UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES DE COMBUSTION POUR LA SIMULATION NUMÉRIQUE D'ÉCOULEMENTS TURBULENTS RÉACTIFS

SAMIR RIDA
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR (Ph.D.)
(GÉNIE MÉCANIQUE)
Mai 1998

© Samir Rida, 1998.

National Library of Canada
Acquisitions and Bibliographic Services
395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque nationale du Canada
Acquisitions et services bibliographiques
395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

0-612-37383-5

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée:

MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES DE COMBUSTION POUR LA SIMULATION NUMÉRIQUE D'ÉCOULEMENTS TURBULENTS RÉACTIFS

présentée par: RIDA Samir

en vue de l'obtention du diplôme de: Philosophiæ Doctor (Ph.D.)

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de:

M. BERNIER Michel, Ph.D., président

M. CAMARERO Ricardo, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. McKENTY François, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. DE CHAMPLAIN Alain, Ph.D., membre

M. GARON André, Ph.D., membre

À la mémoire de mon grand-père Lahcen,

à ma femme Selma et à mes parents.

Remerciements

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude et mes vifs remerciements à mes directeur et codirecteur de recherche, Prof. Ricardo Camarero et Dr. François McKenty qui n'ont ménagé ni leur temps ni leurs efforts pour la réalisation de ce projet. Monsieur Camarero qui avait auparavant dirigé mon projet de maîtrise a su établir, de manière efficace et pertinente, une continuité à mes travaux de recherche. Son admirable attention et son soutien m'ont particulièrement aidé à mener à terme cette étude. Monsieur McKenty dont la compétence n'a d'égal que son dévouement m'a fait profité de sa grande expérience en combustion grâce à laquelle j'ai pu évoluer rapidement et efficacement dans la mise en oeuvre de ce travail. Nos fréquentes discussions et ses excellents conseils ont été à la base de l'originalité de ce projet.

Je remercie les Professeurs André Garon et Marcelo Reggio pour leur aide occasionnelle et précieuse. Je souligne aussi l'esprit amical dans lequel j'ai travaillé à l'École Polytechnique et au CERCA (Centre de recherche en calcul appliqué). À ce propos, je voudrais souhaiter à mes collègues et mes amis, Roberto Marrano, Marie-Isabelle Farinas, Serge Didier Eby, Luc Gravel et Juan Abanto Florida une agréable continuation et du succès dans leur carrière.

Je voudrais remercier messieurs les membres du jury d'avoir accepté de juger ce travail. Leurs commentaires judicieux ont contribué à l'amélioration du contenu de cette thèse.

Enfin, le soutien inconditionnel et continu de ma femme Selma ainsi que les encouragements et le support de mes parents ont été essentiels. La réalisation de cet ouvrage n'aurait pas été possible sans eux. Je leur en suis éternellement reconnaissant.

Résumé

Dans cette étude, on étudie la simulation numérique d'écoulements turbulents réactifs en atmosphère confinée. La modélisation des phénomènes de combustion a été appliquée à des flammes de diffusion de combustibles monophasiques gazeux en utilisant trois modèles éprouvés et un nouveau modèle développé pour cette étude. Il s'agit des modèles de combustion à chimie infiniment rapide, d'équilibre chimique et de micro-flammes qui forment la librairie CMBLIB et du récent modèle hybride. Pour tenir compte de l'influence de la turbulence sur la structure de la flamme et sur le taux de réaction, une pondération par fonctions de densité de probabilité Beta et Delta est adoptée. La turbulence est modélisée par le modèle $k-\epsilon$ standard avec loi de paroi et le schéma numérique utilisé consiste en une méthode de volumes finis d'ordre un. Les équations de base sont prises en formulation primitive et discrétisées sur des maillages non structurés pour des géométries bidimensionnelles planes ou axisymétriques

Le schéma numérique est utilisé dans le contexte des volumes finis avec des maillages décalés non structurés. La fonction d'interpolation du terme convectif est basée sur une extension de la méthode de *Skewed Mass-Weighted Upwinding* aux maillages triangulaires. Un point important de ce travail consiste à juger l'aptitude de ce schéma à bien prédire les écoulements turbulents réactifs.

Dans cette étude, il s'agit aussi de bien modéliser l'interaction turbulence–réaction. Du côté du modèle $k - \epsilon$, une loi de paroi à deux échelles de vitesse est introduite pour améliorer le transfert de chaleur pariétal qui est biaisé avec la loi de paroi au profil universel. Du côté de la pondération, une procédure $k - \epsilon$/PDF est développée pour optimiser et améliorer la précision de l'intégration des PDF.

Un autre point important de ce travail concerne la correction du comportement aberrant du modèle d'équilibre chimique dans certaines conditions de réaction. Ce comportement ne constitue pas une erreur du modèle mais représente une avenue irréaliste dans le contexte actuel. En effet, ce modèle a tendance à former des hydrocarbures à partir d'atomes libres de carbone et d'hydrogène ou à dissocier du dioxyde de carbone pour des mélanges riches. Une variante du modèle d'équilibre avec contraintes d'inégalité sur les espèces critiques est développée pour remédier à ces comportements irréalistes.

Un aspect nouveau de cette étude réside dans l'amélioration de la prédiction des polluants. Le modèle de micro–flammes, reconnu pour sa précision, est dédié seulement à la combustion du méthane pur. Pour pallier cette limitation, un modèle hybride est développé en combinant cinétique de réaction et équilibre chimique afin d'améliorer la prédiction du monoxyde de carbone pour n'importe quel hydrocarbure. En outre, le nombre d'espèces est augmenté de 8 à 55 dans la librairie CMBLIB pour élargir le spectre d'applications à des combustibles de composition variée.

Le schéma numérique et le modèle de turbulence ont d'abord été validés pour des écoulements isothermes. La concordance avec les mesures expérimentales provenant de la littérature a été bonne et la différence entre les résultats obtenus avec les deux lois de paroi a été très marginale pour ce type d'écoulement. La procédure de calcul a

ensuite été appliquée aux écoulements turbulents réactifs afin de comparer les quatre modèles de combustion. La bonne performance du modèle de micro–flammes a été confirmée pour les flammes de méthane. Le problème de la qualité de prédiction du monoxyde de carbone a été résolu par l'introduction du modèle hybride. Ce dernier a comblé les lacunes du modèle d'équilibre chimique concernant la surestimation de monoxyde de carbone et du modèle à chimie infiniment rapide qui ignorait totalement ce polluant. Dans le cas de flammes de méthane, le modèle hybride a donné des résultats très comparables à ceux du modèle semi–empirique de micro–flammes.

La comparaison des prédictions des quatre modèles avec des mesures expérimentales et des calculs puisés dans la littérature a été en général bonne. La loi de paroi à deux échelles de vitesse s'est avérée efficace en améliorant les profils de température dans le cas d'écoulements turbulents réactifs avec transfert de chaleur pariétal. L'interaction turbulence–combustion a été optimisée et la procédure $k-\epsilon$/PDF a permis de réduire le temps de calcul de plusieurs ordres de grandeur avec une précision de calcul comparable à celle de la méthode Monte Carlo/PDF. En ce qui concerne le modèle hybride, il n'a pas été possible de pondérer les résultats étant donné le caractère bimodal de la fonction de pondération $\widetilde{P}(f, m_{co})$ dont la forme est inconnue.

