En effet, cette PDF ne permet pas de retrouver une distribution monomodale de c lorsque la variance tend vers 0. Dans ces conditions, la FSD-PDF doit toujours être couplée à une autre fonction. L'utilisation d'une β-PDF semble être ici un choix judicieux puisqu'elle possède les propriétés recherchées près de 0. Dans ce cadre, l'utilisation d'une procédure d'interpolation peut s'avérer nécessaire pour assurer une transition progressive à la jonction des deux PDF.

La figure F.2 présente deux schémas sur lesquels sont tracés l'évolution de la forme de la PDF définie pour $\widetilde{c} = 0{,}5$, en fonction de la valeur de $\widetilde{c''^2}$ normalisée. La PDF est représentée par une fonction β lorsque la variance réduite vaut 0,4 et 0,5. Ensuite, celle-ci est approchée par la FSD-PDF précédemment décrite. On notera que la principale caractéristique de la FSD-PDF est qu'elle possède un caractère bimodal beaucoup plus marqué que les fonctions β. Ceci est en partie dû au fait que $\overline{\Sigma}$ est supposée constante.

Ce type de PDF n'a pas été retenu pour modéliser $\widetilde{P}\,(c^*)$. Il est en effet plus pratique et peut être plus approprié d'utiliser une β-PDF sur l'ensemble du domaine de définition de la PDF plutôt que d'introduire un couplage entre FSD-PDF et β-PDF qui introduit inévitablement une perte de cohérence à la jonction des deux fonctions.

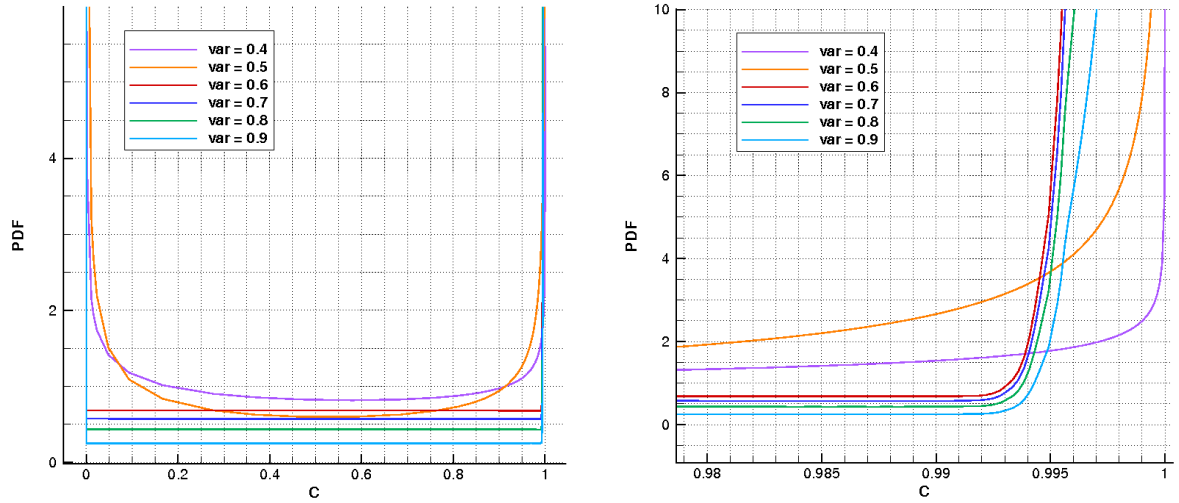

FIG. F.2 – *Evolution de la PDF de la variable d'avancement définie pour $\widetilde{c} = 0{,}5$ en fonction de différentes valeurs de la variance de c normalisée. A gauche, vue globale, à droite, zoom au voisinage de 1. Lorsque la variance réduite vaut 0,4 et 0,5, la PDF est définie par une fonction β.*

Annexe G

Conditions limites caractéristiques non réfléchissantes pour CEDRE

Les conditions limites caractéristiques imposées en entrée et en sortie d'un domaine de calcul permettent de laisser sortir proprement les ondes acoustiques se propageant au sein de ce domaine. Elles permettent d'éviter toute réflexion non physique des ondes qui viendraient perturber la dynamique de l'écoulement.

A l'origine, les principes de la méthode ont été posés par Thompson [211] pour des systèmes hyperboliques 1D. Par la suite, Poinsot et Lele [173] ont étendu l'approche aux équations de Navier-Stokes complètes (comprenant les termes de diffusion) en milieu inerte. Baum *et al.* [10] ont étendu les conditions limites de Poinsot et Lele aux écoulements multiespèces réactifs. Notons ici que l'approche développée par Poinsot et Lele nécessite d'imposer des conditions aux limites pour les termes de diffusion. Ce type de conditions étant plutôt difficile à définir, la méthode implantée dans CEDRE se rapproche plus de la méthode d'origine de Thompson.

L'implémentation de ces conditions limites au sein du code CEDRE, qui fait partie intégrante du travail effectué au cours de cette thèse, s'est révélé nécessaire pour la mise en œuvre de simulations instationnaires d'écoulements turbulents réactifs au sein de géométries complexes.

G.1 Formalisme

D'un point de vue mathématique, l'identification des différentes ondes se propageant dans le domaine peut se faire en réécrivant les équations de Navier-Stokes résolues par le code sous une forme quasi linéaire. Pour cela, on commence par écrire ces équations sous une forme condensée conservative :

$$\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{\mathcal{U}}\right) + \boldsymbol{\varphi}\left(\boldsymbol{\mathcal{U}}, \nabla \boldsymbol{\mathcal{U}}\right) \right] = S, \tag{G.1}$$

où $\boldsymbol{q}$ est le vecteur des quantités conservatives $(\rho, \rho\boldsymbol{u}, \rho e_t, \rho Y_i, \rho z_l)$ et $\boldsymbol{\mathcal{U}}$ le vecteur des quantités primitives $(p, \rho, \boldsymbol{u}, Y_i, z_l)$. La fonction $\boldsymbol{f}$ représente les flux convectifs et $\boldsymbol{\varphi}$ les flux diffusifs. S représente les éventuelles sources.

Les développements présentés ici se basent sur les équations résolues par CEDRE, telles qu'elles ont été introduites dans le chapitre 2 de ce mémoire. Le nombre d'équations résolues est donc de $5 + N_e + N_s$. De plus, la thermodynamique utilisée ici est généralisée pour tenir compte des effets de gaz réels. En suivant ce formalisme, la loi d'état généralisée peut être exprimée suivant :

$$\frac{d\rho}{\rho} = \omega_p \frac{dp}{p} - \omega_T \frac{dT}{T} + \sum_{i=1}^{N_e} \frac{r_i}{r} dY_i, \tag{G.2}$$

où les coefficients ω_T et ω_P représentent les coefficients de dilatabilité et de compressibilité adimensionnés, définis par :

$$\omega_p = 1 - \frac{P}{r}\frac{\partial v_m}{\partial P}, \tag{G.3}$$

$$\omega_T = 1 + \frac{T}{r}\frac{\partial v_m}{\partial T}. \tag{G.4}$$

Avec v_m le volume massique du fluide.

G.2 Principes de la méthode

Si on néglige dans (G.1) les termes diffusifs ainsi que les sources, il est possible de réécrire le système sous une forme quasi linéaire :

$$\frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{U}}}{\partial t} + \mathbf{A}_1 \frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{U}}}{\partial x_1} + \mathbf{A}_2 \frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{U}}}{\partial x_2} + \mathbf{A}_3 \frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{U}}}{\partial x_3} = 0. \tag{G.5}$$

On néglige dans un premier temps les termes relatifs aux gradients tangentiels, soit : $\mathbf{A}_2 = 0$ et $\mathbf{A}_3 = 0$. De cette manière, on peut montrer que la matrice $\boldsymbol{A_1}$ peut s'écrire :

$$\boldsymbol{A_1} = \begin{pmatrix} u_1 & 0 & \rho a^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_1 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\rho} & 0 & u_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 \end{pmatrix}, \tag{G.6}$$

où la vitesse du son a est définie par : $a^2 = \frac{\gamma P}{\rho \omega_p}$.

Suivant la relation $\boldsymbol{A_1 = S \Lambda S^{-1}}$, on peut diagonaliser cette matrice afin de déterminer les valeurs propres associées à chaque onde, ainsi que les vecteur propres à gauche et à droite. Les matrices de passage $\mathbf{S}$ et $\mathbf{S^{-1}}$, dont les colonnes (respectivement les lignes) sont formées des vecteurs propres à droite (respectivement à gauche) associés à chaque valeur propre, sont égales à :

$$\boldsymbol{S} = \begin{pmatrix} \rho a & -\rho a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\rho}{a} & -\frac{\rho}{a} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{S^{-1}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\rho a} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2\rho a} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{a^2} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

La matrice diagonale $\mathbf{\Lambda}$ est alors exprimée suivant :

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} u_1 + a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_1 - a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_1 \end{pmatrix}. \tag{G.7}$$

On définit le vecteur $\mathcal{L}_l = \Lambda_l l_l \frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{U}}}{\partial x_1}$, représentant l'amplitude des différentes ondes se propageant dans le domaine et dépendant des valeurs propres Λ_l et des vecteurs propres à droite l_l de $\boldsymbol{A_1}$. Ce vecteur est relié à la matrice $\boldsymbol{A_1}$ suivant :

$$\frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{U}}}{\partial t} + \boldsymbol{S \mathcal{L}} = 0. \tag{G.8}$$

Par identification avec la matrice $\boldsymbol{A_1}$, on trouve que le vecteur $\mathcal{L}_l$ peut s'écrire :

$$\mathcal{L}_1 = (u_1 + a)\left(\frac{1}{2}\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{1}{2\rho a}\frac{\partial p}{\partial x_1}\right), \tag{G.9}$$

$$\mathcal{L}_2 = (u_1 - a)\left(\frac{1}{2}\frac{\partial u_1}{\partial x_1} - \frac{1}{2\rho a}\frac{\partial p}{\partial x_1}\right), \tag{G.10}$$

$$\mathcal{L}_3 = u_1\left(\frac{\partial \rho}{\partial x_1} - \frac{1}{a^2}\frac{\partial p}{\partial x_1}\right), \tag{G.11}$$

$$\mathcal{L}_4 = u_1\frac{\partial u_2}{\partial x_1}, \tag{G.12}$$

$$\mathcal{L}_5 = u_1\frac{\partial u_3}{\partial x_1}, \tag{G.13}$$

$$\mathcal{L}_{5+i} = u_1\frac{\partial Y_i}{\partial x_1}, \tag{G.14}$$

$$\mathcal{L}_{5+N_e+j} = u_1\frac{\partial z_j}{\partial x_1}. \tag{G.15}$$

En replaçant ces relations dans les équations de Navier-Stokes quasi linéaires (G.5) (toujours avec $\boldsymbol{A_2}$ et $\boldsymbol{A_3}$ nuls), il vient :

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \rho a\left(\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_2\right) = 0, \tag{G.16}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\rho}{a}\left(\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_2\right) + \mathcal{L}_3 = 0, \tag{G.17}$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 = 0, \tag{G.18}$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + \mathcal{L}_4 = 0, \tag{G.19}$$

$$\frac{\partial u_3}{\partial t} + \mathcal{L}_5 = 0, \tag{G.20}$$

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \mathcal{L}_{5+i} = 0, \tag{G.21}$$

$$\frac{\partial z_j}{\partial t} + \mathcal{L}_{5+N_e+j} = 0. \tag{G.22}$$

On peut noter que l'utilisation d'une thermodynamique généralisée avec l'introduction des coefficients de dilatabilité et de compressibilité, ne modifie pas la forme prise par ces équations. La principale différence se situe simplement dans l'évaluation de la célérité du son a. Ces relations sont les équations qui doivent être résolues aux limites.

En pratique, lorsque l'on considère les grandeurs imposées aux limites, il est plus courant de travailler avec la température plutôt qu'avec la masse volumique du mélange. Les équations précédentes doivent alors être réécrites en tenant compte de cette nuance, à l'aide de la relation (G.2). De là, la relation (G.17) est remplacée par :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\gamma - 1)\frac{T}{c\omega_T}\left(\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_2\right) - \frac{T}{\rho\omega_T}\mathcal{L}_3 - \sum_{i=1}^{N_e}\frac{r_i T}{r\omega_T}\mathcal{L}_{5+i}. \tag{G.23}$$

G.3 Conditions limites d'entrée/sortie

Les relations (G.16) à (G.22) permettent de mettre en évidence l'information transportée par chacune des ondes se propageant à l'intérieur du domaine de calcul. Les ondes associées aux valeurs

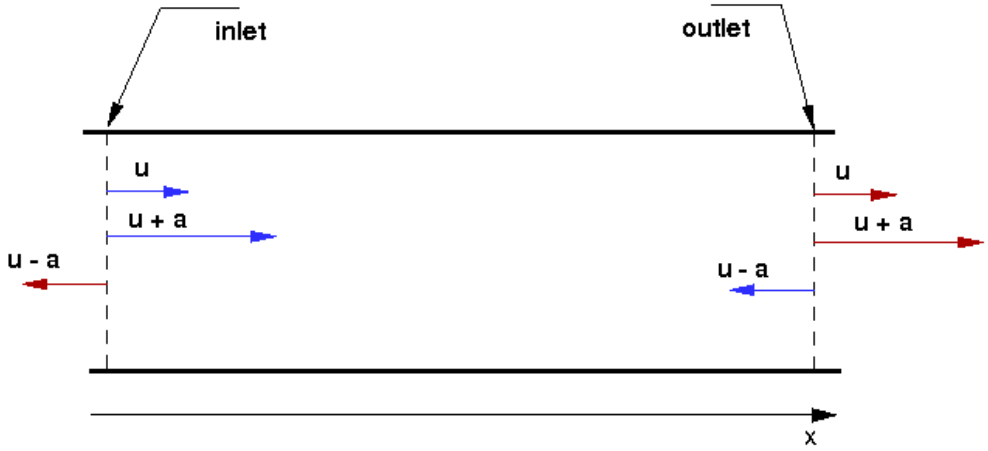

FIG. G.1 – *Schéma représentant la direction de propagation des ondes dans un domaine de calcul rectangulaire : en bleu, ondes entrantes, en rouge, ondes sortantes. Les ondes u sont associées à* $\mathcal{L}_3$, $\mathcal{L}_4$, $\mathcal{L}_5$, $\mathcal{L}_{5+i}$, $\mathcal{L}_{5+N_e+j}$, *les ondes* $u+a$ *à* $\mathcal{L}_1$ *et les ondes* $u-a$ *à* $\mathcal{L}_2$.

propres u_1 et $u_1 + a$ se propagent toujours dans le sens positif alors que les ondes $u_1 - a$ se propagent dans le sens négatif en écoulement subsonique ($u_1 < a$) et positif en supersonique (voir figure G.1).

- Dans le cadre d'une sortie subsonique, il n'y a que la pression qui doit être fixée, si bien que seule la relation (G.16) doit être résolue. Dans ce cas, seule l'onde $\mathcal{L}_2$ associée à la valeur propre $u - a$ pénètre dans le domaine. Pour obtenir une condition de sortie parfaitement non réfléchissante (pour des écoulements purement Euler), il suffit donc d'annuler cette onde. Ceci revient à introduire dans les relations précédentes la condition : $\mathcal{L}_2 = 0$. Cependant, en pratique, le fait d'annuler complètement cette onde conduit à une dérive progressive de la pression interne du domaine. Pour continuer à fixer la pression dans le domaine, il est préférable de définir $\mathcal{L}_2$ de telle sorte que la pression soit relaxée autour d'une valeur imposée :

$$\mathcal{L}_2 = K\left(p - p_{imp}\right), \tag{G.24}$$

  où K est le coefficient de relaxation. En pratique, dans CEDRE, il est fixé par défaut à 0,25.
- Dans le cadre d'une entrée subsonique non réfléchissante, toutes les ondes pénètrent dans le domaine, mise à part l'onde associée à la valeur propre $u - a$. Ainsi, pour obtenir une condition d'entrée parfaitement non réfléchissante, il faut annuler toutes les ondes sauf $\mathcal{L}_2$. En pratique, ce type de condition entraîne une dérive des grandeurs fixées en entrée, et en particulier du débit injecté. Pour empêcher ce type de comportement, il est nécessaire de relaxer l'état à l'intérieur du domaine vers l'état imposé en entrée, soit :

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_1 &= -\beta_1\left(u_1 - u_{1,imp}\right), && \text{(G.25)}\\
\mathcal{L}_3 &= -\beta_3\left(T - T_{imp}\right), && \text{(G.26)}\\
\mathcal{L}_4 &= -\beta_4\left(u_2 - u_{2,imp}\right), && \text{(G.27)}\\
\mathcal{L}_5 &= -\beta_5\left(u_3 - u_{3,imp}\right), && \text{(G.28)}\\
\mathcal{L}_{5+i} &= -\beta_{5+j}\left(Y_i - Y_{i,imp}\right), && \text{(G.29)}\\
\mathcal{L}_{5+N_e+j} &= -\beta_{5+N_e+j}\left(z_j - z_{j,imp}\right). && \text{(G.30)}
\end{aligned}$$

  Dans CEDRE, les coefficients β sont reliés directement au coefficient de pression K de manière à relaxer les conditions d'entrée à la même vitesse que la pression en sortie.

- Dans le cadre de conditions limites supersoniques, toutes les ondes sont soit entrantes (en entrée), soit sortantes (en sortie). Ainsi, l'utilisation de conditions limites caractéristiques pour des entrées/sorties supersoniques ne se justifie pas.

G.4 Prise en compte des gradients transversaux

Lorsque les gradients transversaux au niveau de la limite considérée deviennent trop importants, les ondes entrantes et sortantes ne peuvent plus être considérées monodimensionnelles. Dans ce cas, il est nécessaire de tenir compte de l'orientation des ondes pour améliorer l'efficacité des conditions non réfléchissantes. La méthode utilisée ici est tirée de Yoo *et al.* [232]. Lodato et al. [82] ont récemment adopté une méthode très similaire.

Les termes tangentiels, notés $\boldsymbol{\mathcal{T}}$, sont introduits dans la relation (G.8) de sorte que :

$$\frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{U}}}{\partial t} + \boldsymbol{S}\left(\boldsymbol{\mathcal{L}} + \boldsymbol{S^{-1}}\boldsymbol{\mathcal{T}}\right) = 0. \tag{G.31}$$

On pose $\boldsymbol{\Gamma} = -\boldsymbol{S^{-1}}\boldsymbol{\mathcal{T}}$.