Abstract

In this study, the numerical simulation of confined turbulent reactive flows is investigated. Combustion modeling is applied to diffusion flames of single phase gaseous fuels using three tested models and a new one developed for this study. These models are fast chemistry, chemical equilibrium and micro–flame gathered in the CMBLIB library in addition to the recent hybrid model. The influence of turbulence on the flame structure and on the reaction rate is introduced by averaging through Beta and Delta probability density functions. Turbulence modeling is achieved by the standard $k - \epsilon$ model using wall functions and the numerical scheme used consists of a first order finite volume method. The governing equations are expressed in terms of the primitive variables formulation and discretised on unstructured grids for either two–dimensional or axisymmetrical geometries.

The numerical scheme is used in the context of the finite volume method using unstructured staggered grids. The interpolation function of the convective term is based on an extension to triangular grids of the skewed mass–weighted upwinding method. One of the key points of this investigation is to assess the performance of this scheme for the simulation of turbulent reactive flows.

The present work also consists in improving the modeling of turbulence–chemistry interaction. First, a wall function using two velocity scales is introduced to improve the prediction of wall heat flux since the wall heat transfer is biased when applying the usual wall function with the universal profile. Secondly, a $k - \epsilon$/PDF procedure is developed to optimize and improve PDF calculations.

Another key point of this investigation is about correcting the deviating behavior of the chemical equilibrium model that occurs in certain reaction conditions. This behavior is not an error per say but rather represents unrealistic conditions within the present context. In fact, the standard chemical equilibrium model has a tendency to create hydrocarbon fuels from carbon and hydrogen atoms or to dissociate carbon dioxide for rich mixtures. A new variant of the chemical equilibrium model with inequality constraints imposed on the critical species is developed to alleviate these unrealistic behaviors.

A new aspect of this study is to improve the prediction of pollutants. In fact, the micro–flame model provides very good predictions but is dedicated only to pure methane flames. To overcome this limitation, a new hybrid model was developed combining reaction kinetics and chemical equilibrium to improve carbon monoxide predictions for any hydrocarbon fuel. The number of species available in CMBLIB library was also raised from 8 to 55 in order to extend our applications to a wide variety of fuels.

The performance of the numerical scheme and the turbulence model was first assessed for isothermal flows. The comparison with experimental data from literature was good and the results obtained with both wall functions were marginally different for this type of flow. The numerical procedure was then applied to turbulent reactive

flows for cross comparison of the four combustion models. The good performance of the micro–flame model was confirmed for methane flames. The quality of carbon monoxide predictions was improved with the hybrid model. The latter filled the deficiencies of the chemical equilibrium model and the fast chemistry model which respectively overpredicted and totally ignored carbon monoxide production. In the case of methane fuel, the hybrid model predictions were very close to those of the semi–empirical micro–flame model.

The four models' predictions compared well with experimental data and numerical calculations from the literature. The two–velocity scale wall function improved significantly the temperature profiles for non adiabatic turbulent reactive flows. The turbulence–chemistry interaction was also optimized: the $k - \epsilon$/PDF procedure allowed the reduction of computational time by many orders of magnitude and was capable of precision comparable to the Monte Carlo/PDF method. However, in the case of the hybrid model the PDF remains unknown because it involves a bimodal probability density function ($\widetilde{P}(f, m_{co})$).

Table des matières

Dédicace iv

Remerciements v

Résumé vii

Abstract x

Table des matières xiii

Liste des tableaux xviii

Liste des figures xx

Liste des sigles et abréviations xxx

Liste des notations xxxi

Introduction 1

1 Revue bibliographique 6

1.1 Introduction à la combustion 7

1.2 Flammes de diffusion 9

1.3 Aspect aérothermochimique de la combustion 10
1.4 Écoulements turbulents à densité variable 13
1.4.1 Équations moyennes de conservation 14
1.4.2 Modèle de turbulence 17
1.4.3 Loi de paroi 19
1.5 Modèles de combustion 20
1.5.1 Interaction turbulence–combustion: taux de réaction 21
1.5.2 Modèle à chimie infiniment rapide 23
1.5.3 Pondération 25
1.5.4 Modèle à taux de réaction fini 28
1.5.5 Modèle d'équilibre chimique 29
1.5.6 Modèle de flammelettes ou micro–flammes 31
1.5.7 Modèle hybride 32
1.6 Modèle numérique 37

2 Équations de base 40
2.1 Aspect aérothermochimique 42
2.1.1 Aspect aérodynamique 42
2.1.2 Aspect thermochimique 45
2.2 Relations communes aux modèles de combustion 47
2.2.1 Le taux de mélange 48
2.2.2 Enthalpie et température 50
2.3 Modèles de combustion 51
2.3.1 Modèle à chimie infiniment rapide 52
2.3.2 Modèle à taux de réaction fini 56
2.3.3 Modèle d'équilibre chimique 57

2.3.4 Modèle de micro–flammes 67
2.3.5 Modèle hybride 70
2.3.6 Comparaison des modèles de combustion 73
2.4 Pondération 75
2.5 Conditions aux frontières 78
2.5.1 Conditions d'entrée 78
2.5.2 Conditions de sortie et de symétrie 79
2.5.3 Condition de paroi 79
2.6 Résumé des conditions de combustion
et de simulation 85
2.6.1 Hypothèses et restrictions 85
2.6.2 Résumé des équations de base 86

3 Solution numérique 87
3.1 Discrétisation 87
3.1.1 Discrétisation d'une équation de transport 88
3.1.2 Fonction d'interpolation 89
3.1.3 Traitement de la pression 92
3.2 Calcul numérique des PDF 93
3.2.1 Forme des PDF 94
3.2.2 Intégration numérique des PDF 94
3.3 Solution du système 98

4 Validations 100
4.1 Ordre du schéma numérique 101
4.1.1 Couche cisaillée 102
4.1.2 Cavité carrée 104

4.2 Approche logarithmique du modèle $k-\epsilon$ 108

4.3 Écoulement type: jets coaxiaux 114

4.4 Loi de paroi à deux échelles de vitesse 119

4.5 Méthode COUPLÉE et algorithme SIMPLER 122

4.6 Amélioration du calcul des PDF 124

4.6.1 Précision de l'intégration numérique 125

4.6.2 Rapidité de calcul 135

5 Résultats 139

5.1 Flamme de diffusion laminaire 140

5.1.1 Influence du maillage 143

5.1.2 Comparaison avec un schéma d'éléments finis 146

5.1.3 Comparaison des modèles de combustion 149

5.2 Flamme de diffusion turbulente
dans un tunnel avec un bluff-body 154

5.2.1 Modèle hybride: cas particulier 158

5.2.2 Utilisation de la pondération 162

5.2.3 Comparaison des modèles 166

5.2.4 Nécessité de la pondération 170

5.3 Écoulement turbulent réactif:
problème de méthanation 171

5.3.1 Mise en évidence de la méthanation 172

5.3.2 Simulation de l'expérience de Lockwood et al. (1974) 178

5.4 Flamme de diffusion turbulente
dans un combusteur axisymétrique 184

5.4.1 Problème de méthanation 185

5.4.2 Effet du maillage 187

5.4.3 Comparaison des modèles de combustion 189

5.5 Combusteur industriel

aux parois non–adiabatiques 199

5.5.1 Étude paramétrique 200

5.5.2 Problème de lissage 202

5.5.3 Loi de paroi et transfert de chaleur 211

5.5.4 Comparaison des modèles de combustion 214

5.6 Conclusion 220

Conclusion **222**

Références **226**

Liste des tableaux

2.1 Valeurs de ϕ, Γ et S_ϕ pour l'équation générale de transport. 86

4.1 Ordre du schéma dans le cas de la couche cisaillée de Schlichting (1960) pour différentes inclinaisons du maillage. 104

4.2 Ordre du schéma dans le cas de Smith et Hutton (1982). 106

4.3 L'erreur exacte relative $Er \times 10^3$ pour différents maillages. 109

4.4 Comparaison entre la procédure COUPLÉE et l'algorithme SIMPLER. 123

4.5 Distribution de g/g_{max} dans le domaine. Calculs effectués pour différents cas tests dans la littérature. 129

4.6 Pourcentage des cas où la méthode *Standard* est efficace. Pourcentages établis pour $\bar{p}$ et $\tilde{T}$. 129

4.7 Pourcentage des cas où la méthode *Standard* est utilisée sans altérer la précision du calcul de $\bar{p}$. 133

4.8 Pourcentage des cas où la méthode *Standard* est utilisée sans altérer la précision du calcul de $\tilde{T}$. 133

4.9 Pourcentage des cas où la méthode *Standard* est efficace pour le calcul de $\bar{p}$. Résultats pondérés. 134

4.10 Pourcentage des cas où la méthode *Standard* est efficace pour le calcul de $\tilde{T}$. Résultats pondérés. 135

5.1 Détails des quatre maillages utilisés dans la simulation de l'expérience de Mitchell et al. (1980) 143

5.2 Longueur de flamme pour différents maillages. Prédictions des schémas VF et EF dans le cas de l'expérience de Mitchell et al. (1980). 148

Liste des figures

1.1 Influence des fluctuations turbulentes sur la température et la densité, Calcul de la combustion du méthane dans l'air qui suppose une quantité de fluctuations de f: $\widetilde{f''^2}/\tilde{f} = 0,02$. 28

2.1 Description du problème. 41

2.2 Concentration massique des produits de combustion en fonction du taux de mélange pour la combustion du méthane dans l'air. 50

2.3 Équilibre chimique du méthane dans l'air. Comparaison des concentrations molaires en fonction de la richesse du mélange avec les résultats de Jones (1980). 66

2.4 Concentration massique des produits en fonction du taux de mélange calculées avec le modèle de micro–flammes pour la combustion du méthane dans l'air (McKenty (1992)). 69

2.5 Domaine de calcul avec loi de paroi. 84

3.1 Volume de contrôle. 88

3.2 Nomenclature du volume de contrôle. 90

3.3 Détails de discrétisation pour la fonction d'interpolation. 92

3.4 Forme de $\widetilde{P}(f)$ à différents endroits du domaine. 95

3.5 Allure de la fonction de densité de probabilité Beta $(\tilde{P}(f)/\tilde{P}(f)_{max})$. De gauche à droite: $\tilde{f} = 0,1; 0,5; 0,8$. La variance g augmente de haut en bas. 96

4.1 Évolution de l'erreur exacte en fonction du pas h pour la couche cisaillée de Schlichting (1960). 103

4.2 Isolignes de u et de k pour le cas de Smith et Hutton (1982). 105

4.3 Évolution de l'erreur exacte en fonction du pas h pour le cas analytique de Smith et Hutton (1982). 106

4.4 Évolution de u et de k sur la diagonale [(-1,-1);(1,1)], comparaison avec la solution analytique de Smith et Hutton (1982). 107

4.5 Isolignes de k, du maillage le plus lâche (en haut) au plus fin (en bas), dans le cas de la couche cisaillée de Schlichting (1960). 111

4.6 Isolignes de ϵ, du maillage le plus lâche (en haut) au plus fin (en bas), dans le cas de la couche cisaillée de Schlichting (1960). 112

4.7 Isolignes de μ_t, du maillage le plus lâche (en haut) au plus fin (en bas), dans le cas de la couche cisaillée de Schlichting (1960). 113

4.8 Géométrie utilisée pour les deux jets coaxiaux confinés, expérience de Habib et Whitelaw (1979) (dimensions en mm). 116

4.9 Isolignes de u pour les deux jets coaxiaux confinés, simulation de l'expérience de Habib et Whitelaw (1979). 116

4.10 Isolignes de k pour les deux jets coaxiaux confinés, simulation de l'expérience de Habib et Whitelaw (1979). 116

4.11 Distribution de u/u_c à différentes stations de mesure axiales, comparaison avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979). 117

4.12 Évolution de la vitesse axiale sur l'axe de symétrie, comparaison avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979). 118

4.13 Évolution de la tension normale sur l'axe de symétrie, comparaison avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979). 118

4.14 Évolution de l'énergie cinétique de turbulence sur l'axe de symétrie, comparaison avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979). 119

4.15 Distribution de u/u_c à différentes stations de mesure axiales, comparaison des résultats des deux lois de paroi avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979). 120

4.16 Évolution de la vitesse axiale sur l'axe de symétrie, comparaison des résultats des deux lois de paroi avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979). 121

4.17 Évolution de l'énergie cinétique de turbulence sur l'axe de symétrie, comparaison des résultats des deux lois de paroi avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979). 121

4.18 Lieu des points $(g/g_{max}, \tilde{f})$ dans le carrée $[0,1] \times [0,1]$ où la fonction Beta est utilisable. 126

4.19 Lieu des points $(g/g_{max}, \tilde{f})$ où la méthode *Standard* diverge de la méthode *Maximale*. Statistiques effectués pour $\bar{\rho}$ et T. 127

4.20 Calcul de $\bar{\rho}$ et $\tilde{T}$, pourcentage des cas où la méthode *Standard* donne une précision satisfaisante. 128

4.21 Partition du domaine de la fonction Beta pour $\bar{\rho}$ et $\tilde{T}$. En vert: zone pour Beta uniquement, en bleu: zone où Beta $\equiv$ Delta et en rouge: zone où Beta $\equiv$ Dirac. 131

4.22 Temps de calcul des intégrales de $\bar{\rho}$ pour quatre configurations de (N, $\widetilde{P}(f)$, $\phi(f)$) en fonction de g/g_{max}. Pour chaque g/g_{max}, le temps de calcul de 100 intégrales est représenté. 137

5.1 Flamme de diffusion laminaire, géométrie utilisée dans l'expérience de Mitchell et al. (1980). 141

5.2 Flamme de diffusion laminaire, lignes iso–vitesse axiale pour le modèle à chimie infiniment rapide. Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 5,35). 142

5.3 Flamme de diffusion laminaire, lignes iso–température pour le modèle à chimie infiniment rapide. Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 5,35). 142

5.4 Flamme de diffusion laminaire, Maillage 1. Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 5,35). 144

5.5 Influence du maillage sur la vitesse axiale et la température. Comparaison des prédictions du modèle à chimie infiniment rapide avec les mesures de Mitchell et al. (1980). 145

5.6 Comparaison des résultats VF et EF dans le cas du modèle à chimie infiniment rapide. Mesures de Mitchell et al. (1980). 147

5.7 Comparaison des prédictions des modèles de combustion pour la vitesse axiale et la température avec les mesures de Mitchell et al. (1980). . . 151

5.8 Comparaison des prédictions des modèles de combustion pour les fractions molaires avec les mesures de Mitchell et al. (1980) à $x = 1,2$ cm. 152