Après quelques manipulations, les termes de la matrice $\boldsymbol{\Gamma}$ peuvent s'écrire :

$$\Gamma_1 = -\frac{1}{2}\left(u_i\frac{\partial u_1}{\partial x_k} + \frac{u_k}{\rho a}\frac{\partial p}{\partial x_k} + a\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\right), \tag{G.32}$$

$$\Gamma_2 = -\frac{1}{2}\left(u_k\frac{\partial u_1}{\partial x_k} - \frac{u_k}{\rho a}\frac{\partial p}{\partial x_k} - a\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\right), \tag{G.33}$$

$$\Gamma_3 = -u_k\left(\frac{\partial \rho}{\partial x_k} - \frac{1}{a^2}\frac{\partial p}{x_k}\right), \tag{G.34}$$

$$\Gamma_4 = -\left(u_k\frac{\partial u_2}{\partial x_k} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_2}\right), \tag{G.35}$$

$$\Gamma_5 = -\left(u_k\frac{\partial u_3}{\partial x_k} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_3}\right), \tag{G.36}$$

$$\Gamma_{5+i} = -u_k\frac{\partial Y_i}{\partial x_k}, \tag{G.37}$$

$$\Gamma_{5+N_e+j} = -u_k\frac{\partial z_j}{\partial x_k}. \tag{G.38}$$

En considérant ces expressions, les vecteurs $\boldsymbol{\mathcal{L}}$ représentant les amplitudes des différentes ondes peuvent être réécrits suivant :

$$\boldsymbol{\mathcal{L}} = \boldsymbol{\mathcal{L}^{1D}} + \boldsymbol{\Gamma}, \tag{G.39}$$

où $\boldsymbol{\mathcal{L}^{1D}}$ représente les amplitudes des ondes dans un contexte monodimensionnel (défini précédemment). Suivant cette relation, chaque condition posée sur les $\mathcal{L}_l$ en entrée ou en sortie est réécrite en faisant intervenir les termes transversaux. Par exemple, on a vu que lorsque l'on considère une sortie subsonique, l'onde $\mathcal{L}_2$ doit permettre de relaxer la pression à l'intérieure du domaine vers la pression fixée en sortie. Si on considère la matrice $\boldsymbol{\Gamma}$, on écrit :

$$\mathcal{L}_2 = K\left(p - p_{imp}\right) - \kappa\Gamma_2, \tag{G.40}$$

où κ est le coefficient de relaxation des termes transversaux. Dans CEDRE, κ est fixé par défaut à 0,1. Des expressions similaires peuvent être obtenues pour une entrée non réfléchissante.

G.5 Validation

On se propose ici de valider les conditions limites caractéristiques implantées dans CEDRE sur le cas d'un tourbillon 2D se propageant à travers une sortie subsonique. Ce cas test permet de valider à la fois l'amortissement des ondes normales à la sortie mais également des gradients transversaux à la direction de propagation du tourbillon.

On utilise ici un domaine de calcul carré de dimensions 3 cm × 3 cm avec un maillage de 80 × 80 mailles. La limite à gauche est une condition d'entrée subsonique non réfléchissante, alors que les trois autres limites sont des sorties subsoniques non réfléchissantes.

Les conditions initiales imposées pour générer le tourbillon sont dérivées d'un potentiel de vitesse Ψ prenant la forme d'une gaussienne. Ces conditions s'écrivent :

$$u = u_0 - \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{R}^2}(y-y_0)\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2}{2\mathcal{R}^2}\right], \tag{G.41}$$

$$v = v_0 + \frac{\mathcal{C}}{\mathcal{R}^2}(x-x_0)\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2}{2\mathcal{R}^2}\right], \tag{G.42}$$

$$P = P_0 + \rho_0\frac{\mathcal{C}^2}{\mathcal{R}^2}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2}{\mathcal{R}^2}\right], \tag{G.43}$$

$$T = \frac{P}{\rho_0 r}, \tag{G.44}$$

où x_0 et y_0 sont les coordonnées du centre du tourbillon, $\mathcal{R}$ est un rayon caractéristique du tourbillon (ici, on prendra $\mathcal{R}$ égal à un dixième de la longueur du domaine, soit 0,3 cm) et $\mathcal{C}$ est une constante déterminant l'intensité du tourbillon. $\mathcal{C}$ sera choisi de manière à ce que le différentiel de pression maximal observé par rapport à la pression de référence (1 atm) soit de l'ordre de 1000 Pa, soit $\mathcal{C} \approx 0{,}1$. Le tourbillon est convecté par une vitesse axiale u_0 valant 25 m.s^{-1}.

Des champs de pression instantanés relevés au cours de la traversée de la limite de sortie par le tourbillon sont tracés sur la figure G.2. Ces résultats ont été relevés à quatre instants différents : $t_1 = 10$ μs, $t_2 = 300$ μs, $t_3 = 600$ μs et $t_4 = 1$ ms. Trois méthodes de traitement des limites ont été employés : les champs représentés à gauche ont été tracés à partir de la méthode purement 1D ($\kappa = 0$), les champs au centre et à droite ont été tracés en tenant compte de la relaxation des gradients transversaux avec, respectivement, $\kappa = 1$ et $\kappa = 0{,}1$.

On observe clairement qu'une onde d'amplitude assez forte est créée au tout début du calcul (à t_1). Cette onde traverse ensuite les limites et est globalement très bien absorbée (en t_2), la méthode améliorée non relaxée montrant cependant une dérive de la pression en sortie plus importante que les autres méthodes. A t_3, le tourbillon sort du domaine et se trouve à cheval sur la limite. Les méthodes 1 et 2 montrent une dérive assez forte de la pression à cet instant, dérive qui n'est cependant pas observée avec la méthode améliorée relaxée. A l'instant t_4, le tourbillon est complètement sorti du domaine. Avec la méthode 2, un contour de pression résiduel est observé, alors que avec la méthode 3, le champ de pression est redevenu complètement homogène. Ce cas test permet d'évaluer parfaitement la capacité des limites non réfléchissantes codées à absorber les éventuelles ondes acoustiques dans le domaine.

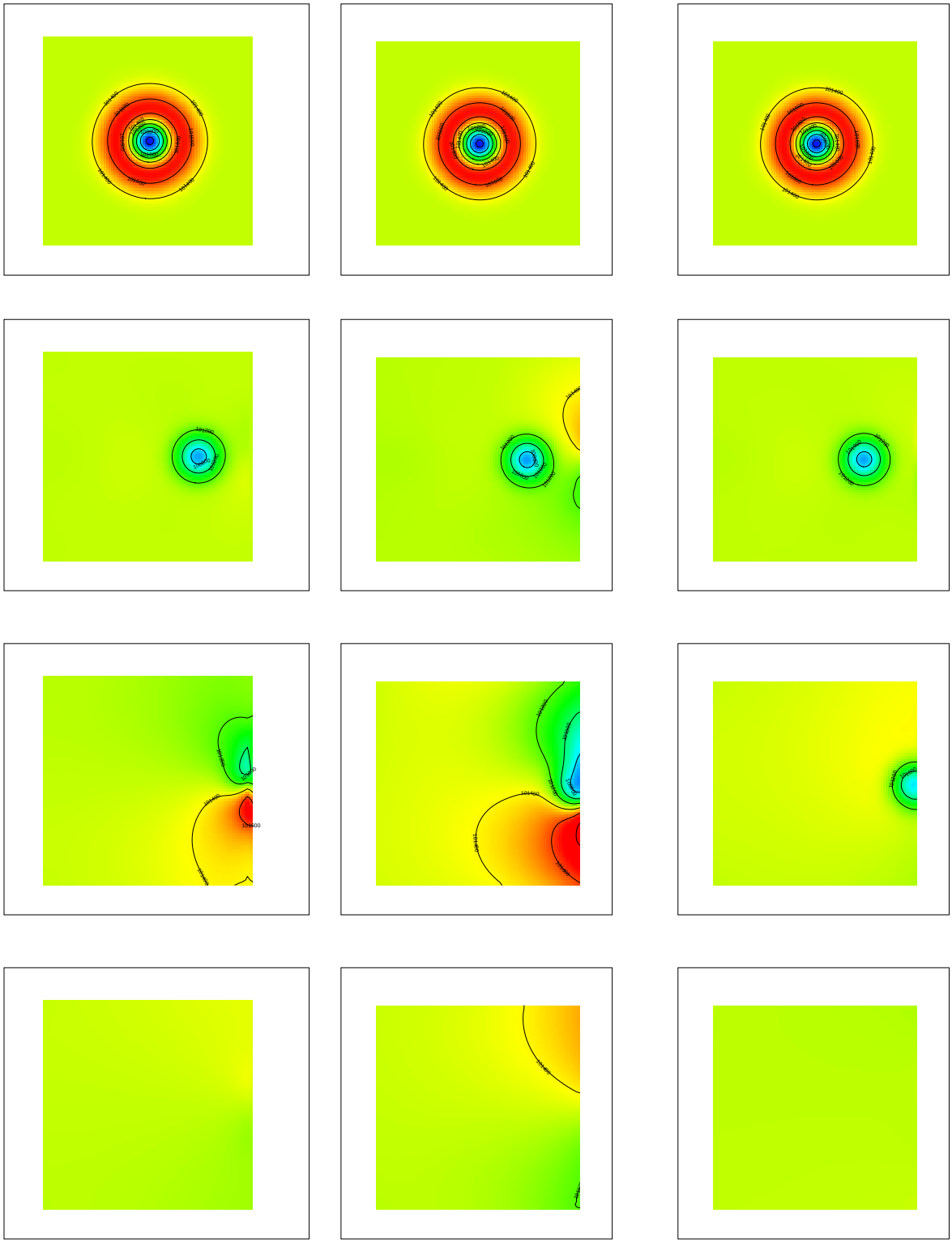

FIG. G.2 – *Champs de pression : à gauche limites basées sur les conditions de non réflexion de base, au centre gradients transversaux sans relaxation, à droite, gradients transversaux relaxés. Les schémas sont pris de haut en bas à : 10 µs, 300 µs, 600 µs et 1 ms.*

Annexe H

Optimisation du mécanisme GRI-Mech 3.0 pour la chimie de NO

H.1 Nécessité de modifier GRI-Mech 3.0

Des tests réalisés sur des flammes laminaires évoluant dans les conditions de la flamme de Nandula (à richesse 0,6) ont révélé l'incapacité du mécanisme GRI-Mech 3.0 à prédire des niveaux de NO corrects. Dans ces conditions, le mécanisme du NO-thermique est presque inexistant et la quasi totalité du NO formé est produit via le mécanisme du prompt-NO ou d'autres voies. Le problème ici est donc purement chimique, ce qui met directement en défaut le mécanisme GRI-Mech 3.0.

La formation de NO à l'aide du mécanisme GRI-Mech 3.0 a récemment été vérifiée sur le cas de flammes de prémélange méthane/air sous différentes conditions. Ainsi, les calculs de Thomsen *et al.* [128] sur des flammes atmosphériques et à hautes pressions pour différentes richesses, ont montré que le mécanisme GRI-Mech avait tendance à largement sous-estimer la formation de NO, en particulier en régime riche. Les travaux plus récent de Sutton et Fleming [206] ou El Bakali *et al.* [9] sur des flammes à basses pressions, ont permis de confirmer cette tendance.

Compte tenu de ces observations, on se propose ici de développer un mécanisme réactionnel détaillé, adapté à la modélisation de la formation de NO dans les flammes méthane/air, en particulier en régime pauvre. Pour ce faire, on procède tout d'abord par une revue complète, mais non exhaustive, des travaux les plus récents concernant l'amélioration des principales voies de formation de NO (hors mécanisme de Zel'dovitch).

Ce travail permet de réunir toutes les avancées concernant la compréhension et la modélisation des mécanismes de production de NO dans les flammes méthane/air, en se focalisant sur les voies considérées parfois à tort comme secondaires. En tenant compte de tous les modèles spécifiques discutés, on se propose ensuite de construire un mécanisme réactionnel détaillé unique, qui a pour base le mécanisme GRI-Mech 3.0, et comprenant tous les sous-mécanismes pour NO identifiés. Le mécanisme ainsi créé est finalement testé sur le cas d'une flamme laminaire étudiée expérimentalement par Klassen et al. [119].

Ce travail constitue à la fois une revue complète des avancées récentes dans le domaine de la modélisation de la formation de NO, mais également un essai pour proposer un mécanisme réactionnel détaillé incluant toutes les voies de production améliorées identifiées.

H.2 CH précurseur du prompt-NO

A l'origine, Fenimore [73] a supposé que la formation du NO rapide découlait directement du radical HCN formé par la réaction entre CH et N_2. Par la suite, l'oxydation de HCN conduit à la formation de différents produits intermédiaires tel que NH, puis de NO.

Les travaux théoriques de Moskaleva et Lin [144], ont montré que la principale voie de production de NO rapide passait en fait par l'oxydation du radical NCN plutôt que HCN. Les mécanismes d'oxydation de NCN conduisant à la formation de NO ont ensuite été déterminés de manière empirique ou théorique. Sutton et Fleming [206] ont ainsi proposé d'ajouter au mécanisme GRI-Mech 3.0 d'origine le jeu d'équations suivantes (les paramètres de la loi d'Arrhénius présentés ci-dessous et dans

toute la section sont exprimés en cm - mol - K - cal) :

	A	β	Ea
$CH + N2 \longrightarrow NCN + H$	$6.03E+12$	0.0	22150
$NCN + O \longrightarrow NO + CN$	$2.55E+13$	0.15	-34
$NCN + OH \longrightarrow NO + HCN$	$4.70E+10$	0.44	4000
$NCN + O2 \longrightarrow NO + NCO$	$3.80E+09$	0.51	24590
$NCN + H \longrightarrow HCN + N$	$1.89E+14$	0.0	8425

La première réaction remplace $CH + N_2 = HCN + N$. Notons que ces paramètres ont été obtenus par Sutton et Fleming [206] pour des flammes à très basses pressions.

Des tests numériques effectués par El Bakali *et al.* [9] à pression atmosphérique ont montré que l'utilisation des paramètres donnés précédemment sous-estiment largement la production de prompt NO. Les auteurs ont alors proposé de nouveaux paramètres pour la loi d'Arrhenius correspondant à l'équation $CH + N_2$. En outre, le mécanisme de dissociation de NCN a également été modifié suivant Glarborg *et al.* [97]. Les nouveaux paramètres pour ce sous-mécanisme sont explicités dans le tableau ci-dessous :

	A	β	Ea
$CH + N_2 \longrightarrow NCN + H$	$5.10E+11$	0.0	13600
$NCN + O \longrightarrow NO + CN$	$1.00E+14$	0.	0.
$NCN + OH \longrightarrow NO + HCN$	$5.00E+13$	0.	0.
$NCN + O_2 \longrightarrow NO + NCO$	$1.00E+13$	0.	0.
$NCN + H \longrightarrow HCN + N$	$1.00E+14$	0.	0.

Outre NCN, d'autres radicaux peuvent être formés par la réaction entre CH et N_2, et en particulier $HNCN$. Les mécanismes de formation et d'oxydation de $HNCN$ sont les suivants :

	A	β	Ea
$CH + N_2(+M) \longrightarrow HNCN(+M)$ (1)	$1.65E+21$	-3.62	14200
$HNCN + O \longrightarrow NO + CN$	$1.88E+14$	-0.05	74
$HNCN + OH \longrightarrow NO + HCN$	$1.60E+26$	-4.5	475
$HNCN + O_2 \longrightarrow NO + NCO$	$1.265E+08$	1.28	24240
$HNCN + H \longrightarrow HCN + N$	$1.88E+14$	-0.05	74

(1) Correction basse pression : 8.00E+27 -3.62 14200
Efficacités de troisième corps : H_2/2.0, H_2O/6.0, CH_4/2.0, CO/1.5, CO_2/2.0, C_2H_6/3.0, Ar/0.7

Les paramètres d'Arrhenius relatifs à l'oxydation de $HNCN$ proviennent des travaux de Xu et Lin [230], [231] (sauf pour la réaction impliquant H). Ces réactions ont en fait peu d'effets sur la production totale de NO puisque celle-ci est avant tout contrôlée par la dissociation de N_2.

Les réactions présentées dans les deux tableaux précédents ont été ajoutés au mécanisme GRI-Mech 3.0. Les espèces NCN et $HNCN$, qui n'existent pas dans le mécanisme GRI-Mech d'origine, doivent être ajoutées, leurs proprietés thermodynamiques étant tirées de Burcat et McBride [35].

H.3 CH_2 précurseur du prompt-NO

Williams et Fleming [226] ont montré que, malgré l'addition du sous mécanisme pour NCN, la prédiction de la formation de NO dans les flammes très pauvres reste largement sous-estimée. L'existence d'autres précurseurs de NO doit donc être considérée. Il semble en particulier que le méthylène singlet et triplet, $^1CH_2$ et $^3CH_2$ sont des précurseurs probables du NO rapide. Les travaux les plus récents de Williams et Fleming [227] ont montré que la réaction de CH_2 avec N_2 conduit à la formation de diazomethane, CH_2N_2, via :

	A	β	Ea
$.^1CH_2 + N_2 \longrightarrow CH2N2$ (1)	$4.865E+11$	0.422	$-1755.$

(1) Correction basse pression : 5.06E+41 -7.63 3864
Coefficients de Troe [227] : 0.465, 201, 1773, 5333
Efficacités de troisième corps : H_2/2.0, H_2O/6.0, CH_4/2.0, CO/1.5, CO_2/2.0, C_2H_6/3.0, Ar/0.7

Dans ce cas, les réactions entre CH_2N_2 et les principaux radicaux sont prises en compte grâce aux réactions élémentaires suivantes [227] :

	A	β	Ea
$CH_2N_2 + O \longrightarrow H_2CN + NO$	$4.00E+12$	0.	0.
$CH_2N_2 + O \longrightarrow CH_2O + N_2$	$1.00E+13$	0.	0.
$CH_2N_2 + O \longrightarrow HCNN + OH$	$2.585E+05$	2.5	3100
$CH_2N_2 + OH \longrightarrow CH_2OH + N_2$	$1.00E+13$	0.	0.
$CH_2N_2 + OH \longrightarrow HCNN + H_2O$	$9.60E+05$	2.0	-840
$CH_2N_2 + H \longrightarrow CH_3 + N_2$	$1.13E+13$	0.	2540
$CH_2N_2 + H \longrightarrow HCNN + H_2$	$1.167E+07$	2.1	4870

Lors de la dissociation de CH_2N_2 par les radicaux O, H et OH, l'espèce $HCNN$ apparaît comme un des produits majoritaires. $HCNN$ est ensuite lui même oxydé par O et OH, ce qui conduit à la production de NO. GRI-Mech 3.0 contient déja un sous mécanisme tenant compte de ces réactions d'oxydation, cependant, Williams *et al.* [227] proposent de légères modifications (les réactions portant un astérisque ont été modifiées, celles portant une croix ont été ajoutées) :

	A	β	Ea
$HCNN + O \longrightarrow CO + H + N_2(*)$	$1.00E+13$	0.	0.
$HCNN + O \longrightarrow HCN + NO(*)$	$5.00E+12$	0.	0.
$HCNN + OH \longrightarrow H_2CN + NO(+)$	$5.00E+12$	0.	10000
$HCNN + H \longrightarrow^3 CH_2 + N_2(*)$	$3.00E+13$	0.	0.
$HCNN + H \longrightarrow HCN + NH(+)$	$1.00E+13$	0.	0.

CH_2N_2 n'étant pas inclus dans le mécanisme GRI-Mech 3.0, l'espèce doit être ajoutée avec ses proprietés thermodynamiques tirées de [35].

H.4 NNH comme précurseur de NO

Le radical NNH a été reconnu par Bozzelli et Dean [24] comme un précurseur probable et relativement important de la formation de NO. Tomeczek et Gradon [212] ont ainsi inclus avec succès un sous-mécanisme de formation de NO impliquant NNH, où les vitesses des principales réactions

ont été déterminées par Bozzelli et Dean [24]. Les réactions élémentaires entre NNH et les radicaux hydrocarbonés au sein du front de flamme évaluées par Miller et Bowman [141] ont également été considérées. Les principales réactions élémentaires impliquées sont détaillées ci-dessous [24] :

	A	β	Ea
$NNH + M \longrightarrow N_2 + H + M$ (1)	$1.30E+08$	-0.11	5000
$NNH + O \longrightarrow NH + NO$	$3.30E+14$	-0.23	-1010
$NNH + O \longrightarrow N_2O + H$	$1.40E+08$	-0.40	475
$NNH + O \longrightarrow N_2 + OH$	$1.70E+10$	-1.23	500
$NNH + OH \longrightarrow N_2 + H_2O$	$2.40E+16$	-2.88	2440
$NNH + O_2 \longrightarrow N_2O + OH$	$2.90E+11$	-0.34	150
$NNH + O_2 \longrightarrow N_2 + HO_2$	$1.2E+12$	-0.34	150

(1) Efficacités de troisième corps : 1 pour toutes les espèces.