5.9 Comparaison des prédictions des modèles de combustion pour les fractions molaires avec les mesures de Mitchell et al. (1980) à $x = 2,4$ cm. 153
5.10 Géométrie utilisée dans l'expérience de Correa et Gullati (1992). . . . 155
5.11 Flamme de diffusion turbulente dans un tunnel: maillage. 156
5.12 Profil de $\tilde{f}$ sur l'axe de symétrie calculé avec la méthode d'équilibre chimique pour les trois maillages étudiés. 156
5.13 Flamme de diffusion turbulente dans un tunnel: champs des vecteurs vitesse à l'embouchure des jets (distances en mm). 157
5.14 Station $x/d = 10$. Comparaison des profils de f, T et des fractions massiques pour des valeurs de $A_{R_{fu}}$ allant de $0,1$ à 40. 160
5.15 Station $x/d = 20$. Comparaison des profils de f, T et des fractions massiques pour des valeurs de $A_{R_{fu}}$ allant de $0,1$ à 40. 161
5.16 Flamme de diffusion turbulente dans un tunnel: lignes isothermes sans pondération obtenus avec le modèle d'équilibre chimique. 163
5.17 Flamme de diffusion turbulente dans un tunnel: lignes isothermes avec pondération obtenus avec le modèle d'équilibre chimique. 163
5.18 Comparaison des profils de f et T avec et sans pondération dans le cas des modèles d'équilibre chimique et de chimie infiniment rapide. . . . 165
5.19 Profils du taux de mélange sur l'axe de symétrie. Comparaison avec les calculs de Correa et Pope (1992). 166
5.20 Station $x/d = 10$. Comparaison des profils de $\tilde{f}$, $\tilde{T}$ et des fractions massiques moyennes avec ceux de Correa et Pope (1992). 168
5.21 Station $x/d = 20$. Comparaison des profils de $\tilde{f}$, $\tilde{T}$ et des fractions massiques moyennes avec ceux de Correa et Pope (1992). 169

5.22 Géométrie utilisée dans l'expérience de Lockwood et al. (1974). Distances en mm. 172

5.23 Méthanation: évolution du nombre de moles de CH_4 avec et sans réaction chimique. Nombre de moles basé sur une mole d'air. 173

5.24 Dissociation: évolution du nombre de moles de CO_2 avec et sans réaction chimique. Nombre de moles basé sur une mole d'air. 174

5.25 Méthanation : Évolution du nombre de moles de CH_4. Calculs du modèle d'équilibre chimique avec et sans contraintes. Nombre de moles basé sur une mole d'air. 175

5.26 Évolution du nombre de moles de C_2H_6. Calculs du modèle d'équilibre chimique avec et sans contrainte. Nombre de moles basé sur une mole d'air. 176

5.27 Dissociation: évolution du nombre de moles de CO_2. Calculs du modèle d'équilibre chimique avec et sans contrainte. Nombre de moles basé sur une mole d'air. 176

5.28 Évolution de la température dans le cas du modèle d'équilibre chimique avec et sans contraintes. 177

5.29 Type du maillage utilisé dans la simulation numérique de l'expérience de Lockwood et al. (1974). Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 4,92). 178

5.30 Influence du maillage sur le taux de mélange moyen à différentes stations en aval du brûleur. Expérience de Lockwood et al. (1974). . . . 179

5.31 Influence du maillage sur la distribution du taux de mélange moyen sur l'axe. Expérience de Lockwood et al. (1974). 180

5.32 Distribution du taux de mélange moyen sur l'axe pour trois modèles de combustion. Calculs avec pondération pour la simulation de l'expérience de Lockwood et al. (1974). 181

5.33 Distribution du taux de mélange moyen à différentes stations en aval du brûleur. Calculs avec pondération pour la simulation de l'expérience de Lockwood et al. (1974). 182

5.34 Distribution du taux de mélange sur l'axe. Calculs sans pondération pour la simulation de l'expérience de Lockwood et al. (1974). 183

5.35 Géométrie utilisée dans l'expérience de Lewis et Smoot (1981). 184

5.36 Méthanation : Évolution du nombre de moles de CH_4. Calculs du modèle d'équilibre chimique avec et sans contrainte. Nombre de moles basé sur une mole d'air. 186

5.37 Dissociation: évolution du nombre de moles de CO_2. Calculs du modèle d'équilibre chimique avec et sans contrainte. Nombre de moles basé sur une mole d'air. 186

5.38 Évolution du nombre de moles de C_2H_6. Calculs du modèle d'équilibre chimique avec et sans contrainte. Nombre de moles basé sur une mole d'air. 187

5.39 Influence du maillage sur le taux de mélange moyen à différentes stations en aval du brûleur. Expérience de Lewis et Smoot (1981). . . . 188

5.40 Type de maillage utilisé dans la simulation de l'expérience de Lewis et Smoot (1981). Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 3,06). 189

5.41 Lignes d'iso-taux de mélange dans la simulation de l'expérience de Lewis et Smoot (1981). Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 3,06). 190

5.42 Distribution du taux de mélange à différentes stations en aval du brûleur pour quatre modèles de combustion. Expérience de Lewis et Smoot (1981). 191
5.43 Distribution des fractions molaires des produits à la station $x = 95\,mm$ pour les quatre modèles de combustion. Expérience de Lewis et Smoot (1981). 193
5.44 Distribution des fractions molaires des produits à la station $x = 327\,mm$ pour les quatre modèles de combustion. Expérience de Lewis et Smoot (1981). 194
5.45 Distribution des fractions molaires des produits à la station $x = 632\,mm$ pour les quatre modèles de combustion. Expérience de Lewis et Smoot (1981). 196
5.46 Distribution des fractions molaires des produits à la station $x = 785\,mm$ pour les quatre modèles de combustion. Expérience de Lewis et Smoot (1981). 197
5.47 Distribution des fractions molaires des produits de la réaction à la station $x = 1375\,mm$ pour les quatre modèles de combustion. Expérience de Lewis et Smoot (1981). 198
5.48 Combusteur industriel axisymétrique aux parois non–adiabatiques de Perrin et al. (1995). Distances en mm. 199
5.49 Type de maillage utilisé dans la simulation de l'expérience de Perrin et al. (1995). Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 1,77). 200
5.50 Combusteur aux parois non–adiabatiques: champs des vecteurs de vitesse dans l'ouvreau. 202
5.51 Discrétisation de la dérivée suivant x de la vitesse $\tilde{u}$. 203

5.52 Distribution de la température et des fractions molaires de CO et de CO_2 sur l'axe de symétrie du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaison des trois formes de lissage en utilisant le modèle de micro–flammes avec PDF. 205

5.53 Distribution radiale de la température à différentes stations du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaisons des trois formes de lissage en utilisant le modèle de micro–flammes avec PDF. 206

5.54 Distribution de l'énergie cinétique de turbulence et de la vitesse axiale sur l'axe de symétrie du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaison des trois techniques de lissage en utilisant le modèle de micro–flammes avec PDF. 209

5.55 Distribution radiale de la vitesse u à différentes stations du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaisons des trois formes de lissage en utilisant le modèle de micro–flammes avec PDF. 210

5.56 Distribution de la température et des fractions molaires de CO et de CO_2 sur l'axe de symétrie du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaison des deux lois de parois en utilisant le modèle de micro–flammes avec PDF. 212

5.57 Distribution radiale de la température à différentes stations du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaisons des deux lois de parois en utilisant le modèle de micro–flammes avec PDF. 213

5.58 Distribution de la température et des fractions molaires de CO et CO_2 sur l'axe de symétrie du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaison des quatre modèles de combustion. 215

5.59 Distribution radiale de la température à différentes stations du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaisons des quatre modèles de combustion. 216

5.60 Distribution de la température et des fractions molaires de CO et CO_2 sur l'axe de symétrie du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaisons des modèles hybride et de micro–flammes sans PDF. 218

5.61 Distribution radiale de la température à différentes stations du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaisons des modèles hybride et de micro–flammes sans PDF. 219