Tomeczek et Gradon utilisent en fait un sous mécanisme dans lequel la vitesse de réaction de la seconde équation élémentaire est modifiée par leurs soins. Toutefois, Konnov et Dyakov [121] ont observé que les résultats obtenus dans [212] étaient incorrects et ont donc suggéré d'utiliser de préférence les paramètres donnés initialement par Dean et Bozzelli [24] (comme ci-dessus).

La formation de NO via NNH est également largement dépendante de la production de NNH, elle même conditionnée par des espèces telles que NH ou NH_2. Ainsi, les sous mécanismes réactionnels de NH et NH_2 présents dans le mécanisme GRI-Mech 3.0 doivent également être modifiés suivant Glarborg *et al.* [97] de manière à rester consistant avec les améliorations apportées précédemment.

H.5 Formation de NO via NO_2 et N_2O

Pour tenir compte des développements récents concernant la formation de NO via N_2O, le sous mécanisme impliquant N_2O dans GRI-Mech 3.0 doit être modifié. Cette voie de formation de NO a été étudiée en détail par Tsang et Herron [214].

Tomeczek et Gradon [212] ont proposé un sous-mécanisme permettant de tenir compte de la formation de NO via la décomposition de N_2O. Cependant, suivant les recommendations de Konnov et Dyakov [121], les paramètres donnés initialement par Tsang et Herron [214] ont été retenus. Ces réactions, ainsi que des réactions de dissociation supplémentaires entre N_2O et différents radicaux hydrocarbonés, sont tirés de Glarborg *et al.* [97] :

	A	β	Ea
$N_2O + M \longrightarrow N_2 + O + M$ (1)	$4.00E+14$	0.	56200
$N_2O + O \longrightarrow NO + NO$	$6.60E+13$	0.	26630
$N_2O + O \longrightarrow NO + O_2$	$1.00E+14$	0.	26800
$N_2O + H \longrightarrow N_2 + OH$	$4.40E+14$	0.	19254
$NNH + O \longrightarrow N_2O + H$	$1.00E+14$	0.	0
$NH + NO \longrightarrow N_2O + H$	$2.90E+14$	$-.40$	0
$N_2O + OH \longrightarrow N_2 + HO_2$	$1.30E-02$	4.72	36560
$N_2O + OH \longrightarrow HNO + NO$	$1.20E-04$	4.33	25080
$N_2O + NO \longrightarrow NO_2 + N_2$	$2.75E+14$	0.	50000

(1) Efficacités de troisième corps : H_2/2.0, H_2O/6.0, CH_4/2.0, CO/1.5, CO_2/2.0, C_2H_6/3.0, Ar/0.7

La possibilité d'optimiser la modélisation de la formation de NO par la voie du NO_2 a également été étudiée. Ainsi, un sous mécanisme relativement détaillé, composé de réactions élémentaires incluant

NO_2, a été introduit dans GRI-Mech 3.0. Les constantes de réaction correspondantes ont été tirées de Glarborg *et al.* [97], [98] :

	A	β	Ea
$NO + O + M \longrightarrow NO + M$ (1)	$7.50E+19$	-1.41	0
$NO_2 + O \longrightarrow NO + O_2$	$3.90E+12$	0.	-238
$NO_2 + H \longrightarrow NO + OH$	$8.40E+13$	0.	0
$NO + HO_2 \longrightarrow NO_2 + OH$	$2.10E+12$	0.	-480

(1) Efficacités de troisième corps : N_2/1.70, O_2/1.50, H_2O/10.

Ces quelques réactions élémentaires sont ensuite complétées par une série de réactions entre NO_2 et les radicaux carbonés tels que CN, CH_x ou CO. L'intégralité de ces réactions et des constantes associées peut être trouvée dans [97].

H.6 Validation du mécanisme modifié et discussion

La validation du mécanisme incluant les voies de formation de NO décrites précédemment est réalisée par comparaison aux résultats expérimentaux obtenus sur les flammes $CH_4/O_2/N_2$ atmosphériques de Klassen *et al.* [119] (pour des raisons de stabilité le ratio de dilution volumique utilisé est de 3,1). Les tests expérimentaux couvrent une très large gamme de richesses et de pressions, et les mesures de NO effectuées forment donc une base de données assez complète. Ces tests expérimentaux ont été réalisés à l'aide d'un brûleur laminaire de type McKenna qu'il est possible de modéliser directement à l'aide de CHEMKIN (résolution d'un problème de flamme stabilisée par un brûleur). Les conditions expérimentales choisies par Klassen *et al.* sont les suivantes : pression 1 atm, débit 58,33 cm^3/s, ratio de dilution volumique de 3,1 et richesse variable.

Dans notre cas, cinq flammes ont été simulées dans les conditions de l'expérience à différentes richesses : 0,6, 0,8, 1, 1,2 et 1,4.

Dans l'expérience, les mesures de Y_{NO} et de température sont réalisées à 7 mm au dessus du brûleur. Il est cependant difficile de respecter cette condition au niveau du calcul du fait que les pertes thermiques sont difficilement contrôlables. Ainsi, pour pouvoir se comparer convenablement à l'expérience, on relèvera les niveaux de Y_{NO} dans chaque flamme à l'endroit où la température simulée est égale à la température mesurée.

φ	T [119]	n_{NO} expé. [119]	n_{NO} GRI-Mech	n_{NO} MGRI
0,6	1700	2	1,2	1,9
0,8	1770	4	2,55	3,95
1	1910	8	8,2	7,75
1,2	1830	14,1	13,4	6,6
1,4	1870	21,3	4	1,7

TAB. H.1 – *Concentrations de NO numériques et expérimentales relevées sur les flammes de Klassen et al. [119] (unités : densité de nombre* $\times$ *10*$^{-13}$ *cm*$^{-3}$*).*

Les résultats expérimentaux et numériques sont présentés tableau H.1. Les concentrations de NO y sont exprimées en densité de nombre, ce qui correspond au nombre de molécules de NO contenues dans 1 cm^{-3}. La conversion entre fractions massiques et densité de nombre s'effectue suivant :

$$n_{NO} = \frac{\rho \mathcal{N}_A Y_{NO}}{M_{NO}}, \tag{H.1}$$

où $\mathcal{N}_A$ est le nombre d'Avogadro ($6{,}022.10^{+23}$).

Les résultats présentés dans le tableau H.1 montrent une nette amélioration des niveaux de NO relevés en régime pauvre. En revanche, en régime riche, le mécanisme GRI-Mech modifié tend à largement sous-estimer les niveaux expérimentaux, et conduit à des concentrations inférieures à celles observées avec GRI-Mech 3.0.

En régime pauvre, seule la modification de la filière N_2O conduit à une augmentation significative du niveau de NO formé. Ceci est vérifié sur la figure H.1 tirée de [128], où l'on visualise à richesse 0,6 la contribution des différentes voies de formation de NO avec deux mécanismes détaillés dont GRI-Mech.

A la stœchiométrie, la voie de formation principale de NO est celle du NO thermique. Celle-ci n'a pas été modifiée lors de ce travail, ce qui explique les faibles écarts observés dans H.1 à richesse 1.

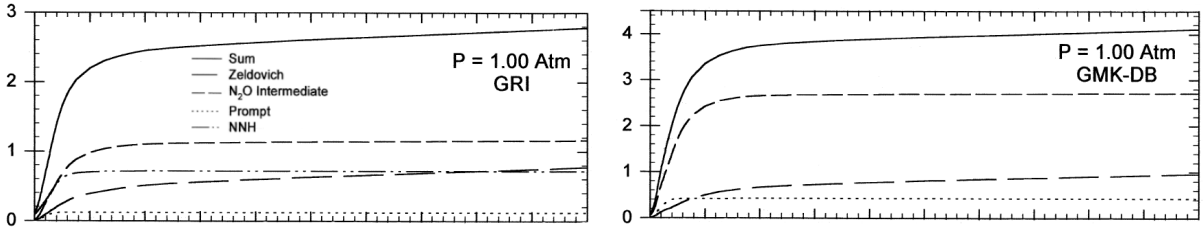

FIG. H.1 – *profils de Y_{NO} obtenus à richesse 0,6 et $P = 1$ atm par Thomsen et al. [128] avec GRI-Mech et le mécanisme GMK-DB (flammes méthane/air avec un rapport de dilution N_2/O_2 de 2,2).*

En régime riche, la voie de production prépondérante est celle du prompt NO. On observe dans cette gamme de richesse une diminution du niveau de NO calculé avec le mécanisme modifié par rapport au calcul de référence, conduisant à une importante sous-estimation des données expérimentales. Ici, la principale lacune du mécanisme GRI-Mech 3.0 réside en fait dans une mauvaise évaluation des pics de CH [124]. Une compensation d'erreurs permet d'obtenir des niveaux corrects avec GRI-Mech, mais lorsqu'un sous mécanisme plus évolué pour le prompt-NO est utilisé, les différences observées deviennent trop importantes. Le mécanisme GRI-Mech 3.0 ne peut donc pas être utilisé pour modéliser la formation de NO en régime riche sans modification de la production de CH.

H.7 Conclusion

Le travail présenté ici a permis de regrouper les travaux les plus récents concernant la modélisation de la formation de NO au sein de flammes méthane/air. Pour ce faire, un important travail bibliographique a permis d'identifier les principales avancées réalisées récemment dans la compréhension des mécanismes de formation mis en jeux. Ainsi, certaines voies considérées parfois comme négligeables ont été prises en compte (comme celle du prompt-NO, suivant NNH ou suivant N_2O). Tous ces sous-mécanismes, dispersés dans la littérature, ont été discutés au sein de ce travail.

Ceux-ci ont ensuite été inclus au schéma réactionnel détaillé GRI-Mech 3.0, de manière à créer un nouveau mécanisme permettant une modélisation plus précise de la formation de NO, en particulier en régime pauvre. Ce travail constitue donc un essai (concluant) pour améliorer les capacités de GRI-Mech à prédire la formation de NO.

Le mécanisme modifié obtenu à la fin de cette étude a été testé et validé sur le cas simple de flammes de prémélange laminaires stabilisées au nez d'un brûleur (calculs PREMIX). Les résultats obtenus ont pu être comparés aux expériences de Klassen *et al.* [119].

Ces calculs ont mis en évidence l'incapacité du mécanisme GRI-Mech 3.0 à prédire la formation de NO en régime pauvre. En revanche, les capacités prédictives du mécanisme modifié sous les mêmes conditions sont largement améliorées. La comparaison des contributions de chaque voie prise en compte

dans ce travail (figure H.1) a montré que la sous-estimation des niveaux de NO prédits par GRI-Mech en régime sous-stœchiométrique était particulièrement due à deux voies :

- la voie de formation impliquant N_2O est sous-estimée par GRI-Mech ;
- la voie de formation suivant NNH est sur-estimée par GRI-Mech.

Ainsi, les améliorations portées à ces deux sous-mécanismes, qui sont par ailleurs très souvent négligés devant les mécanismes du prompt-NO et du NO thermique, a permis de retrouver des niveaux de NO corrects au sein de flammes pauvres.

En régime stœchiométrique, le mécanisme de formation de NO prépondérant est celui de Zel'dovitch. On estime que ce mécanisme est aujourd'hui très bien connu et il n'a donc pas été retouché dans le cas présent. Par conséquent, des résultats très comparables sont obtenus à richesse 1 entre les mécanismes GRI-Mech d'origine et modifié.

En régime sur-stœchiométrique, les résultats montrent que les deux mécanismes utilisés ne permettent pas de modéliser correctement la formation de NO (en particulier le mécanisme modifié). En fait, dans cette gamme de richesse, c'est la voie du prompt-NO qui est prépondérante. Or, celle-ci dépend directement des concentrations de CH et de CH_2 prédites par le modèle cinétique. GRI-Mech, et par conséquent notre mécanisme modifié, ne permettent pas de modéliser avec précision la formation de ces deux espèces [124], ce qui explique les larges écarts observés.

En conclusion, le mécanisme GRI-Mech modifié peut être utilisé de préférence en régime pauvre alors que le mécanisme GRI-Mech d'origine reste conseillé en régime riche. Lorsque l'on se trouve près de la stœchiométrie, les deux modèles peuvent être employés.

Dans le cadre des calculs PRECCINSTA présentés dans ce mémoire, où une étude détaillée de l'émission de NO par la chambre est proposée, le mécanisme modifié développé ici n'a pas été utilisé. Pour des raisons pratiques, nous avons plutôt choisi d'employer un autre modèle, introduit dans le chapitre 6.

Annexe I

Profils supplémentaires pour les simulations de la configuration de Nandula

---

Dans le cadre des calculs RANS réalisés sur la configuration de Nandula, la grande quantité de résultats obtenus nous encourage à regrouper ici un certains nombre de profils non présentés dans le chapitre 4. On retrouve ainsi, pour chaque cas de calcul RANS, les profils de température et de fraction massique de O_2 moyens.

Dans ce qui suit, sont également regroupés les profils de température et de la fraction massique de O_2 obtenus par les simulations LES.

I.1 Variance algébrique et dissipation scalaire BML

I.2 Variance algébrique et dissipation scalaire ITNFS

I.3 Variance transportée

I.4 Simulations LES

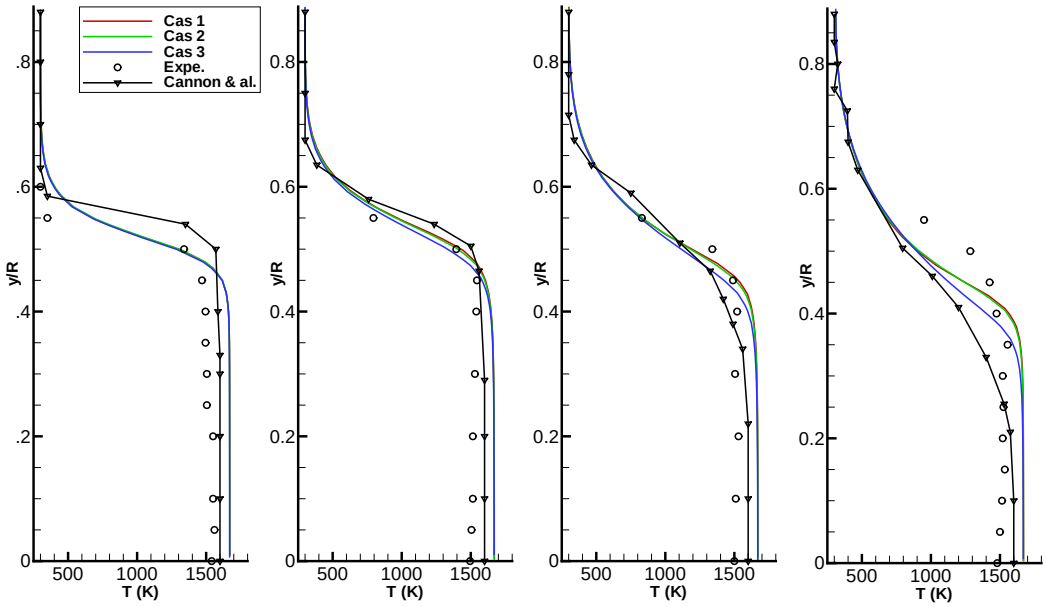

FIG. I.1 – *Profils de température (K) aux 4 stations prédéfinies dans la chambre de combustion. Calculs RANS avec variance algébrique et dissipation scalaire modélisée via l'approche BML.*

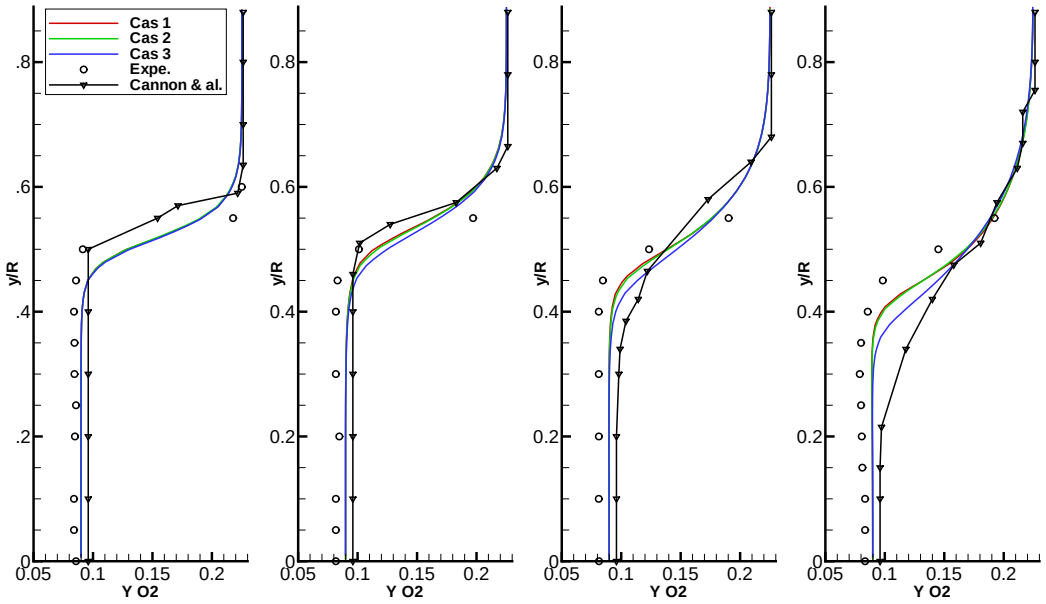

FIG. I.2 – *Profils de fraction massique de O_2 aux 4 stations prédéfinies dans la chambre de combustion. Calculs RANS avec variance algébrique et dissipation scalaire modélisée via l'approche BML.*

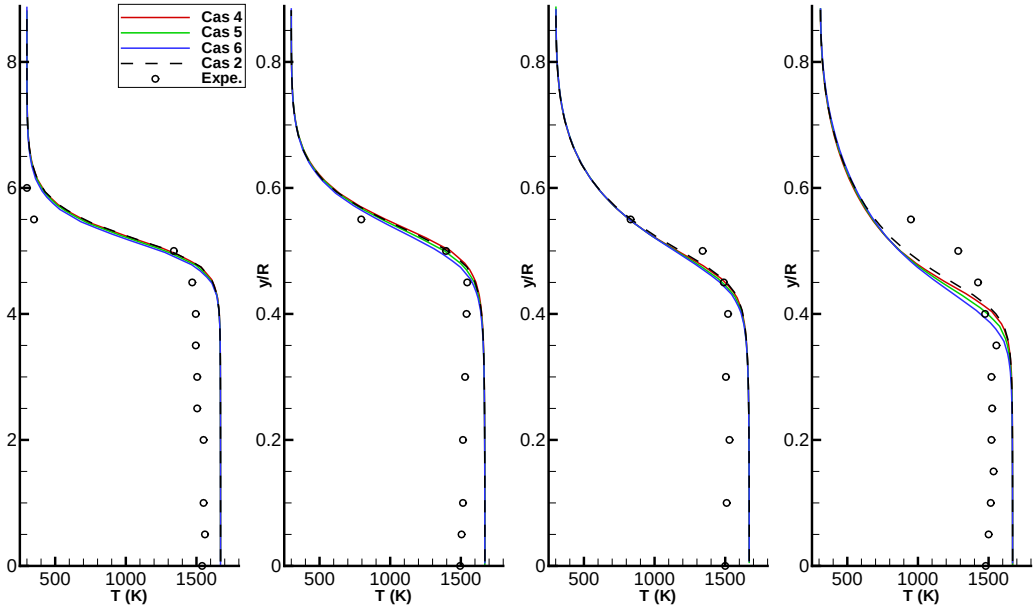

FIG. I.3 – *Profils de température (K) aux 4 stations prédéfinies dans la chambre de combustion. Calculs RANS avec variance algébrique et dissipation scalaire modélisée via l'approche ITNFS.*

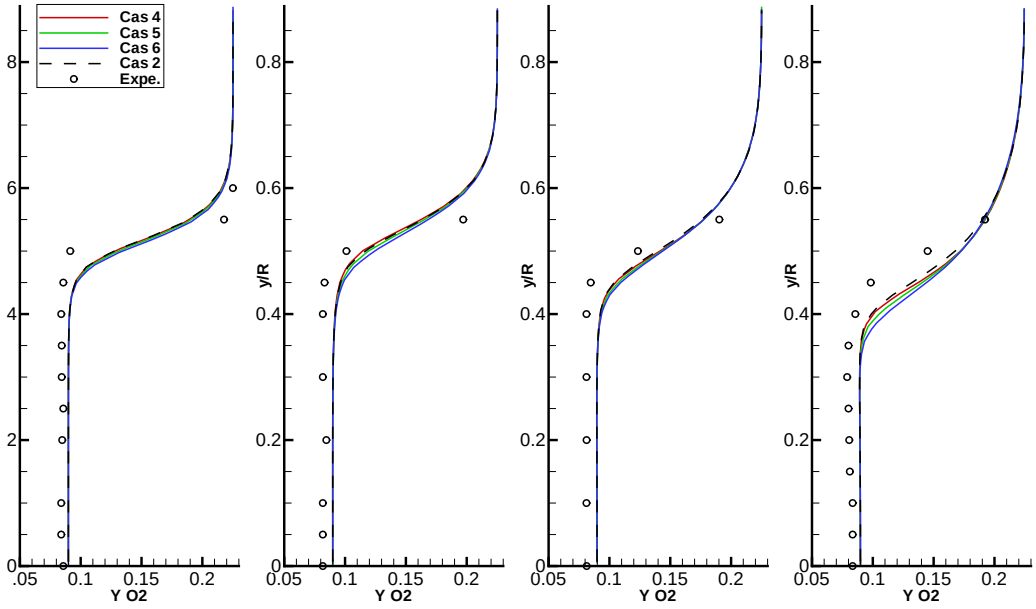

FIG. I.4 – *Profils de fraction massique de O_2 aux 4 stations prédéfinies dans la chambre de combustion. Calculs RANS avec variance algébrique et dissipation scalaire modélisée via l'approche ITNFS.*

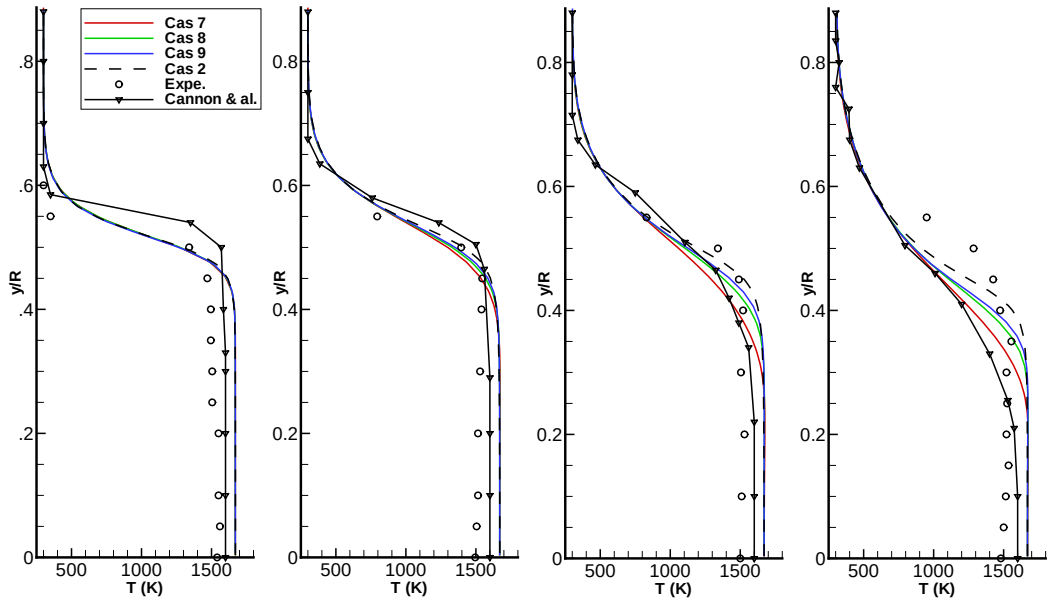

FIG. I.5 – *Profils de température (K) aux 4 stations prédéfinies dans la chambre de combustion. Calculs RANS avec variance transportée et dissipation scalaire modélisée via l'approche BML.*

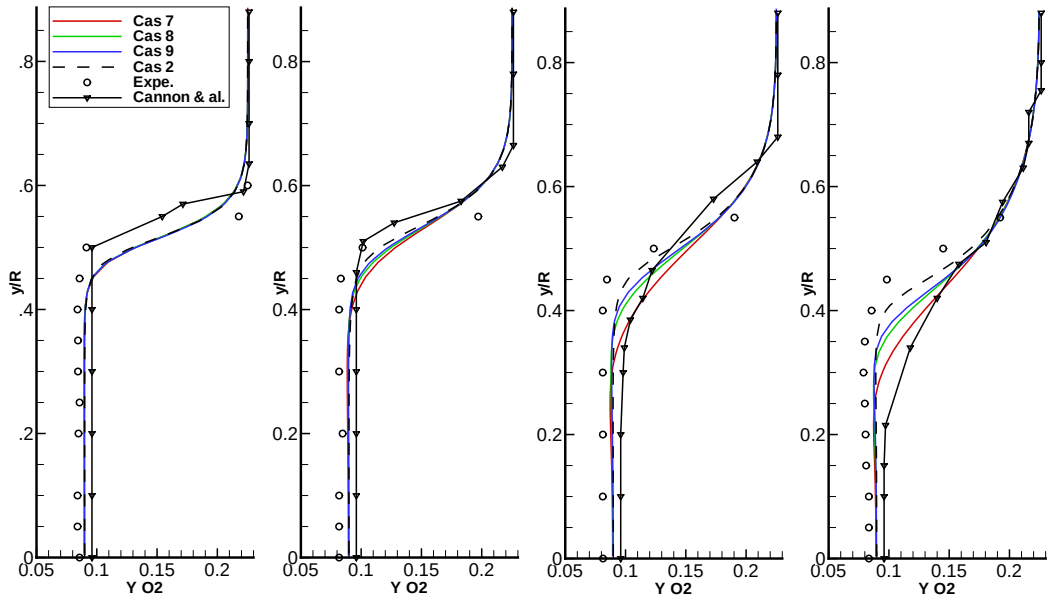

FIG. I.6 – *Profils de fraction massique de O_2 aux 4 stations prédéfinies dans la chambre de combustion. Calculs RANS avec variance transportée et dissipation scalaire modélisée via l'approche BML.*

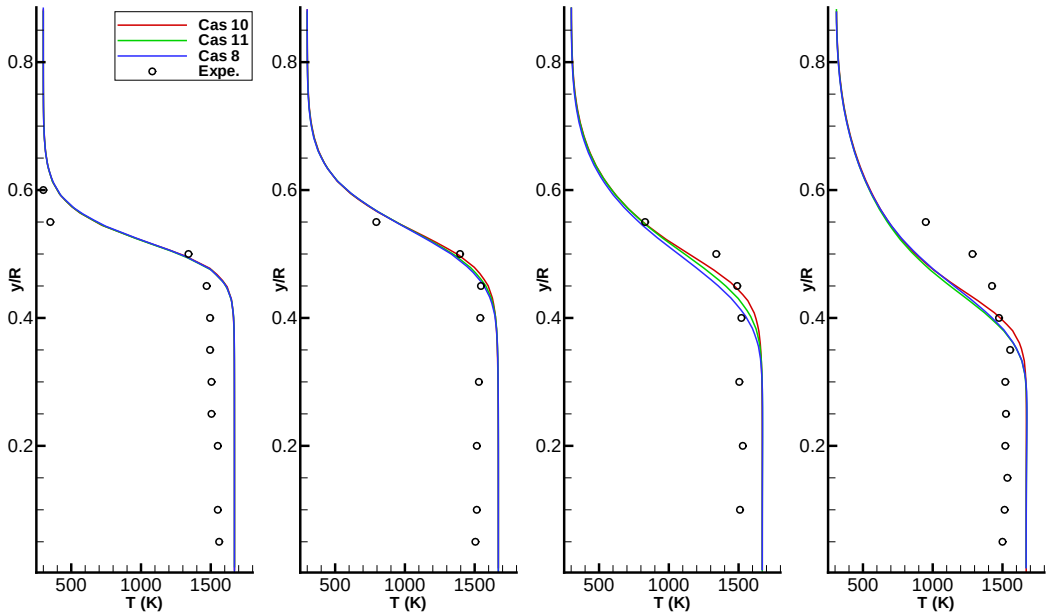

FIG. I.7 – *Profils de température (K) aux 4 stations prédéfinies dans la chambre de combustion. Calculs RANS avec variance transportée et dissipation scalaire modélisée via l'approche ITNFS.*

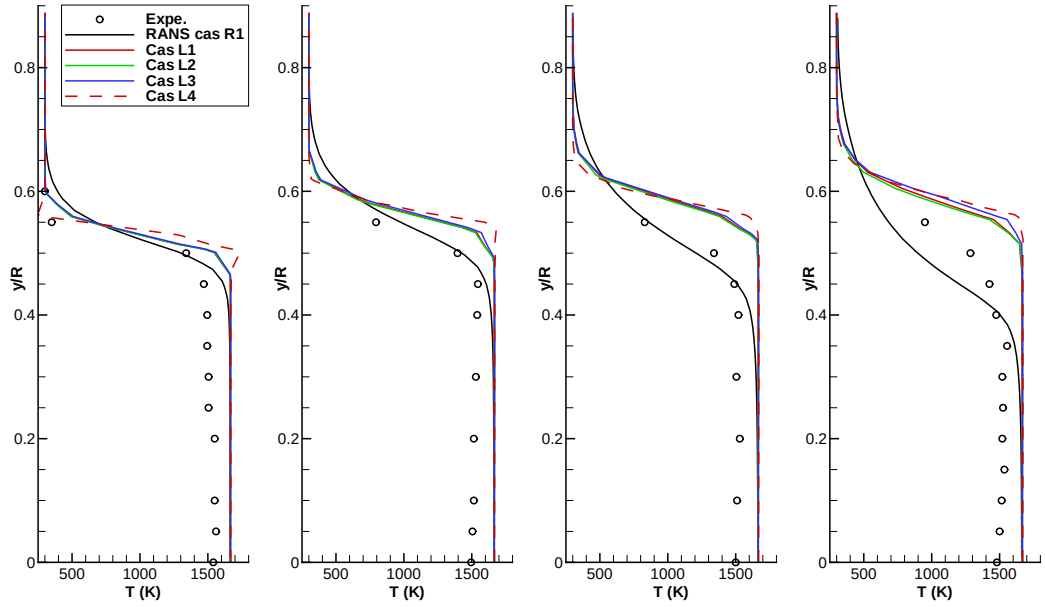

FIG. I.8 – *Profils moyens de température (K) dans la chambre de combustion obtenus pour les cas de calculs LES.*

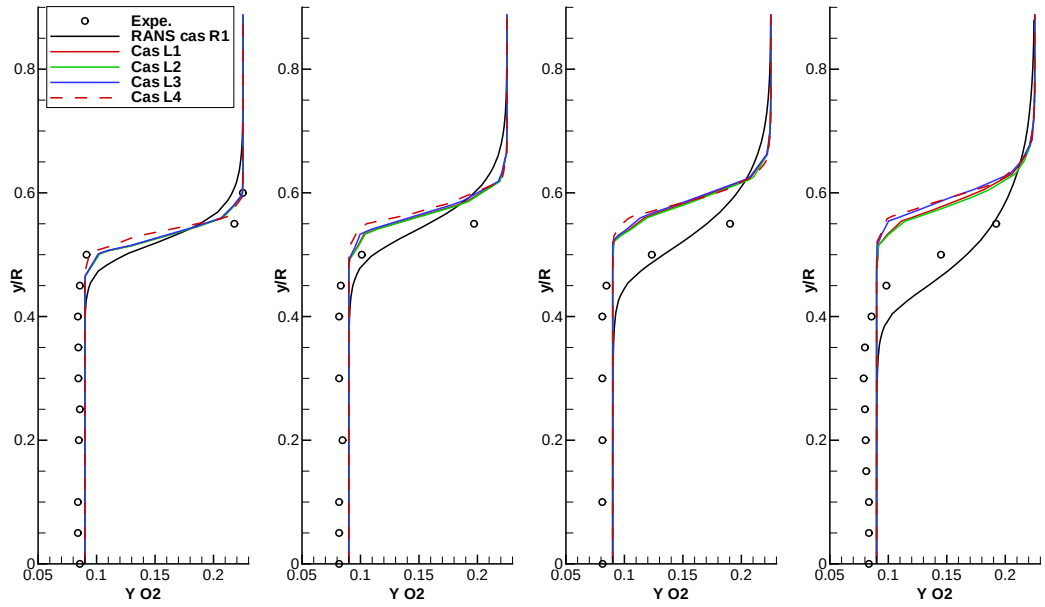

FIG. I.9 – *Profils moyens de Y_{O_2} dans la chambre de combustion obtenus pour les cas de calculs LES.*

Annexe J

Profils supplémentaires pour les simulations de PRECCINSTA

Dans ce chapitre sont présentés des profils supplémentaires obtenus grâce aux simulations LES effectuées sur la configuration PRECCINSTA prémélangée. On considère dans un premier temps les profils de vitesses moyennes et fluctuantes suivant les axes y et z, puis des profils de fractions massiques de CH_4, O_2 et de H_2O sont présentés. Tous les cas de calculs sont ici traités (comparaison des modèles de variance, comparaison des maillages, comparaison des modèles de combustion turbulente).

J.1 Comparaisons des profils de vitesses

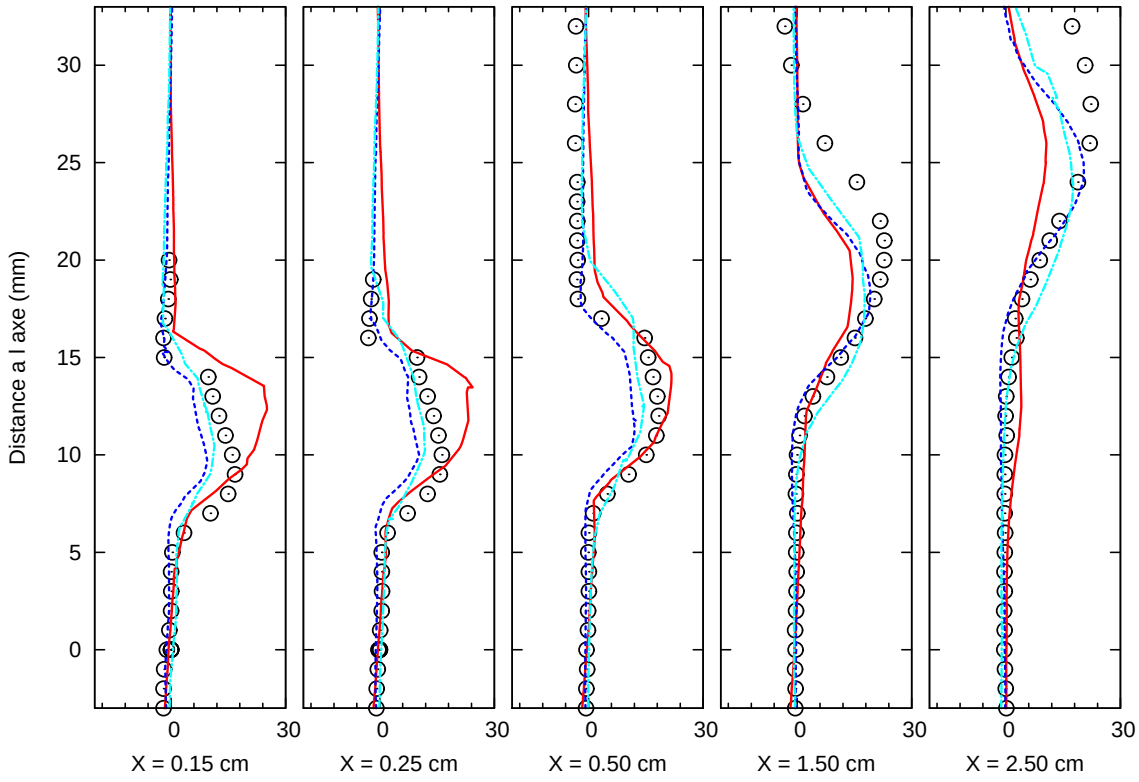

Fig. J.1 – *Profils de $\widetilde{V}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondant aux cas FPI1 (continu rouge), FPI3 (tirets bleus) et TFLES (pointillés cyan). Les symboles représentent l'expérience à richesse 0,75.*

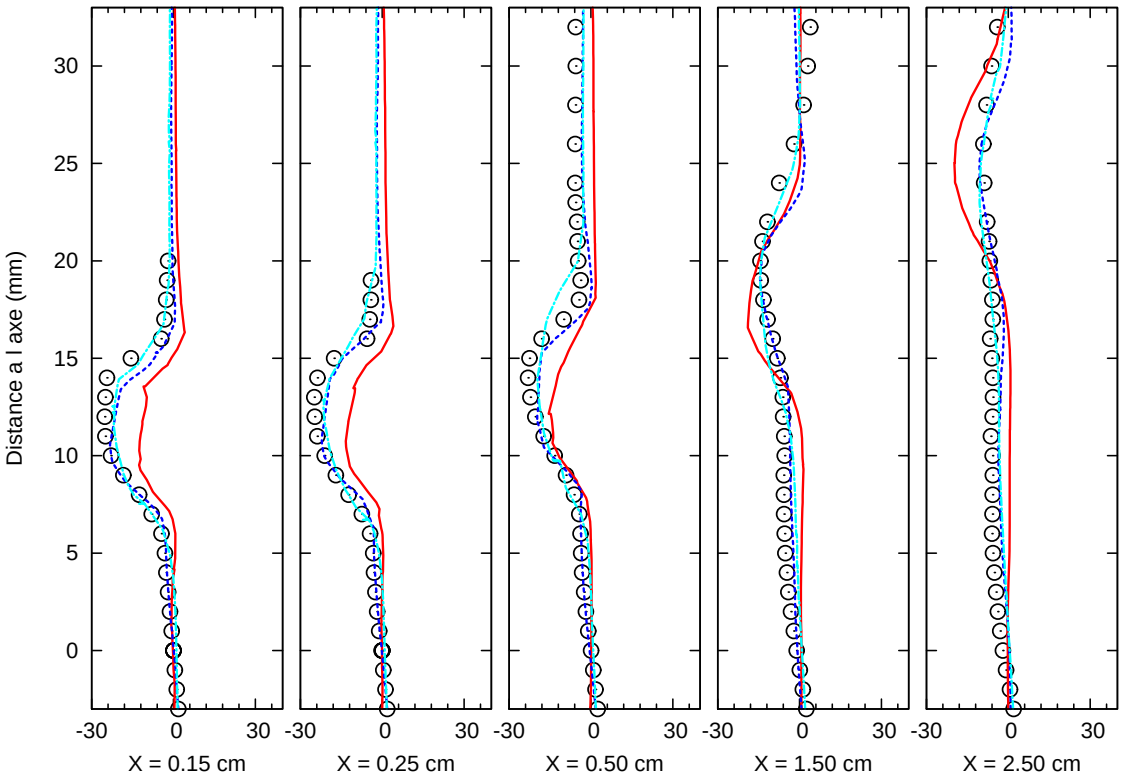

FIG. J.2 – *Profils de $\widetilde{W}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondant aux cas FPI1 (continu rouge), FPI3 (tirets bleus) et TFLES (pointillés cyan). Les symboles représentent l'expérience à richesse 0,75.*