Liste des sigles et abréviations

CFD	Computational Fluid Dynamics
CMBLIB	Librairie de combustion
EF	Élements finis
GRMIAO	Groupe de recherche en mécanique de l'ingénierie assistée par ordinateur
PDF	Probability Density Function
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations
SIMPLER	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations Revised
SUMT	Sequential Unconstrained Minimization Techniques
VF	Volumes finis

Liste des notations

Caractères usuels

A	facteur de fréquence ou facteur pré-exponentiel
$A_{R_{fu}}$	constante du modèle de combustion à taux de réaction fini
$a_i j$	nombre d'atomes de l'élément i dans l'espèce j
b_i	nombre d'atomes de l'élément i
C_{g_i}	constantes du terme source de l'équation de transport de g
C_{ϵ_i}	constantes; coefficients de fermeture du modèle $k-\epsilon$
C_μ	constante; coefficient de fermeture du modèle $k-\epsilon$
c_P	chaleur spécifique à pression constante
$\widetilde{\widetilde{\mathbf{D}}}$	tenseur des taux de déformation
D_H	diamètre hydraulique
E	énergie d'activation
F	rapport combustible/air
f	taux de mélange
G	énergie libre de Gibbs
g	fluctuation turbulente du taux de mélange
h	enthalpie
h_{R_i}	enthalpie de formation de l'espèce i
I_t	intensité de turbulence

k	énergie cinétique de turbulence
k_s	constante spécifique de la réaction
L	nombre d'atomes présents dans la réaction
M_i	masse molaire de l'espèce i
$\dot{m}$	débit massique
m_i	fraction massique de l'espèce i
N	nombre d'espèces chimiques dans la réaction
$\mathbf{N}_i$	vecteur normal dirigé du triangle L vers le triangle R
$\mathbf{n}$	vecteur normal
P	pression totale
P_k	production de l'énergie cinétique de turbulence
$\widetilde{P}(f)$	fonction de densité de probabilité
Pr	nombre de Prandtl
p	pression
$\dot{q}_w$	flux de chaleur à la paroi
R	constante universelle des gaz
R_{fu}	taux de réaction du combustible
R_i	rayon
Re	nombre de Reynolds
r	coordonnée radiale; cas axisymétrique
r_p	facteur de pénalisation
S	entropie
S_ϕ	terme source de l'équation de transport de ϕ
s	coefficient stoechiométrique de la réaction
T	température
t	temps

$\mathbf{U}$	vecteur vitesse
U	norme du vecteur vitesse
u	vitesse axiale
u_*	vitesse de friction à la paroi
u_τ	échelle de vitesse basée sur l'énergie cinétique de turbulence
u^+	vitesse universelle adimensionnelle; loi de paroi
v	vitesse radiale
x	coordonnée cartésienne, axiale dans le cas axisymétrique
y	coordonnée cartésienne
y_P	distance du point P à la paroi
y^+	distance de référence; loi de paroi

Caractères grecques

α_{axi}	paramètre d'axisymétrie
Γ_ϕ	coefficient de diffusion du scalaire ϕ
γ	fonction scalaire
δ	fonction de Dirac
δ_{ij}	delta de Kroenecker
ϵ	taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence
ε	rapport air–combustible stoechiométrique molaire
ζ	concentration massique de combustible en excès ou en défaut de la stoechiométrie
κ	constante de von Karman
λ	facteur de proportionnalité; intensité de turbulence
λ_i	multiplicateur de Lagrange; relations de Gibbs

μ	viscosité laminaire
μ_{eff}	viscosité efficace
μ_i	potentiel chimique de l'espèce i
μ_t	viscosité turbulente
ν	nombre de moles
ρ	densité
σ_ϕ	nombre de Prandtl ou de Schmidt turbulent
τ_w	taux de cisaillement à la paroi
ϕ	variable scalaire
φ	richesse du mélange
Ψ	fonction empirique; loi de paroi
Ω	domaine de calcul
Ω_C	volume de contrôle
ω	facteur de relaxation

Indices

A	dans le jet d'air
eff	valeur effective due à la turbulence
F	dans le jet de combustible (Fuel)
fu	du combustible
fu, b	du combustible brulé
i	de l'élément chimique; Gibbs
in	à l'entrée (conditions frontières) / inerte (gaz)
j	de l'espèce chimique
mel	du mélange

P	au point de frontière pariétale du domaine de calcul
pr	des produits
ref	de référence
st	aux conditions stoechiométriques
w	à la paroi

Symboles

tr	opérateur trace
∇	opérateur nabla
$-$	valeur moyenne; décomposition non–pondérée par la masse
$\tilde{}$	valeur moyenne; décomposition pondérée par la masse
$\hat{}$	valeur logarithmique; modèle $k-\epsilon$
$'$	fluctuation; décomposition non–pondérée par la masse
$''$	fluctuation; décomposition pondérée par la masse
$\|\| \cdot \|\|$	norme
$\otimes$	produit tensoriel

Introduction

Motivation :

L'utilisation des codes numériques dans le calcul de la dynamique des fluides (CFD: *Computational Fluid Dynamics*) pour la simulation des phénomènes de combustion est devenue une pratique courante au sein des communautés scientifique et industrielle. Elle permet aux ingénieurs d'améliorer la conception de nouveaux dispositifs industriels et d'optimiser les conditions de fonctionnement de systèmes de combustion afin de réduire les émissions de polluants. D'ailleurs, la préservation de l'environnement et le contrôle de la pollution suscitent un intérêt de plus en plus accru dans les milieux industriels (Brais et McKenty (1989)). C'est donc pour répondre à cette demande que des outils sont développés pour prédire et étudier le comportement des systèmes industriels complexes.

La recherche dans le domaine de la combustion fut entamée au sein du groupe GRMIAO en 1987 afin de développer un outil servant au design de brûleurs industriels. À cette époque, aucun code de calcul commercial n'était capable de prédire avec suffisamment de précision les caractéristiques des écoulements turbulents réactifs issus de brûleurs à géométrie complexe. Pour pallier cela, le problème a été traité à la base en développant de nouveaux codes de calcul qui étaient élaborés dans la perspective

d'implanter des modèles de combustion. L'expérience acquise lors du développement de ces codes a permis d'établir que le plus grand obstacle à une modélisation précise des flammes turbulentes était et demeure toujours la prédiction des caractéristiques de l'écoulement turbulent et du mélange des espèces chimiques réactives. En effet, la modélisation des réactions chimiques est très complexe et quel que soit le degré de perfectionnement du modèle de combustion, l'obtention de bons résultats reste étroitement liée à la qualité de prédiction du mélange.

Beaucoup d'efforts ont été consacrés par le groupe de combustion à l'élaboration d'un schéma numérique permettant de calculer précisément le mélange des espèces chimiques dans les écoulements turbulents. La version finale nommée VF (Volumes Finis), basée sur une formulation en variables primitives (u,v,p) et sur le modèle de turbulence $k-\epsilon$, permet d'obtenir des résultats nettement plus précis que les codes commerciaux disponibles sur le marché. En effet, ces logiciels visent une clientèle large et diversifiée en optant pour la robustesse du schéma et la rapidité d'exécution au dépens de la précision des calculs. Les solutions générées par ces codes dans le cas d'écoulements turbulents réactifs ne sont généralement guère plus que qualitatives. Certes, il existe des codes de recherche qui donnent d'excellentes prédictions pour les écoulements turbulents, mais ceux–ci sont généralement limités à des géométries simples et nécessitent d'énormes ressources informatiques en raison de la complexité des modèles utilisés. En outre, lorsque la géométrie des brûleurs se complexifie, l'utilisation des maillages non structurés triangulaires devient un atout considérable.

Le programme VF a été conçu pour concilier rapidité de calcul et précision acceptable dans la perspective de simuler des phénomènes de combustion industrielle. Ce programme peut résoudre des écoulements turbulents réactifs sur des géométries bidimensionnelles et axisymétriques très complexes ce qui est suffisant pour obtenir une

solution raisonnable de la plupart des problèmes de combustion industrielle.

Objet de la thèse :

La recherche dans le domaine de la simulation numérique des phénomènes de combustion à l'École Polytechnique a jusqu'à présent été axée sur la simulation de flammes de diffusion du gaz naturel. Les problèmes de combustion ne se limitent évidemment pas à ce type de flamme et de combustible : en Amérique du nord les fabricants de brûleurs, chaudières, fours, incinérateurs et turbines à gaz sont maintenant obligés de satisfaire de nouvelles normes environnementales de plus en plus contraignantes et doivent brûler des combustibles de composition variable (méthane, propane, hydrogène, gaz naturel, gaz de biomasse etc...).

Dans le passé, les concepteurs d'équipements de combustion procédaient par essai et erreur et se basaient sur des règles empiriques. Mais actuellement ces bonnes vieilles méthodes ne suffisent plus à améliorer le produit et la nécessité d'avoir un outil de prédiction quantitatif se fait de plus en plus sentir. Afin d'être complet et efficace, cet outil doit incorporer des modèles de combustion sophistiqués permettant non seulement d'obtenir de bonnes prédictions pour les longueurs de flammes, le transfert de chaleur et l'allure de l'écoulement à l'intérieur de l'enceinte, mais aussi de prédire les émissions de divers polluants et imbrûlés. Finalement, puisque ce code est destiné à l'industrie comme outil de design, il va sans dire que le temps de calcul est d'une importance capitale: nous devons être capable d'évaluer rapidement l'influence d'une modification au design.

La librairie des modèles de combustion actuellement disponible et dont les modèles sont axés sur la combustion du gaz naturel canadien, a été conçue pour être facilement exportable d'un code de calcul à un autre. Elle a été validée et largement utilisée sur un code de volume finis en formulation vorticité–courant (McKenty (1992)). La première partie de cette recherche consistera donc à greffer cette librairie au code de volumes finis et d'effectuer une série de tests de validation.

Dans un deuxième temps, on se propose d'étendre les modèles actuellement disponibles afin de permettre la combustion de combustibles autres que le gaz naturel canadien et ainsi conserver le même niveau de fonctionnalité tout en élargissant le spectre d'applications. Ensuite, un nouveau modèle de combustion sera développé afin de permettre une prédiction plus précise du niveau d'émission de polluants comme le CO.

Puisque les phénomènes de combustion industrielle sont étroitement liés aux caractéristiques turbulentes de l'écoulement, il faudra également améliorer le couplage turbulence–réaction au moyen de fonctions de densité de probabilité. Ceci sera fait selon deux volets: le premier visant à accélérer le processus de pondération actuellement très coûteux et le deuxième destiné à coupler diverses formes de fonction de densité de probabilité en fonction de la nature des fluctuations à un endroit donné.

Le code VF constituera la plate–forme sur laquelle seront implantés ces nouveaux modèles car il allie rapidité et précision. Les modèles pourront ensuite être transférés vers d'autres codes de recherche ou commerciaux dans l'éventualité où la nature du phénomène à l'étude est réellement tridimensionnelle.

La démarche suivante est donc proposée afin d'enrichir la librairie des modèles de combustion CMBLIB :

1. Valider le comportement du code de volumes finis VF lorsque couplé à la librairie de combustion CMBLIB en effectuant une série de tests d'écoulements réactifs turbulents qui soit pertinente.

2. Étendre la liste des espèces chimiques (produits de combustion et de combustibles) qu'il est possible de traiter avec le modèle d'équilibre chimique basé sur la minimisation de l'énergie de Gibbs actuellement disponible dans la librairie.

3. Augmenter la rapidité du modèle de pondération par fonction de densité de probabilité Beta actuellement disponible.

4. Optimiser la performance du modèle de pondération en déterminant les limites qui permettent de remplacer une fonction Beta (très coûteuse à intégrer) par une impulsion Dirac ou une fonction Delta, et ce sans altérer la précision des résultats.

5. Développer un modèle de combustion hybride combinant cinétique chimique pour les réactions lentes et équilibre chimique pour les réactions très rapides. Ceci permettra une meilleure prédiction des émissions de polluants tels le CO dont l'échelle de temps du taux de réaction est sensiblement égale à l'échelle de temps du mélange des réactifs: les hypothèses d'équilibre chimique induisent alors une erreur appréciable lorsque la combustion a lieu en défaut d'air.

Chapitre 1

Revue bibliographique

Il existe beaucoup d'ouvrages qui traitent de la combustion en général et des écoulements turbulents réactifs en particulier. C'est un sujet bien illustré dans la littérature à travers des documents fondamentaux tels Lewis et von Elbe (1961), Béer et Chigier (1972), Gardiner (1984), Williams (1985), Kuo (1986) et plus récemment Borghi et Destriau (1995) ou Turns (1996). D'autres ouvrages sont surtout appliqués à la simulation des écoulements réactifs comme Gosman et al. (1969) et Spalding (1979). Il existe aussi des manuels qui présentent une synthèse des modèles disponibles dans la simulation des phénomènes de combustion (Khalil et al. (1977), Khalil (1982), Dervieux et Larrouturou (1989)) ainsi que plusieurs thèses à caractère numérique telles Nikjooy (1987), Kim (1987) et McKenty (1992) ou à caractère expérimental comme Eatough (1991). Par ailleurs, plusieurs articles traitant de la modélisation de la combustion sont regroupés dans des ouvrages comme celui de Libby et Williams (1980) ou celui de Chung (1993). Nous pouvons trouver aussi un nombre important d'articles de base dans des revues spécialisées comme les articles de Gosman et al.

(1976), Jones et Whitelaw (1982), Jones (1980), Khalil et al. (1975), Viollet (1986), Smooke et al. (1989) et Maury et Libby (1995).

1.1 Introduction à la combustion

Tels qu'ils se retrouvent dans les applications industrielles, les phénomènes de combustion relèvent de plusieurs disciplines différentes parmi lesquelles viennent en ordre principal la chimie, la thermodynamique et l'aérodynamique des fluides. C'est l'existence de cette connexion interdisciplinaire qui donne à la combustion son caractère aérothermochimique bien particulier.

Afin de situer les différents phénomènes de la combustion dans leur contexte physico–chimique et aérodynamique, nous allons commencer par présenter une description générale de la combustion et de ses multiples manifestations. Suivant les conditions physiques et aérodynamiques, le processus de combustion peut prendre des aspects très différents. Souvent, il commence sous forme d'oxydation lente ou *combustion lente* et lorsque certaines conditions de température, de pression et de composition sont satisfaites, le phénomène se transforme en *combustion vive*, ou simplement combustion.