J.2 Comparaisons des cas FPI1 et FPI2 : influence de la constante du modèle de variance

J.3 Comparaisons des cas FPI1 et FPI3 : sensibilité au maillage

J.4 Comparaisons des cas FPI3, ARRH et TFLES : influence du modèle de combustion

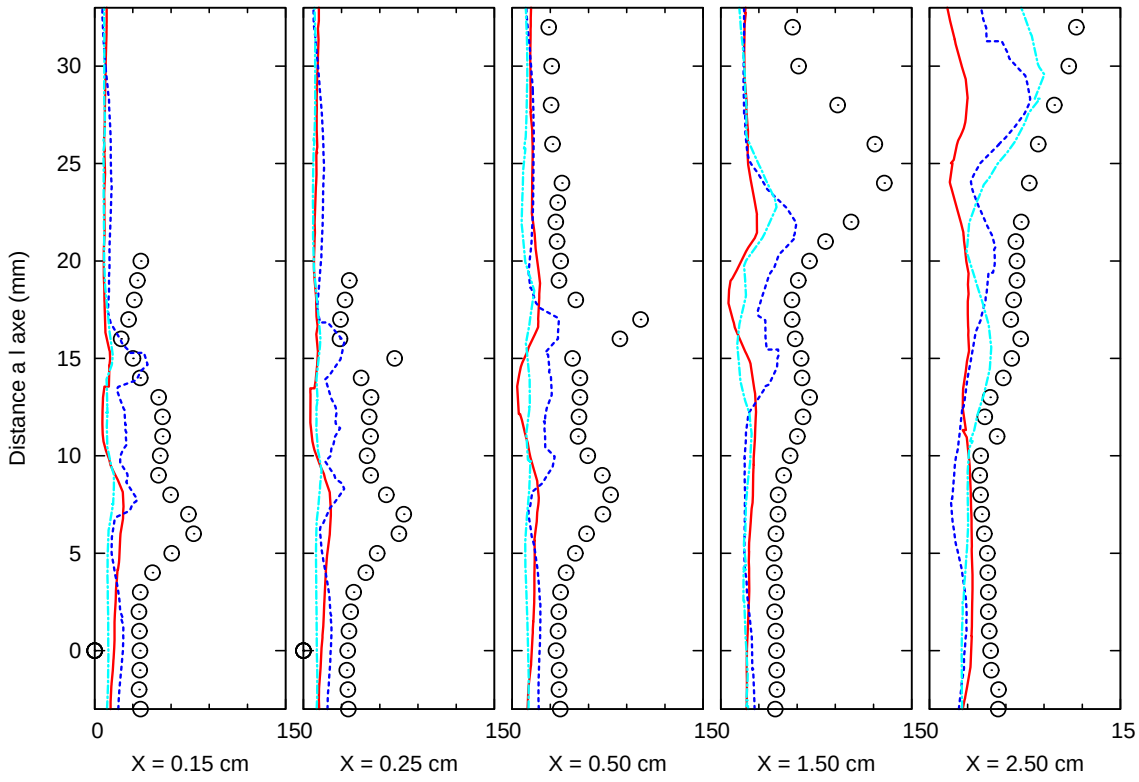

FIG. J.3 – *Profils de V''_{RMS} à travers la chambre PRECCINSTA correspondant aux cas FPI1 (continu rouge), FPI3 (tirets bleus) et TFLES (pointillés cyan). Les symboles représentent l'expérience à richesse 0,75.*

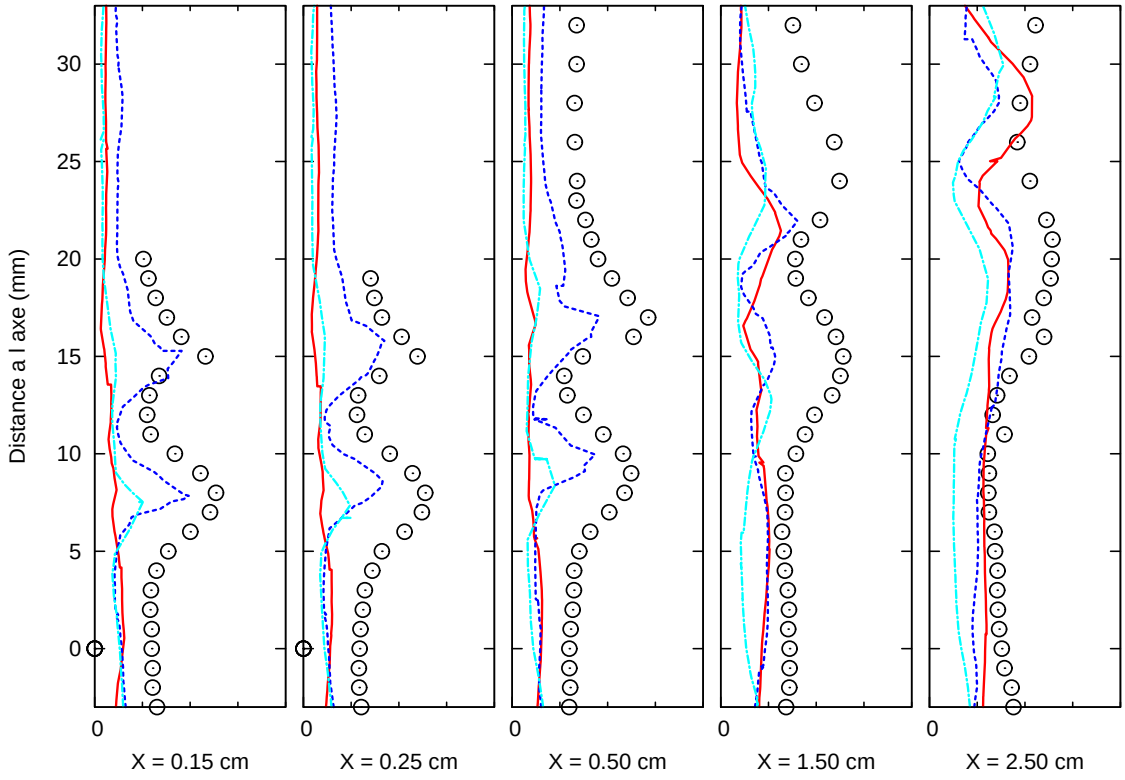

FIG. J.4 – *Profils de W''_{RMS} à travers la chambre PRECCINSTA correspondant aux cas FPI1 (continu rouge), FPI3 (tirets bleus) et TFLES (pointillés cyan). Les symboles représentent l'expérience à richesse 0,75.*

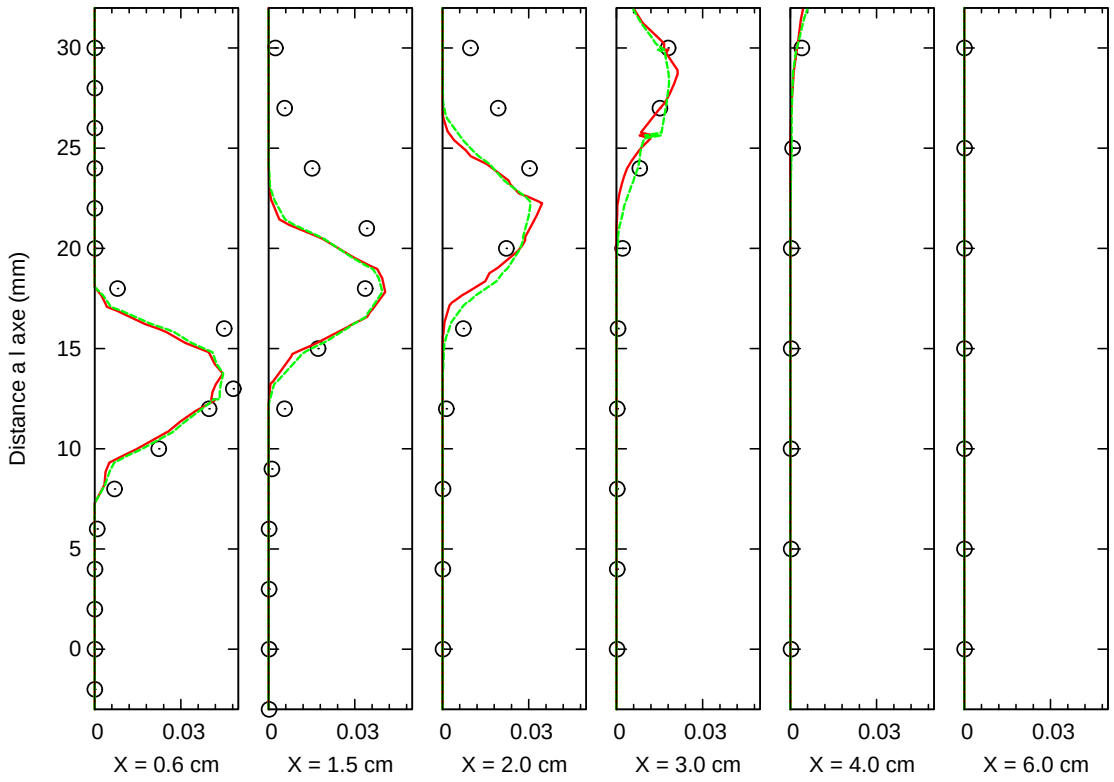

FIG. J.5 – *Profils de $\widetilde{CH_4}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondants aux cas FPI1 (continu rouge) et FPI2 (tirets verts). Les symboles représentent l'expérience.*

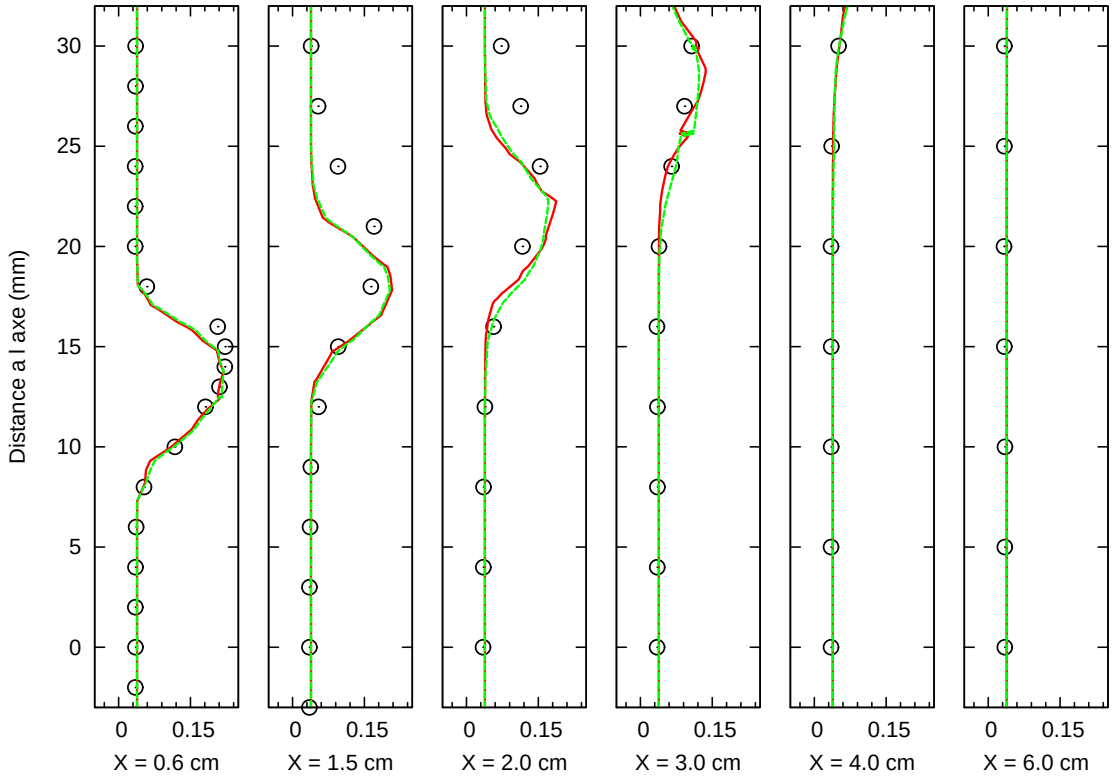

FIG. J.6 – *Profils de $\widetilde{Y_{O_2}}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondants aux cas FPI1 (continu rouge) et FPI2 (tirets verts). Les symboles représentent l'expérience.*

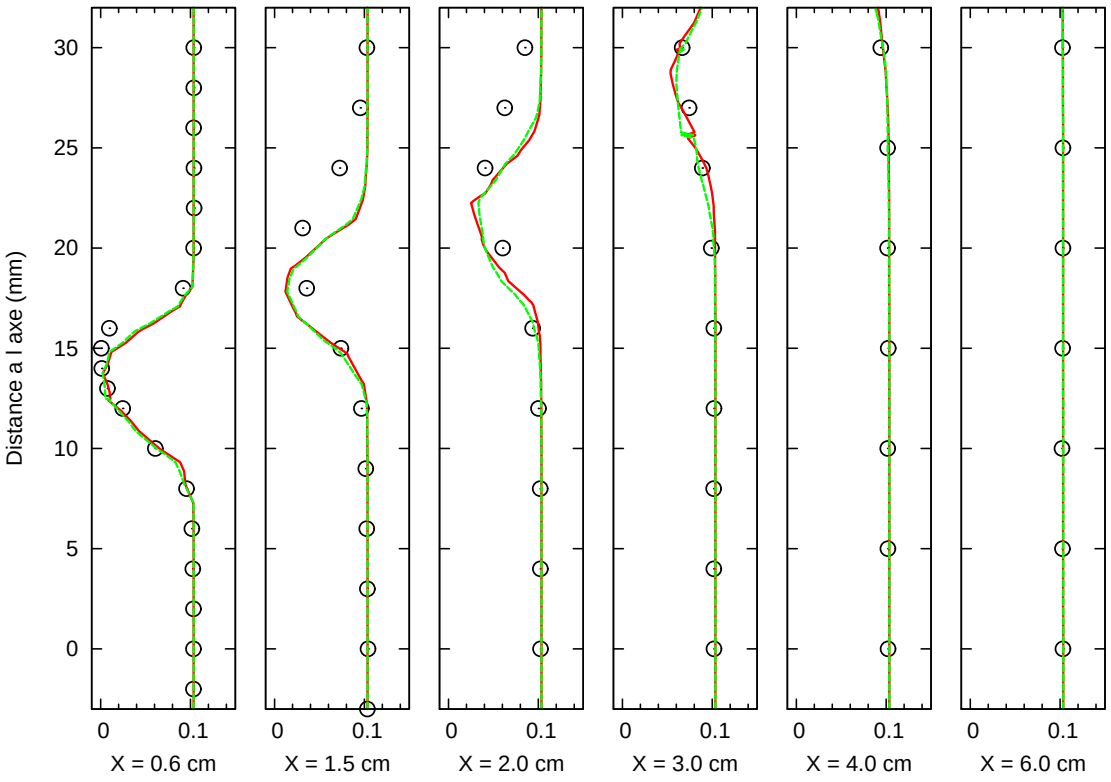

FIG. J.7 – *Profils de $\widetilde{Y_{H_2O}}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondants aux cas FPI1 (continu rouge) et FPI2 (tirets verts). Les symboles représentent l'expérience.*

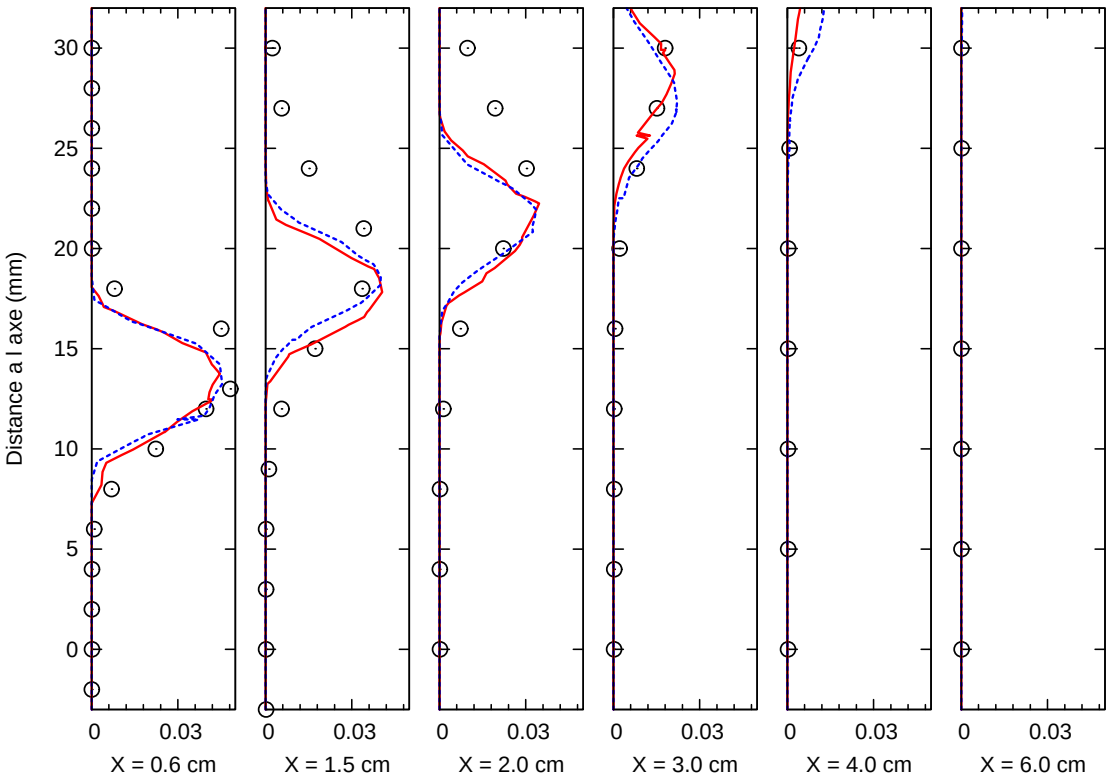

FIG. J.8 – *Profils de $\widetilde{CH_4}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondants aux cas FPI1 (continu rouge) et FPI3 (pointillés bleus). Les symboles représentent l'expérience.*

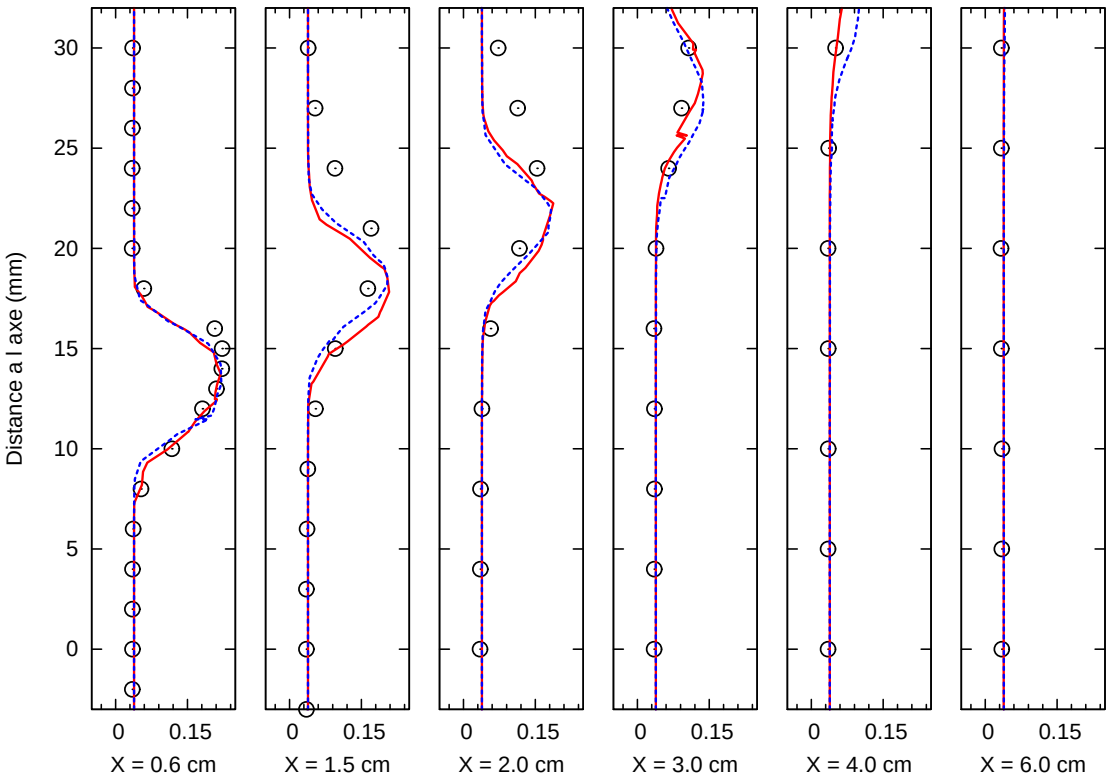

FIG. J.9 – *Profils de $\widetilde{Y_{O_2}}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondants aux cas FPI1 (continu rouge) et FPI3 (pointillés bleus). Les symboles représentent l'expérience.*

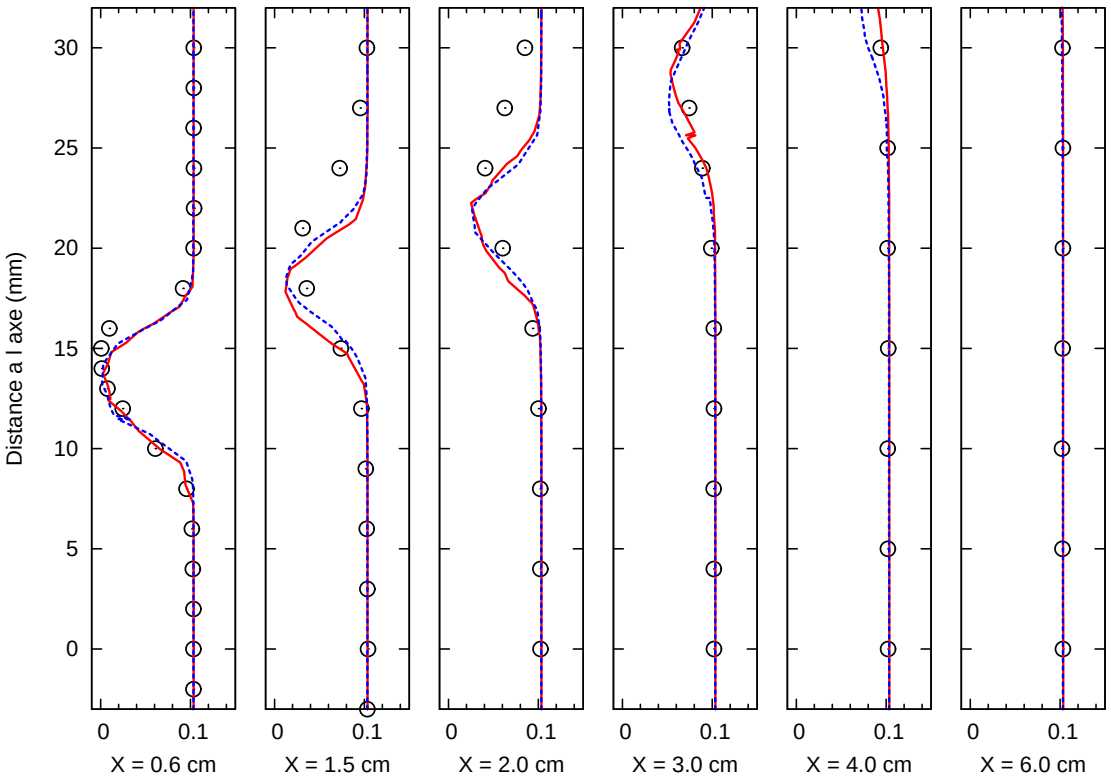

FIG. J.10 – *Profils de $\widetilde{Y_{H_2O}}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondants aux cas FPI1 (continu rouge) et FPI3 (pointillés bleus). Les symboles représentent l'expérience.*

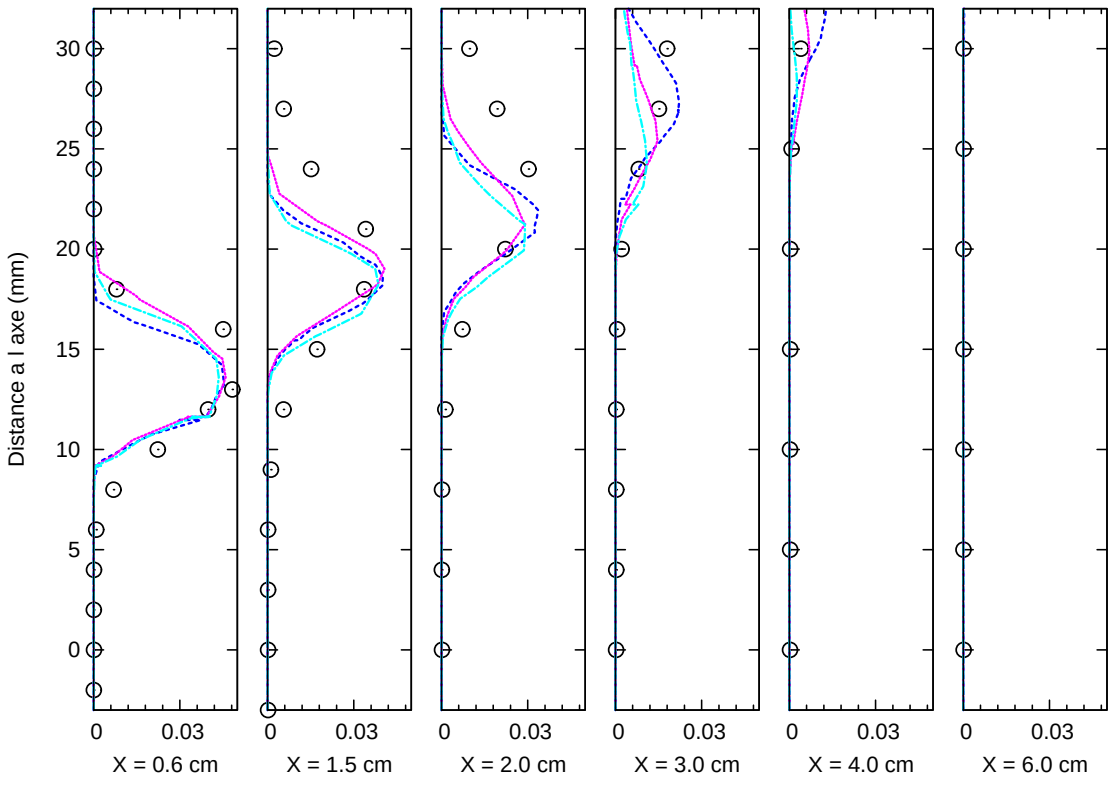

FIG. J.11 – *Profils de $\widetilde{CH_4}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondants aux cas FPI3 (pointillés bleus), ARRH (continu rose) et TFLES (tirets cyans). Les symboles représentent l'expérience.*

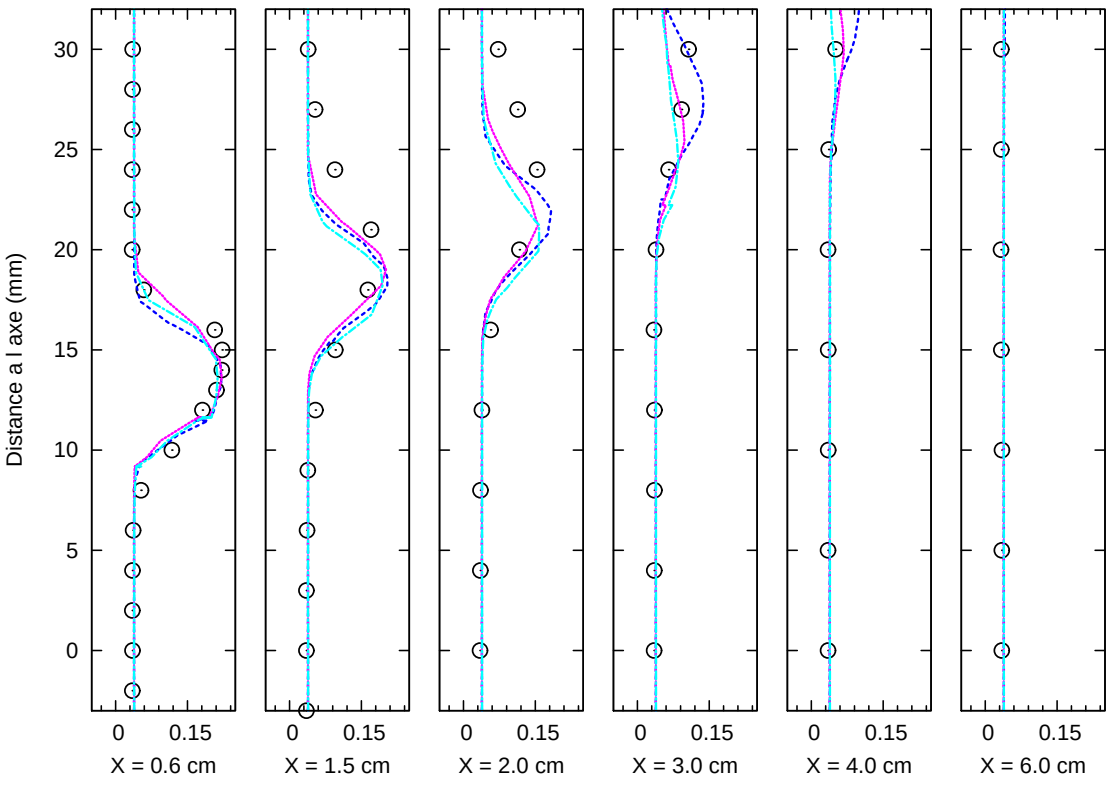

FIG. J.12 – *Profils de $\widetilde{Y_{O_2}}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondants aux cas FPI3 (pointillés bleus), ARRH (continu rose) et TFLES (tirets cyans). Les symboles représentent l'expérience.*

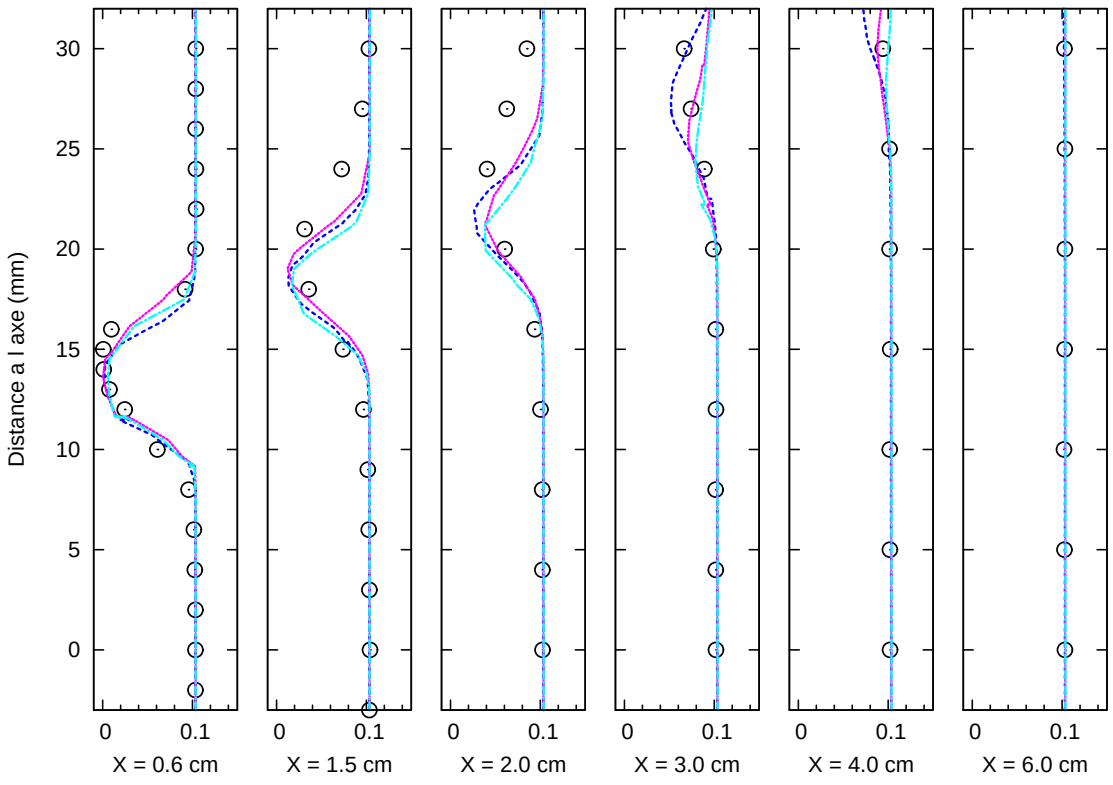

FIG. J.13 – *Profils de $\widetilde{Y_{H_2O}}$ à travers la chambre PRECCINSTA correspondants aux cas FPI3 (pointillés bleus), ARRH (continu rose) et TFLES (tirets cyans). Les symboles représentent l'expérience.*

Bibliographie

[1] CEDRE 3.1. Manuel utilisateur, 2007.

[2] Emissions dans l'air en France métropole : Substances relatives à l'accroissement de l'effet de serre. http ://www.citepa.org, 2009.

[3] Emissions dans l'air en France métropole : Substances relatives à l'acidification, l'eutrophisation et à la pollution photochimique. http ://www.citepa.org, 2009.

[4] R.G. Abdel-Gayed, D. Bradley, M.N. Hamid, and M. Lawes. Lewis number effects on turbulent burning velocity. In *Proceedings of the 20th International Symposium on Combustion*, volume 20, pages 505–512, 1984.

[5] R.G. Abdel-Gayed, D. Bradley, and F.K.-K. Lung. Combustion regimes and the straining of turbulent premixed flames. *Combustion and Flame*, 76 :213–218, 1989.

[6] G. Albouze. *Simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs non prémélangés*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009.

[7] C. Aubry and J. Villermaux. Représentation du mélange imparfait de deux courants de réactifs dans un réacteur agité continu. *Chemical Engineering Science*, 1975.

[8] P. Bailly, D. Carréton, O. Simonin, P. Bruel, M. Champion, B. Deshaies, S. Duplatnier, and S. Sanquer. Experimental and numerical study of a premixed flame stabilized by a rectangular section cylinder. In *Proceedings of the 26th International Symposium on Combustion*, volume 26, pages 923–929, 1996.

[9] A. El bakali, L. Pillier, P. Desgroux, B. Lefort, L. Gasnot, J.F. Pauwels, and I. da Costa. NO prediction in natural gas flames using GDF-Kin 3.0 mechanism NCN and HCN contribution to prompt-NO formation. *Fuel*, 85 :896–909, 2006.

[10] M. Baum, T.J. Poinsot, and D. Thévenin. Accurate boundary conditions for multi component reactive flows. *Journal of Computational Physics*, 176 :247–261, 1994.

[11] N. Bertier. *Simulation des grandes échelles en aérothermiques sur des maillages non-structurés généraux*. PhD thesis, Université Paris VI - Pierre et Marie Curie, 2006.

[12] N. Bertier. Simulations numériques de la chambre PRECCINSTA/Labscale avec le code CEDRE. Technical Report RT 1/14450 DMAE/DEFA, ONERA, 2009.

[13] F. Biagioli and F. Güthe. Effect of pressure and fuel-air unmixdness on NOx emissions from industrial gas turbine burners. *Combustion and Flame*, 151 :274–288, 2007.

[14] R.W. Bilger, S.H. Starner, and R.J. Kee. On reduced mechanisms for methane/air combustion in non-premixed flames. *Combustion and Flame*, 80 :135–149, 1990.

[15] G. Billet, V. Giovangigli, and G. de Gassowski. Impact of volume viscosity on a shock-hydrogen-bubble interaction. *Combustion Theory and Modelling*, 12 :221–248, 2008.

[16] T. Blasenbrey, D. Schmidt, and U. Maas. Automatically simplified chemical kinetics and molecular transport and its applications in premixed and non-premixed laminar flame calculations. In *Proceedings of the 27th International Symposium on Combustion*, pages 506–511, 1998.

[17] M. Boger, D. Veynante, H. Boughanem, and A. Trouvé. Direct numerical simulation analysis of the flame surface density concept for large eddy simulation of turbulent premixed combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 27 :917, 1998.

[18] H. Bongers and L.P.H. De Goey. The effect of simplified transport modeling on the burning velocity of laminar premixed flames. *Combustion Science and Technology*, 175 :1915–1928, 2003.

[19] R. Borghi. Mise au point sur la structure des flammes turbulentes. *Journal de Chimie Physique*, 81 :361–370, 1984.

[20] R. Borghi and M. Destriau. *Combustion and flame : chemical and physical principles*. Editions Technip, 1998.

[21] G. Boudier, L.Y.M. Gicquel, and T.J. Poinsot. Effects of mesh resolution on large eddy simulation of reacting flows in complex geometry combustors. *Combustion and Flame*, 155 :196–214, 2008.

[22] C.T. Bowman. Kinetic of pollutant formation and destruction in combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 1 :33–45, 1975.

[23] C.T. Bowman, R.K. Hanson, D.F. Davidson, W.C. Gardiner Jr., V. Lissianski, G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, and M. Goldenberg. GRI Mech Release 2.11. http ://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, 1995.

[24] J.W. Bozzelli and A.M. Dean. O+NNH : A possible new route for NOx formation in flames. *International Journal of Chemical Kinetics*, 27 :1097–1109, 1995.

[25] D. Bradley, P.H. Gaskell, and X.J. Gu. Burning velocities, markstein lengths, and flame quenching for spherical methane-air flames : A computational study. *Combustion and Flame*, 104 :176–198, 1996.

[26] D. Bradley, P.H. Gaskell, X.J. Gu, M. Lawes, and M.J. Scott. Premixed turbulent flame instability and NO formation in a lean-burn swirl burner. *Combustion and Flame*, 115 :515–538, 1998.

[27] D. Bradley, L.K. Kwa, A.K.C Lau, M. Missaghi, and S.B. Chin. Laminar flamelet modeling of recirculating premixed methane and propane air combustion. *Combustion and Flame*, 71 :109–122, 1988.

[28] K.N.C. Bray. Studies of the turbulent burning velocity. In *Proceedings of the Royal Society London A*, pages 315–335, 1990.