Illustrons ce phénomène par un exemple. Lorsqu'un mélange de méthane et d'oxygène, dans un rapport stoechiométrique, est porté à une température normale, aucune réaction mesurable ne peut être décelée et aucune évolution des réactifs n'est enregistrée. Le mélange se trouve alors dans un état métastable. Si par contre la température initiale est portée à 200°C, le méthane commence à s'oxyder et la transformation des réactifs initiaux requiert un temps de l'ordre de quelques minutes pour aboutir à

des produits tels l'oxyde de carbone et le gaz carbonique (combustion lente). Toutefois, le mélange peut se comporter tout autrement s'il est porté initialement à une température de l'ordre de 560°C. En effet, après un temps très court où nous assistons à une oxydation lente, la vitesse réactionnelle s'accélère brusquement pour atteindre une valeur très grande, théoriquement infinie (combustion vive).

Si le combustible et le comburant sont parfaitement mélangés au préalable, on parle de *flamme de pré–mélange* et si par contre le phénomène de propagation est contrôlé par la vitesse avec laquelle s'opère par diffusion le mélange des réactifs, on parle de *flamme de diffusion.* À partir du point de mélange, la zone de réaction, au sein de laquelle se déroule les réactions de combustion peut, dans certaines conditions, se propager de proche en proche dans le mélange frais. La zone réactionnelle en propagation est appelée *front de flamme.*

Suivant qu'elle se produit dans un mélange inflammable au repos ou en écoulement laminaire, ou bien dans un mélange turbulent, la combustion se propage à des vitesses différentes: on se trouve alors devant le cas type de l'incidence des conditions aérodynamiques sur la combustion. La connaissance de la nature de l'interaction entre la flamme et la turbulence est d'une grande importance pour la pratique. En effet, dans la quasi–totalité des applications industrielles, la flamme se propage dans des conditions de turbulence plus ou moins prononcées et le contrôle de ces dernières constitue un facteur important dans l'optimisation des procédés.

Les phénomènes de combustion énumérés ci–dessus peuvent théoriquement se produire dans des conditions strictement adiabatiques. En pratique, le confinement dû aux parois solides (parois d'une chambre de combustion, d'une chaudière...) provoque des pertes de chaleur et de recombinaison de radicaux libres; on parle alors de *flamme*

confinée. L'effet du confinement joue éventuellement un rôle important sur l'état final de la combustion, sur la vitesse de propagation de la flamme et sur la longueur et la forme de la flamme. Le confinement impose donc des limites externes au développement de la flamme (Turns (1996)).

1.2 Flammes de diffusion

Lorsque le combustible et le comburant sont mélangés avant leur injection dans la zone de combustion, il s'agit d'une flamme de pré–mélange. Toutefois, ce type de flamme est limité aux chauffages domestiques et à certaines installations industrielles de faible puissance (moins de 300 kW). Cette limite est dictée par la menace d'un éventuel retour de flamme dans les conduites de pré–mélange et du danger d'explosion qui en résulte.

Dans le cas des systèmes de combustion de grande puissance qui constituent la majorité des installations industrielles, le combustible et le comburant sont injectés séparément. La propagation de la flamme est alors gouvernée principalement par les phénomènes d'inter–diffusion (moléculaire ou turbulente) du combustible et du comburant. (Glassman (1977)). On parle alors de flamme de diffusion. Le recours aux flammes de diffusion est aussi motivé par la facilité avec laquelle ce genre de flamme peut être contrôlé (Weinberg (1975)).

Il convient d'observer que les phénomènes de réaction chimique et de diffusion sont régis par les collisions intermoléculaires qui, d'une part, s'opposent à la progression les unes vers les autres des espèces réagissantes mais qui, d'autre part, permettent aux réactions de se produire. Plus précisément le rapport de la vitesse réactionnelle

à la vitesse de diffusion moléculaire est proportionnel au carré de la pression, laquelle varie comme l'inverse du libre parcours moyen λ. Dans les domaines de pression habituellement rencontrés dans les applications, on peut affirmer que la propagation des flammes de diffusion est complètement déterminée par la diffusion, moléculaire ou turbulente, du combustible dans le comburant et vice versa.

L'intérêt pratique des flammes de diffusion en régime laminaire est presque réduit aux flammes de bougies ou de lampes de pétroles. Par contre, les flammes de diffusion confinées en régime turbulent sont à la base d'un grand nombre de systèmes thermochimiques. L'influence de la turbulence sur la structure de la flamme de diffusion, est d'intensifier l'inter–diffusion du combustible et du comburant, en opérant une interpénétration de particules fluides provenant du côté combustible dans la région du comburant et inversement. Ceci augmente considérablement la surface de contact entre le comburant et le combustible, favorisant par là même l'inter–diffusion des réactifs à l'échelle moléculaire (par diffusion moléculaire) qui est la condition de la réaction.

1.3 Aspect aérothermochimique de la combustion

Les écoulements réactifs sont régis par trois aspects complémentaires et distincts. L'aérodynamique des fluides qui est dominée par son caractère turbulent, le transfert de chaleur et les réactions chimiques. Le défi consiste alors à modéliser ces trois aspects tout en tenant compte de leurs interactions mutuelles.

Le premier aspect consiste à résoudre l'écoulement des fluides. Dans ce travail, la formulation en variables primitives (u, v, p) est utilisée et consiste à résoudre l'équation de continuité ainsi que les équations de Navier–Stokes moyennées à densité variable. La turbulence est modélisée par le biais du modèle k–ϵ avec loi de paroi (Rida (1993)).

Toutefois, le système d'équations qui gouverne l'écoulement ne peut être fermé sans le recours à une équation d'état qui spécifie la distribution de la densité. Ceci requiert le calcul de l'enthalpie et la température (second aspect) et donc la détermination des concentrations massiques des produits et du taux de réaction: le taux auquel une espèce chimique est détruite pour en produire d'autres (troisième aspect). L'équation d'état apparaît alors comme étant le dénominateur commun des trois aspects de la combustion.

Dans le cas d'écoulements turbulents isothermes où les propriétés du fluide sont constantes, la qualité de prédiction de l'écoulement repose en majeure partie sur l'efficacité du modèle de turbulence utilisé. Toutefois, lorsque l'écoulement devient réactif, l'aspect thermochimique de la combustion devient aussi prépondérant que son caractère turbulent à cause de la multitude des phénomènes qui s'y attachent. En effet, l'énergie libérée par la réaction chimique entraîne une grande variation des propriétés physiques du fluide dans l'enceinte de combustion ainsi qu'un échange convectif et radiatif avec le milieu ambiant. En outre, la réaction chimique génère un nombre non négligeable de radicaux et d'espèces intermédiaires et la plus grande difficulté consiste alors à prédire les taux de réaction moyens de la réaction. Cette difficulté découle du fait que les modèles de turbulence ne fournissent que des valeurs moyennées alors que le taux de réaction calculé à partir de ces valeurs moyennées est très différent du taux de réaction moyen. Le taux de réaction dépend principalement de la turbulence ou plus précisément du mélange des réactifs qui est fonction du taux de

création et de dégénérescence des tourbillons (§(1.2)). Il devient alors évident qu'une modélisation précise et complète de la combustion doit absolument tenir compte de l'interaction turbulence–combustion. Toutefois cela constitue un des grands obstacles à la formulation d'un système d'équations pour caractériser un écoulement réactif.

Un modèle de combustion est donc un modèle qui permet de modéliser l'aspect thermochimique dans un écoulement turbulent réactif. Si le schéma numérique et le modèle de turbulence permettent de calculer les vitesses, la pression et l'énergie cinétique de turbulence, le modèle de combustion a pour but de calculer la température, la densité, les concentrations massiques des produits, le taux de réaction et plus encore, tenir compte de l'interaction entre la turbulence et la cinétique chimique du problème.