[29] K.N.C. Bray. The challenge of turbulent combustion. In *Proceedings of the 26th International Symposium on Combustion*, volume 26, pages 1–26, 1996.

[30] K.N.C. Bray, M. Champion, and P. Libby. The interaction between turbulence and chemistry in premixed turbulent flames. In *Lecture notes in engineering*, pages 541–563. Springer Verlag, 1989.

[31] K.N.C. Bray, M. Champion, P.A. Libby, and N. Swaminathan. Finite rate chemistry and presumed PDF models for premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 146 :665–673, 2006.

[32] K.N.C. Bray, P. Domingo, and L. Vervisch. Role of the progress variable in models for partially premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 141 :431–437, 2005.

[33] K.N.C. Bray and P. Libby. Passage times and flamelet crossing frequencies in premixed turbulent combustion. *Combustion Science and Technology*, 47 :253, 1986.

[34] K.N.C. Bray and J.B. Moss. A unified statistical model for the premixed turbulent flame. *Acta Astronautica*, 4 :291–319, 1977.

[35] A. Burcat and B. McBride. Ideal gas thermodynamic data for combustion and air pollution use. Technical Report No. 804, Technion Aerospace Engineering, 1997.

[36] V. Bykov and U. Maas. The extension of the ILDM concept to reaction-diffusion manifolds. *Combustion Theory and Modelling*, 6 :839–862, 2007.

[37] V. Bykov and U. Maas. Extension of the ILDM method to the domain of slow chemistry. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :465–472, 2007.

[38] B. Bédat, F.N. Egolfopoulos, and T. Poinsot. Direct numerical simulation of heat release and NOx formation in turbulent nonpremixed flames. *Combustion and Flame*, 119 :69–83, 1999.

[39] P. Caillau. *Modélisation et simulation de la combustion turbulente par une approche probabiliste eulérienne-lagrangienne*. PhD thesis, Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales, 1994.

[40] S. Candel and T. Poinsot. Flame stretch and the balance equation for the flame area. *Combustion Science and Technology*, 70 :1–15, 1990.

[41] S.M. Cannon, B.S. Brewster, and L.D. Smoot. PDF modeling of lean premixed combustion using in situ tabulated chemistry. *Combustion and Flame*, 119 :233–252, 1999.

[42] F. Charlette, C. Meneveau, and D. Veynante. A power-law flame wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion, part II : Dynamic formulation (2/2). *Combustion and Flame*, 131 :181–197, 2002.

[43] C.-P. Chou, J.-Y. Chen, C.G. Yam, and K.D. Marx. Numerical modeling of NO formation in laminar bunsen flames - a flamelet approach. *Combustion and Flame*, 114 :420–435, 1998.

[44] S.H. Chung and C.K. Law. An integral analysis of the structure and propagation of stretched premixed flames. *Combustion and Flame*, 72 :325–336, 1988.

[45] P. Clavin and G. Joulin. Premixed flames in large scale and high intensity turbulent flow. *Journal de Physique Lettres*, 44 :1–12, 1983.

[46] P. Clavin and F.A. Williams. Effects of molecular diffusion and of thermal expansion on the structure and dynamics of premixed flames in turbulent flows of large scale and low intensity. *Journal of Fluid Mechanics*, 116 :251–282, 1982.

[47] T.P. Coffee and J.M. Heimerl. Transport algorithms for premixed, laminar steady state flames. *Combustion and Flame*, 43 :273–289, 1981.

[48] T.P. Coffee and J.M. Heimerl. Transport algorithms for methane flames. *Combustion Science and Technology*, 34 :31–43, 1983.

[49] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinsot. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed turbulent combustion. *Physics of Fluids*, 12 :1843–1863, 2000.

[50] O. Colin, C. Pera, and S. Jay. Detailed chemistry tabulation based on a FPI approach adapted and applied to 3-D internal combustion engine calculations. In *Proceedings of the 3rd European Combustion Meeting*, 2007.

[51] P.J. Colucci, F.A. Jaberi, P. Givi, and S.B. Pope. Filtered density function for large eddy simulation of turbulent reacting flows. *Physics of Fluids*, 10 :499–515, 1998.

[52] S.M. Correa. A direct comparison of pair-exchange and IEM models in premixed combustion. *Combustion and Flame*, 103 :194–206, 1995.

[53] B. Cuenot and T. Poinsot. Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames. implications for turbulent diffusion flames. In *Proceedings of the 25th International Symposium on Combustion*, volume 25, pages 1383–1390, 1994.

[54] R.L. Curl. Dispersed phase mixing : 1. theory and effects in simple reactors. *Aiche Journal*, 9 :175–181, 1963.

[55] J.W. Dold. Flame propagation in a non uniform mixture : analysis of a slowly-varying triple flame. *Combustion and Flame*, 76 :71–88, 1989.

[56] P. Domingo, L. Vervisch, S. Payet, and R. Hauguel. DNS of a premixed turbulent V-flame and LES of a ducted flame using a FSD-PDF subgrid scale closure with FPI tabulated chemistry. *Combustion and Flame*, 143 :566–586, 2005.

[57] P. Domingo, L. Vervisch, and D. Veynante. Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow. *Combustion and Flame*, 152 :415–432, 2008.

[58] C. Dopazo. Recent developments in PDF methods. In P.A. Libby and F.A. Williams, editors, *Turbulent reacting flows*, pages 375–474. Academic Press, New York, 1994.

[59] C. Dopazo and E.E. O'Brien. A probabilistic appproach to the autoignition of reacting turbulent mixtures. *Acta Astronautica*, 1974.

[60] M.C. Drake and R.J. Blint. Relative importance of nitric oxide formation mechanisms in laminar opposed-flow diffusion flames. *Combustion and Flame*, 83 :185–203, 1991.

[61] M.C. Drake, S.M. Correa, R.W. Pitz, W. Shyy, and C.P. Fenimore. Superequilibrium and thermal nitric oxide formation in turbulent diffusion flames. *Combustion and Flame*, 69 :347–365, 1987.

[62] J.F. Driscoll, R.-H. Chen, and Y. Yoon. Nitric oxide levels of turbulent jet diffusion flames : effects of residence time and dämkohler number. *Combustion and Flame*, 88 :37–49, 1992.

[63] M. Dusing, A. Sadiki, and J. Janicka. Towards a classification of models for the numerical simulation of premixed combustion using a generalized regime diagram. *Combustion Theory and Modelling*, 10, 2006.

[64] D. Dutoya. Modélisation de la turbulence au voisinage des parois : étude numérique des performances de différents modèles. Technical Report RT 48/3473 EY, ONERA, 1992.

[65] T. Echekki. A quasi-one-dimensional premixed flame model with cross-stream diffusion. *Combustion and Flame*, 110 :335–350, 1997.

[66] T. Echekki and J.H. Chen. Analysis of the contribution of curvature to premixed flame propagation. *Combustion and Flame*, 118 :308–311, 1999.

[67] R.L.G.M. Eggels and L.P.H. De Goey. Mathematically reduced reaction mechanisms applied to adiabatic flat hydrogen/air flames. *Combustion and Flame*, 100 :559–570, 1995.

[68] R.L.G.M. Eggels and L.P.H. De Goey. Post-processing method for predicting NO formation in one and two-dimensional premixed methane-air flames. *Combustion and Flame*, 107 :65–68, 1996.

[69] M. Embouazza, O. Gicquel, and N. Darabiha. Modelling auto-ignition of HCCI engine by reduced tabulated chemistry. In *Proceedings of the 3rd Mediterranean Combustion Symposium*, 2003.

[70] A. Ern and V. Giovangigli. Thermal diffusion effects in hydrogen-air and methane-air flames. *Combustion Theory and Modeling*, 2 :349–372, 1998.

[71] A. Ern and V. Giovangigli. Impact of detailed multicomponent transport on planar and counterflow hydrogen/air and methane/air flames. *Combustion Science and Technology*, 149 :157–181, 1999.

[72] V. Eswaran and S.B. Pope. Direct numerical simulations of the turbulent mixing of a passive scalar. *Physics of Fluids*, 31 :506, 1988.

[73] C.P. Fenimore. Formation of nitric oxide in premixed hydrocarbon flames. *Proceedings of the International Symposium on Combustion*, 13 :373–380, 1971.

[74] B. Fiorina, R. Baron, O. Gicquel, D. Thévenin, S. Carpentier, and N. Darabiha. Modelling non adiabatic partially premixed flames using flame prolongation of ILDM. *Combustion Théory and Modelling*, 7 :449–470, 2003.

[75] B. Fiorina, O. Gicquel, S. Carpentier, and N. Darabiha. Validation of the FPI chemistry reduction method for diluted non adibatic premixed flames. *Combustion Science and Technology*, 176 :785–797, 2004.

[76] B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, and N. Darabiha. Premixed turbulent combustion modeling using tabulated detailed chemistry and PDF. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :867–874, 2005.

[77] B. Fiorina, R. Vicquelin, P. Auzillon, N. Darabiha, O. Gicquel, and D. Veynante. A filtered tabulated chemistry model for LES of premixed combustion. Combustion and Flame, In Press, 2009.

[78] N. Fueyo, W. Vicente, J. Blasco, and C. Dopazo. Stochastic simulation of NO formation in lean premixed methane flames. *Combustion Science and Technology*, 153 :295–311, 2000.

[79] C. Fureby. A fractal flame wrinkling large eddy simulation model for premixed turbulent combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :593–601, 2005.

[80] C. Fureby. Comparison of flamelet and finite rate chemistry LES for premixed turbulent combustion. In *45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, Nevada, 2006.

[81] C. Fureby. A comparison of flamelet LES models for premixed turbulent combustion. In *44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, Nevada, 2006.

[82] L. Vervisch G. Lodato, P. Domingo. Three-dimensional boundary conditions for direct and large eddy simulation of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 227 :5105–5143, 2008.

[83] J. Galpin. *Modélisation LES de la combustion avec une prise en compte des effets de cinétique détaillée et en perspective d'application moteur*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, 2007.

[84] J. Galpin, A. Naudin, L. Vervisch, C. Angelberger, O. Gicquel, and P. Domingo. Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burner. *Combustion and Flame*, 155 :247–266, 2008.

[85] F. Gao and E.E. O'Brien. A large eddy simulation scheme for turbulent reacting flows. *Physics of Fluid A*, 5 :1282–1284, 1993.

[86] P. Gerlinger, H. Möbus, and D. Brüggemann. An implicit multigrid method for turbulent combustion. *Journal of Computational Physics*, 167 :247–276, 2001.

[87] F. Ghirelli and B. Leckner. Transport equation for the local residence time of a fluid. *Chemical Engineering Science*, 59 :513–523, 2003.

[88] S. Ghosal and L. Vervisch. Theoretical and numerical study of a symmetrical triple flame using parabolic flame path approximation. *Journal of Fluid Mechanics*, 415 :227–260, 2000.

[89] O. Gicquel. *Développement d'une nouvelle méthode de réduction des schémas cinétiques : application au méthane*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1999.

[90] O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Thévenin. Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :1901–1908, 2000.

[91] O. Gicquel, P. Miquel, V. Quilichini, M. Hilka, D. Thévenin, and N. Darabiha. Numerical and experimental study of NO emission in laminar partially premixed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :2419–2425, 2000.

[92] P. Gilbank. *Contribution à la modélisation de la combustion turbulente dans le cas d'une stabilisation par accroche flamme*. PhD thesis, Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales, 1989.

[93] V. Giovangigli. *Multicomponent flow modelling*. Birkhäuser Editions, 1st edition, 1999.

[94] V. Giovangigli and M.D. Smooke. Extinction of strained premixed laminar flames with complex chemistry. *Combustion Science and Technology*, 53 :23–49, 1987.

[95] V. Giovangigli and M.D. Smooke. Adaptive continuation algorithms with application to combustion problems. *Applied Numerical Mathematics*, 5 :305–331, 1989.

[96] S.S. Girimaji. Assumed β-PDF model for turbulent mixing : validation and extension to multiple scalar mixing. *Combustion Science and Technology*, 78 :177–196, 1991.

[97] P. Glarborg, M.U. Alzueta, K. Dam-Johansen, and J.A. Miller. Kinetic modeling of hydrocarbon/nitric oxide interactions in a flow reactor. *Combustion and Flame*, 115 :1–27, 1998.

[98] P. Glarborg, K. Dam-Johansen, and J.A. Miller. The reaction of ammonia with nitrogen dioxide in a flow reactor : implications for the NH2 + NO2 reaction. *International Journal of Chemical Kinetics*, 27 :1207–1220, 1995.

[99] P. Glarborg, N.L. Lilleheie, S. Byggstoyl, B.F. Magnussen, P. Kilpinen, and M. Hupa. A reduced mechanism for nitrogen chemistry in methane combustion. In *Proceedings of the 24th International Symposium on Combustion*, volume 24, page 889, 1992.

[100] G. Godel, P. Domingo, and L. Vervisch. Tabulation of NOx chemistry for large-eddy simulation of non-premixed turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :1555–1561, 2009.

[101] L.P.H. De Goey and R.M.M. Mallens. An evaluation of different contributions to flame stretch for stationary premixed flames. *Combustion and Flame*, 110 :54–66, 1997.

[102] L.P.H. De Goey and J.H.M. ten Thije Boonkkamp. A flamelet description of premixed laminar flames and the relation with flame stretch. *Combustion and Flame*, 119 :253–271, 1999.

[103] R.K. Hanson and S. Salimian. *Combustion chemistry*. Springer Verlag, New-York, 1984.

[104] E.R. Hawkes and R.S. Cant. Implications of a flame surface density approach to large eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 126 :1617–1629, 2001.

[105] E.R. Hawkes and J.H. Chen. Direct numerical simulation of hydrogen-enriched lean premixed methane-air flames. *Combustion and Flame*, 138 :242–258, 2004.

[106] E.R. Hawkes and J.H. Chen. Comparison of direct numerical simulation of lean premixed methane-air flames with strained laminar flame calculations. *Combustion and Flame*, 144 :112–125, 2006.

[107] J.C. Hewson and M. Bollig. Reduced mechanisms for NOx emissions from hydrocarbon diffusion flames. In *Proceedings of the 26th International Symposium on Combustion*, volume 26, pages 2171–2179, 1996.

[108] J.C. Hewson and F.A. Williams. Rate-ratio asymptotic analysis of methane-air diffusion flame structure for predicting production of oxides of nitrogen. *Combustion and Flame*, 117 :441–476, 1999.

[109] R. Hilbert, F. Tap, H. El Rabii, and D. Thévenin. Impact of detailed chemistry and transport models on turbulent combustion simulations. *Progress in Energy and Combustion Science*, 30 :61–117, 2004.

[110] S.C. Hill and L.D. Smoot. Modeling of nitrogen oxides formation and destruction in combustion systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26 :417–458, 2000.

[111] J.O. Hirschfelder and C.F. Curtiss. Transport properties of multicomponent gas mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 17 :550–555, 1949.

[112] Y. Huang and V. Yang. Effect of swirl on combustion dynamics in a lean-premixed swirl-stabilized combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :1775–1782, 2005.

[113] M. Ihme and H. Pitsch. Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent nonpremixed flames using a flamelet/progress variable formulation. *Physics of Fluids*, 20, 2008.

[114] T. Ishii, C. Zhang, and S. Sugiyama. On the extinction limit and flammability limit of non-adiabatic stretched methane-air premixed flames. *Journal of Fluid Mechanics*, 342 :315–334, 1997.

[115] T. Ishii, C. Zhang, and S. Sugiyama. Effects of NO models on the prediction of NO formation in a regenerative furnace. *Journal of Energy Resources Technology*, 122 :224, 2000.

[116] R.J. Kee, J.F. Grcar, M.D. Smooke, and J.A. Miller. A fortran program for modelling steady laminar one dimensional premixed flames. Technical Report SAND85-8240, Sandia Report, 1985.

[117] N.I. Kim, J.I. Seo, K.C. Oh, and H.D. Shin. Lift-off characteristics of triple flame with concentration gradient. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :367–374, 2005.

[118] P.N. Kioni, B. Rogg, K.N.C. Bray, and A. Linan. Flame spread in laminar mixing layers : the triple flame. *Combustion and Flame*, 95 :276–290, 1993.

[119] M.S. Klassen, D.D. Thomsen, J.R. Reisel, and N.M. Laurendeau. Laser-induced fluorescence measurements of nitric oxide formation in high-pressure premixed methane flames. *Combustion Science and Technology*, 110 :229–248, 1995.

[120] A.A. Konnov. Detailed reaction mechanism for small hydrocarbons combustion. release 0.5. http ://homepages.vub.ac.be/ akonnov/, 2000.

[121] A.A Konnov and I.V. Dyakov. Nitrous oxide conversion in laminar premixed flames of CH4+O2+Ar. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :319–326, 2009.

[122] S.H. Lam and D.A. Goussis. Understanding complex chemical kinetics with computational singular perturbation. In *Proceedings of the 22nd International Symposium on Combustion*, pages 931–941, University of Washington and Seattle and Washington, 1988.

[123] S.H. Lam and D.A. Goussis. The csp method for simplifying kinetics. *International Journal of Chemical Kinetics*, 26 :461–486, 1994.

[124] N. Lamoureux, S. Canneaux, A. El Bakali, F. Louis, J.F. Pauwels, and P. Desgroux. Numerical and experimental study of NCN mechanism : Contribution to prompt-NO formation. In *Proceedings of the 4th European Combustion Meeting*, 2009.

[125] T. Landenfeld, A. Sadiki, and J. Janicka. A turbulence-chemistry interaction model based on multivariate presumed β-PDF method for turbulent flames. *Flow, Turbulence and Combustion*, 68, 2002.

[126] G. Lartigue. *Simulation des grandes échelles et instabilités de combustion*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2005.

[127] C.K. Law, D.L. Zhu, and G. Yu. Propagation and extinction of stretched premixed flames. In *Proceedings of the 21st International Symposium on Combustion*, page 1419, 1986.

[128] S.C. Li, F.A. Williams, and K. Gebert. A simplified fundamentally based method for calculating NOx emissions in lean premixed combustors. *Combustion and Flame*, 119 :367–373, 1999.

[129] F. Liu, H. Guo, G.J. Smallwood, O.L. Gulder, and M.D. Matovic. A robust and accurate algorithm of the β-PDF integration and its application to turbulent methane-air diffusion combustion in a gas turbine combustor simulator. *International Journal of Thermal Sciences*, 41 :763–772, 2002.

[130] T. Lovas, D. Nilsson, and F. Mauss. Automatic reduction procedure for chemical mechanisms applied to premixed methane/air flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :1809–1815, 2000.

[131] U. Maas and S.B. Pope. Simplifying chemical kinetics : Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combustion and Flame*, 88 :239–264, 1992.

[132] U. Maas and S.B. Pope. Calculations using simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds. In *Proceedings of the 25th International Symposium on Combustion*, pages 1349–1356, 1994.

[133] H.P. Mallampalli, T.H. Fletcher, and J.-Y. Chen. Evaluation of CH4/NOx reduced mecahnisms used for modeling lean premixed turbulent combustion of natural gas. *Journal of Engineering in Gas Turbines and Power*, 20 :703–712, 1998.

[134] T. Mantel and R. Borghi. A new model of premixed wrinkled flame propagation based on a scalar dissipation equation. *Combustion and Flame*, 96 :443–457, 1994.

[135] C.E. Martin. *Etude énergétique des instabilités thermo-acoustiques et optimisation génétique des cinétiques réduites*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2005.

[136] M. Matalon. On flame stretch. *Combustion Science and Technology*, 31 :169, 1983.

[137] M. Matalon and B.J. Matkovsky. Flames as gasdynamic discontinuities. *Journal of Fluid Mechanics*, 124 :239–259, 1982.

[138] B.J. McBride, S. Gordon, and M.A. Reno. Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species. Technical Report TM-4513, NASA Report, 1993.

[139] W. Meier, P. Weigand, X.R. Duan, and R. Giezendanner-Thoben. Detailed characterization of the dynamics of thermoacoustic pulsations in a lean premixed swirl flame. *Combustion and Flame*, 150 :2–26, 2007.

[140] C. Meneveau and T. Poinsot. Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 86 :311, 1991.

[141] J.A. Miller and C.T. Bowman. Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 15 :287–338, 1989.

[142] M. Missaghi, M. Pourkashanian, A. Williams, and L. Yap. The prediction of NO emission from an industrial burner. In *Proceedings of American Flame Days Conference*, 1990.

[143] P. Moreau, J. Labbé, F. Dupoirieux, and R. Borghi. Experimental and numerical study of a turbulent recirculation zone with combustion. In *Proceedings of the 5th Symposium on Turbulent Shear Flow*, Ithaca, New-York, USA, 1985.

[144] L.V. Moskaleva and M.C. Lin. The spin-conserved reaction CH+N2 → H+NCN : A major pathway to prompt NO studied by quantum/statistical theory calculations and kinetic modeling of rate constant. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :2393–2401, 2000.

[145] V. Moureau, B. Fiorina, and H. Pitsch. A level set formulation for premixed combustion LES considering the turbulent flame structure. *Combustion and Flame*, 156 :801–812, 2009.

[146] V. Moureau, P. Minot, H. Pitsch, and C. Bérat. A ghost-fluid method for large-eddy simulations of premixed combustion in complex geometries. *Combustion and Flame*, 156 :801–812, 2009.

[147] L. Muniz and M.G. Mungal. Instantaneous flame-stabilization velocities in lifted jet diffusion flames. *Combustion and Flame*, 111 :16–31, 1997.

[148] J. Nafe and U. Maas. Modeling NO formation based on ILDM reduced chemistry. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :1379–1385, 2002.

[149] S.P. Nandula, R.W. Pitz, R.S. Barlow, and G.J. Fiechtner. Rayleigh-Raman-LIF measurments in a turbulent lean premixed combustor. In *34th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno, Nevada, USA, 1996.

[150] S.P. Nandula, R.W. Pitz, R.S. Barlow, and G.J. Fiechtner. Rayleigh-Raman-LIF measurments in a turbulent lean premixed combustor. In *Advanced turbine systems annual program review*, Morgantown, WVA, USA, 1996.

[151] S. Narayan and S. Rajan. Superequilibrium O concentrations and prompt NO formation in laminar premixed methane-air flames. *Combustion Science and Technology*, 139 :159–171, 1998.

[152] M. Nau, W. Neef, U. Maas, E. Gutheil, and J. Warnatz. Computational and experimental investigation of a turbulent non-premixed methane flame. In *Proceedings of the 26th International Symposium on Combustion*, pages 83–89, 1996.

[153] P.D. Nguyen and P. Bruel. Turbulent reacting flow in a dump combustor - experimental determination of the influence of an inlet equivalence ratio difference on the contribution of the coherent and sotchastic motions to the velocity field dynamics. In *41st AIAA Aerospace Science Meeting and Exhibit*, Renon, Nevada, USA, 2003.

[154] P. Nilsson and X.S. Bai. Effects of flame stretch and wrinkling on CO formation in turbulent premixed combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :1873–1879, 2002.

[155] J.A. Van Oijen. *Flamelet-generated manifolds : development and application to premixed laminar flames*. PhD thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 2002.

[156] J.A. Van Oijen, R.J.M. Bastiaans, and L.P.H. De Goey. Low-dimensional manifolds in direct numerical simulations of premixed turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :1377–1384, 2007.

[157] J.A. Van Oijen and L.P.H. De Goey. Modelling of premixed counterflow flames using the flamelet-generated manifold method. *Combustion Theory and Modelling*, 6 :463–478, 2002.

[158] J.A. Van Oijen and L.P.H. De Goey. A numerical study of confined triple flames using a flamelet generated manifold. *Combustion Theory and Modelling*, 8 :141–163, 2004.

[159] J.A. Van Oijen and L.P.H. De Goey. Predicting NO formation with flamelet generated manifolds. In *Proceedings of the 4th European Combustion Meeting*, Vienna and Austria, 2009.

[160] N. Peters. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 10 :319–339, 1984.

[161] N. Peters. Numerical and asymptotic analysis of systematically reduced reaction schemes for hydrocarbon flames. *Lecture Notes in Physics*, 241 :90–109, 1985.

[162] N. Peters. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. In *Proceedings of the 21st International Symposium on Combustion*, volume 21, pages 1231–1250, 1986.

[163] N. Peters. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 384 :107–132, 1999.

[164] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2000.

[165] N. Peters and B. Rogg. *Lecture Notes in Physics*, chapter Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems. Springer-Verlag, Berlin, 1993.

[166] N. Peters and F.A. Williams. The asymptotic structure of stoichiometric methane-air flames. *Combustion and Flame*, 68 :185–208, 1987.

[167] C.D. Pierce and P. Moin. A dynamic model for subgrid scale variance and dissipation rate of a conserved scalar. *Physics of Fluids*, 10 :3041–3044, 1998.

[168] H. Pitsch. A consistent level set formulation for large-eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 143 :587–598, 2005.

[169] H. Pitsch. Large eddy simulation of turbulent combustion. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 38 :453–482, 2006.

[170] H. Pitsch and L. Duchamp de Lageneste. Large eddy simulation of premixed turbulent combustion using a level set approach. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :2001–2008, 2002.

[171] H. Pitsch and N. Peters. A consistent flamelet formulation for non premixed combustion considering differential diffusion effects. *Combustion and Flame*, 114 :26–40, 1998.

[172] T. Poinsot. Using direct numerical simumation to understand turbulent premixed combustion. In *Proceedings of the 26th International Symposium on Combustion*, volume 26, pages 219–232, 1996.

[173] T. Poinsot and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 101 :104–129, 1992.

[174] T. Poinsot and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion.* R.T. Edwards Editions, 2nd edition, 2005.

[175] T. Poinsot, D. Veynante, and S. Candel. Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams. *Journal of Fluid Mechanics*, 228 :561–606, 1991.

[176] W. Polifke, W. Geng, and K. Dobbeling. Optimization of rate coefficients for simplified reaction mechanisms with genetic algorithms. *Combustion and Flame*, 113 :119–135, 1998.

[177] S.B. Pope. A Monte Carlo method for the PDF equations of turbulent reactive flow. *Combustion Science and Technology*, 25 :159–174, 1981.

[178] S.B. Pope. PDF methods for turbulent reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 11 :119–192, 1985.

[179] S.B. Pope. The evolution of surfaces in turbulence. *International Journal of Engineering Science*, 25 :445–469, 1988.

[180] S.B. Pope. Computations of turbulent combustion : Progress and challenges. In *Proceedings of the 23rd International Symposium on Combustion*, volume 23, 1990.

[181] S.B. Pope. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modelling*, 1 :44–63, 1997.

[182] S. Rao and C.J. Rutland. A flamelet time scale model for non premixed combustion including chemical kinetic effects. *Combustion and Flame*, 133 :189–191, 2003.

[183] Z. Ren and S.B. Pope. An investigation of the performances of turbulent mixing models. *Combustion and Flame*, 136 :208–216, 2004.

[184] B. Rogg. Response and flamelet structure of stretched premixed methane-air flames. *Combustion and Flame*, 73 :45–65, 1988.

[185] B. Rogg and N. Peters. The asymptotic structure of weakly strained stoichiometric methane-air flames. *Combustion and Flame*, 79 :402–420, 1990.

[186] S. Roux. *Influence de la modélisation du mélange air/carburant et de l'étendue du domaine de calcul dans la simulation aux grandes échelles des instabilités de combustion. Application à des foyers aéronautiques.* PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007.

[187] S. Roux, G. Lartigue, T. Poinsot, U. Meier, and C. Bérat. Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic, and large eddy simulations. *Combustion and Flame*, 141 :40–54, 2006.

[188] M. Rullaud. *Modélisation de la combustion turbulente via une méthode de tabulation de la cinétique chimique détaillée couplée à des fonctions densités de probabilité and application aux foyers aéronautiques.* PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, 2004.

[189] J. Réveillon, P. Domingo, and L. Vervisch. Non premixed flame ignition in turbulent flows, triple flame. In *10th Symposium on Turbulent Shear Flows*, Pennsylvania State University, PA, USA, 1995.

[190] P. Sagaut. *Large eddy simulation for incompressible flows - An introduction.* Springer-Verlag, Scientific Computation Series, 3rd edition, 2005.

[191] A.L. Sanchez, A. Lépinette, M. Bollig, A. Linan, and B. Lazaro. The reduced kinetic description of lean premixed combustion. *Combustion and Flame*, 123 :436–464, 2000.

[192] J.P.H. Sanders, J.-Y. Chen, and I. Gökalp. Flamelet-based modeling of NO formation in turbulent hydrogen jet diffusion flames. *Combustion and Flame*, 111 :1–15, 1997.

[193] J. Savre, N. Bertier, Y. D'Angelo, and D. Gaffié. A chemical time scale approach for FPI modeling. *Comptes Rendus de Mécanique*, 336 :807–812, 2008.

[194] J. Savre, N. Bertier, Y. D'Angelo, and D. Gaffié. Computations of laminar premixed flames using extended FPI modeling. In *Proceedings of the 4th European Combustion Meeting*, Vienna and Austria, 2009.

[195] P. Schmitt, T. Poinsot, B. Schuermans, and K.P. Geigle. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high-pressure burner. *Journal of Fluid Mechanics*, 570 :17–46, 2007.

[196] L. Selle, G. Lartigue, T. Poinsot, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufmann, and Veynante. Compressible large eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combustion and Flame*, 137 :489–505, 2004.

[197] K. Seshadri, X.S. Bai, and H. Pitsch. Asymptotic structure of rich methane-air flames. *Combustion and Flame*, 127 :2265–2277, 2001.

[198] K. Seshadri, X.S. Bai, H. Pitsch, and N. Peters. Asymptotic analysis of the structure of moderately rich methane-air flames. *Combustion and Flame*, 113 :589–602, 1998.

[199] K. Seshadri and N. Peters. The inner structure of methane-air flames. *Combustion and Flame*, 81 :96–118, 1990.

[200] A. Sjunneson, S. Olovsson, and B. Sjöblom. Validation rig - a tool for flame studies. Technical Report 9370-308, VOLVO Aero AB, Trollhättan, Sweden, 1991.

[201] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Review*, 91 :99–164, 1963.

[202] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Gardiner Jr., V.V. Lissianski, and Z. Qin. GRI Mech Release 3.0. http ://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, 1999.

[203] M.D. Smooke and V. Giovangigli. *Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames*, chapter Formulation of the premixed and nonpremixed test problems. M.D. Smooke and Springer Verlag and Berlin, 1991.

[204] C.J. Sung, C.K. Law, and J.-Y. Chen. Augmented reduced mechanisms for NO emission in methane oxidation. *Combustion and Flame*, 125 :906–919, 2001.

[205] C.J. Sung, J.B. Liu, and C.K. Law. On the scalar structure of nonequidiffusive premixed flames in counterflow. *Combustion and Flame*, 106 :168–183, 1996.

[206] J.A. Sutton and J.W. Fleming. Towards accurate kinetic modeling of prompt NO formation in hydrocarbon flames via the ncn pathway. *Combustion and Flame*, 154 :630–636, 2008.

[207] N. Swaminathan and K.N.C. Bray. Effect of dilatation on scalar dissipation in turbulent premixed flames. *Combustion and Flame*, 143 :549–565, 2005.

[208] P.J. O'Rourke T.D. Butler. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. In *proceedings of the 16th International Symposium on Combustion*, pages 1503–1515, 1977.

[209] H. Tennekes and J.L. Lumley. *A first course in turbulence*. MIT press, 1st edition, 1972.

[210] A. Teraji, Y. Imaoka, T. Tsuda, T. Noda, M. Kubo, and S. Kimura. Development of a time-scale interaction combustion model and its application to gasoline and diesel engines. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :2751–2758, 2009.

[211] K.W. Thompson. Time-dependent boundary conditions for hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, 68 :1–24, 1987.

[212] J. Tomeczek and B. Gradon. The role of N2O of NNH in the formation of NO via HCN in hydrocarbon flames. *Combustion and Flame*, 133 :311–322, 2003.

[213] A. Trouvé and T. Poinsot. The evolution equation for the flame surface density in turbulent premixed combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 278 :1–31, 1994.

[214] W. Tsang and J.T. Herron. Chemical kinetic data base for propellant combustion I. reactions invloving NO, NO2, HNO, HNO2, HCN and N2O. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 20 :609, 1991.

[215] L. Vervisch, E. Bidaux, K.N.C. Bray, and W. Kollmann. Surface density function in premixed turbulent combustion modeling, similarities between probability density function and flame surface approaches. *Physics of Fluids*, 7 :2496, 1995.

[216] L. Vervisch, R. Hauguel, P. Domingo, and M. Rullaud. Three facets of turbulent combustion modelling : DNS of premixed V-flame, LES of lifted non premixed flame and RANS of jet-flame. *Journal of Turbulence*, 5 :1–36, 2004.

[217] L. Vervisch and D. Veynante. Interlinks between approaches for modeling turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :175–183, 2000.

[218] D. Veynante and R. Knikker. Comparison between LES results and experimental data in reacting flows. *Journal of Turbulence*, 7 :1–20, 2006.

[219] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modelling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28 :193–266, 2002.

[220] W. Vicente, M. Salinas, E. Barrios, and C. Dopazo. PDF Modeling of CO and NO formation in lean premixed methane flame. *Combustion Science and Technology*, 176 :585–601, 2004.

[221] J. Wang and T. Niioka. Numerical study of radiation reabsorption effect on NOx formation in CH4/air counterflow premixed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :2211–2218, 2002.

[222] M. Wang, J. Huang, and W.K. Bushe. Simulation of a turbulent non-premixed flame using conditional source-term estimation with trajectory generated low-dimensional manifold. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :1701–1709, 2007.

[223] J. Warnatz, R.W. Dibble, and U. Maas. *Combustion*. Springer-Verlag, New-York, 3rd edition, 2009.

[224] H.G. Weller, G. Tabor, A.D. Gosman, and C. Fureby. Application of a flame-wrinkling LES combustion model to a turbulent mixing layer. In *Proceedings of the 27th International Symposium on Combustion*, pages 899–907, 1998.

[225] C.K. Westbrook and F.L. Dryer. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combustion Science and Technology*, 27 :31–43, 1981.

[226] B.A. Williams and J.W. Fleming. Experimental and modeling study of NO formation in 10 torr methane and propane flames : Evidence for additional prompt-NO precursors. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :1109–1117, 2007.

[227] B.A. Williams and J.W. Fleming. The role of methylene in prompt NO formation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :343–350, 2009.

[228] F.A. Williams. *Combustion theory*. Westview Press, 2nd edition, 1994.

[229] K. Xiao, D. Schmidt, and U. Maas. PDF simulations of turbulent non-premixed CH4/H2-air flames using automatically reduced chemical kinetics. In *Proceedings of the 27th International Symposium on Combustion*, pages 1073–1080, 1998.

[230] S. Xu and M.C. Lin. Ab-initio chemical kinetics for N2 reaction with singlet and triplet ch2 radicals. In *Fall Technical Meeting, Eastern State Section, Combustion Institute*, pages 21–24, 2007.

[231] S. Xu and M.C. Lin. Ab initio chemical kinetics of HNCN with O(3P) and O2. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :99–106, 2009.

[232] C.S. Yoo and H.G. Im. Characteristic boundary conditions for simulations of compressible reacting flows with mutli-dimensional, viscous and reaction effects. *Combustion Theory and Modelling*, 11 :259–286, 2007.

[233] B. Zamuner and F. Dupoirieux. Numerical simulation of soot formation in a turbulent flame with a Monte-Carlo PDF appproach and detailed chemistry. *Combustion Science and Technology*, 158 :407–438, 2000.

[234] Y.B. Zeldovich. The oxidation of nitrogen in combustion and explosions. *Acta Physicochimica USSR*, 1946.

[235] V.N. Zimont and A.N. Lipatnikov. A model of premixed turbulent combustion and its validation. *Chemical Physics Reports*, 14 :993, 1995.

Résumé : Afin de pouvoir simuler la formation des principaux polluants au sein de foyers aéronautiques réalistes, un modèle de réduction de la chimie détaillée (FPI), basé sur la construction de tables à partir de calculs de flammes de prémélange laminaires élémentaires, est adapté et couplé au code d'aérothermochimie CEDRE de l'ONERA. Après une brève validation de ce modèle via la simulation de flammes laminaires canoniques, les interactions chimie/turbulence sont modélisées sous l'hypothèse des flammelettes, en approchant les PDF des paramètres d'entrée des tables par des fonctions beta. Cette approche complète est appliquée à la simulation numérique de l'écoulement au sein d'une configuration plus appliquée : la chambre PRECCINSTA. Ce cas bien connu a permis notamment l'évaluation des capacités du modèle dans un contexte plus industriel par comparaison des résultats de calcul aux données expérimentales disponibles. Il a en particulier permis de tester l'approche FPI étendue à la modélisation de la combustion partiellement prémélangée. Par ailleurs, l'utilisation d'un modèle de chimie réduite s'avère particulièrement appropriée pour prédire l'émission de substances polluantes, par exemple CO. Cependant, lorsque l'on considère la formation de NO, FPI ne peut pas être utilisé directement du fait de la lente dynamique chimique de cette espèce. Pour pallier à cette limitation, deux approches permettant de modéliser la production de NO au sein d'écoulements complexes sont proposées, fondées sur l'utilisation des tables chimiques FPI. Les capacités de ces modèles sont finalement analysées à l'aide de calculs effectués sur la configuration PRECCINSTA.
Mots clés : *Simulation aux Grandes Echelles d'écoulements réactifs, modélisation de la combustion turbulente prémélangée, combustion partiellement prémélangée, réduction de la chimie, modélisation de la formation de NOx*

Non-stationnary numerical simulations of turbulent combustion inside aeronautical burners and pollutant formation modeling

Abstract : In order to simulate major pollutant formation inside realistic aeronautical combustion chambers, a detailed chemistry reduction technique (FPI), based on the construction of databases from elementary laminar premixed flame calculations, is adapted and coupled to the ONERA household CFD code : CEDRE. After a short validation of this model based on the numerical simulation of simplified laminar flames, the chemistry turbulence interactions are modeled under the laminar flamelet hypothesis, by assuming the shape of the FPI progress variable PDFs using beta functions. This comprehensive approach is then applied to the numerical simulation of the flow inside a realistic geometry : the PRECCINSTA combustion chamber. This well-known configuration has enabled the evaluation of the model's abilities within an industrial framework using numerical/experimental results comparisons. It has especially allowed to test an extension of the model to partially premixed combution. Furthermore, the use of a tabulated chemistry model turns out to be particularly appropriate to predict pollutant species formation such as CO. However, when considering the formation of nitrogen oxides, FPI cannot be applied directly because of the slow dynamics of the chemical processes involved. To overcome these limitations, two approaches allowing NO production modeling within complexe flows are proposed, derived from the use of the tabulated data. The capacities of these models are finally analysed using computations performed on the PRECCINSTA chamber.
Keywords : *Large Eddy Simulation of reacting flows, turbulent premixed combustion modeling, partially premixed combustion, detailed chemistry reduction, NOx formation modeling*