Cependant, les manifestations de la combustion sont très nombreuses et ne peuvent être contenues dans un seul modèle. C'est pourquoi notre étude est restreinte au type de flamme le plus utilisé dans l'industrie et au type de combustible le plus répandu en Amérique du nord. Il s'agit de problèmes qui sont sujets aux conditions suivantes:

- Flamme de diffusion
- Combustible monophasique gazeux
- Absence de transfert de chaleur par radiation
- Géométrie bidimensionnelle ou axisymétrique
- Écoulement turbulent à nombre de Reynolds élevé.

1.4 Écoulements turbulents à densité variable

La turbulence est une propriété de l'écoulement et non du fluide lui–même. Il n'existe pas de définition de la turbulence en milieu fluide, ni d'ailleurs de théorie générale de la turbulence. La turbulence est alors caractérisée par une certain nombre de propriétés observables (signal irrégulier dans l'espace et le temps, écoulement rotationnel, phénomène tridimensionnel, diffusivité et dissipation élevées, coexistence de tourbillons de tailles très diverses, ...).

Le point de vue classique de la turbulence évoque un mouvement tourbillonnaire qui, aux nombres de Reynolds élevés couramment atteints, présente un spectre étendu de dimensions de tourbillons et un spectre correspondant en fréquence. Le mouvement toujours rotationnel peut être conçu comme un enchevêtrement de structures tourbillonnaires dont les vecteurs rotationnels sont orientés dans toutes les directions et sont fortement instationnaires (Schiestel (1993)).

Il n'existe pas de théorie générale explicative du phénomène de turbulence mais de nombreuses théories partielles et incomplètes. Parmi ces théories, certaines, si elles sont très rudimentaires et très limitées, n'en demeurent pas moins utiles à une approche industrielle, d'autres, plus évoluées et plus coûteuse, exigent des développements mathématiques plus importants. Si les approches sont nombreuses et diverses, on distingue pourtant deux grandes approches: directe et statistique.

Le problème avec l'approche directe réside dans le nombre de points de discrétisation nécessaire pour représenter les plus petites échelles de la turbulence qui atteint des valeurs faramineuses. D'après Schiestel (1993), le nombre N^3 de points de maillage nécessaire à un calcul tridimensionnel est proportionnel à $Re_t^{9/4}$ et la résolution d'un

écoulement turbulent en conduite nécessiterait 40 milliards de points!

Une solution turbulente est toujours une solution compliquée non stationnaire des équations du mouvement, présentant des fluctuations irrégulières dans l'espace et dans le temps. Devant cet aspect désordonné des évolutions turbulentes l'attitude naturelle et la plus utilisée a été d'introduire des méthodes statistiques.

1.4.1 Équations moyennes de conservation

En turbulence, l'écoulement est dominé par un caractère désordonné qui fait fluctuer toutes les propriétés du fluide de manière aléatoire. C'est d'ailleurs cet aspect aléatoire qui a dicté l'approche statistique de la turbulence et donné naissance à la décomposition de Reynolds (1895). Cela consiste à décomposer une variable instantanée en valeur locale moyenne $\bar{\phi}$ et en valeur de fluctuation ϕ' de telle sorte que :

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \tag{1.1}$$

Différentes moyennes peuvent être utilisées (temporelle, spatiale, stochastique, statistique ou d'ensemble) pourvu qu'elles vérifient les «règles de Reynolds» (Schiestel (1993)).

Quand il s'agit d'un écoulement à densité variable, la principale caractéristique de l'écoulement réside dans le fait que les équations du champ dynamique et du champ scalaire sont couplées par la densité. Dans le cas où les variations de la densité sont provoquées par une combustion, des interactions turbulentes entre le mouvement fluctuant et la cinétique chimique interviennent également. Ce lien étroit entre les différentes grandeurs qui caractérisent le mouvement nous indique que les variations

de densité influent à la fois sur le champ moyen et sur le champ turbulent, et donc sur toutes les échelles présentes dans l'écoulement (cf. Ruffin (1994) et Aurier (1995) pour une étude détaillée des écoulements turbulents à densité variable).

Pour tenir compte des effets de la variation de la densité, nous avons plutôt recours à une décomposition pondérée par la masse pour toutes les grandeurs extensives en gardant $\bar{\rho}$ et $\bar{p}$ qui sont déjà des grandeurs volumiques (Favre (1965)). Cette moyenne est définie, pour une grandeur ϕ, comme suit:

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \qquad \text{avec} \qquad \phi = \tilde{\phi} + \phi'' \tag{1.2}$$

où $\widetilde{\phi''} = 0$ mais $\overline{\phi''} \neq 0$.

D'un point de vue physique, l'utilisation de cette moyenne est principalement justifiée par le fait qu'une grandeur essentielle pour le mouvement d'un fluide lorsque la densité varie n'est plus simplement la vitesse mais la quantité de mouvement (Favre et al. (1976)). Le grand succès rencontré par la décomposition du mouvement turbulent en moyenne pondérée tient également du fait qu'elle fournit des équations statistiques simples, qui sont pratiquement identiques au cas incompressible, ce qui conduit à utiliser les mêmes modèles de turbulence (Ruffin (1994)). Toutefois, dans le cas de flammes turbulentes sujettes à de forts gradients de pression ou à d'importantes accélérations l'interaction entre la pression et la densité doit être prise en compte et les effets de dilatation doivent être incorporés dans le modèle de turbulence pour une meilleure précision (Borghi (1989), Chomiak et Nisbet (1995)).

En partant de cette décomposition la forme tensorielle des équations qui régissent l'écoulement en régime permanent est donnée par:

Équation de continuité:

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \tag{1.3}$$

Équation de mouvement:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j\right) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{\rho}g_i - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\widetilde{u_i''u_j''}\right) \tag{1.4}$$

avec

$$\bar{\tau}_{ij} = \mu\left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i}\right) + \frac{2}{3}\mu\,\delta_{ij}\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k}$$

et les flux $\bar{\rho}\widetilde{u_i''u_j''}$ sont appelés tensions de Reynolds.

Équation de conservation d'un scalaire:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\phi}\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\Gamma_\phi\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(-\bar{\rho}\widetilde{u_j''\phi''}\right) + \bar{\rho}\tilde{S}_\phi \tag{1.5}$$

Il reste donc à trouver des lois pour ces nouveaux flux de turbulence ($\bar{\rho}\widetilde{u_i''u_j''}$, $\bar{\rho}\widetilde{u_j''\phi''}$), tout comme il a fallu en trouver pour les flux de diffusion moléculaire, faute de quoi les nouvelles équations de bilan sont inutilisables.

1.4.2 Modèle de turbulence

Du fait de la non linéarité des termes de convection, la procédure de la moyenne génère des corrélations d'ordre deux qui peuvent être calculées à partir de leurs équations de transport. Malheureusement ces équations font apparaître des corrélations triples et ainsi de suite, nous obtenons une hiérarchie indéfinie d'équations. La procédure de fermeture s'impose et consiste à couper cette chaîne à un certain niveau qui constitue l'ordre du modèle. Cette approche qui a été introduite par Rotta (1951) puis développée et améliorée par Launder et al. (1975), ne sera pas utilisée dans cette étude.

La modélisation des tensions de Reynolds est effectuée en ayant recours au concept de la viscosité turbulente introduit par Boussinesq (1877). Ce concept stipule que les contraintes turbulentes sont alignées sur le tenseur des taux de déformation de l'écoulement moyen suivant une constante de proportionnalité appelée viscosité turbulente:

$$\bar{\rho}\widetilde{u_i''u_j''} = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}\right) + \frac{2}{3}\bar{\rho}\,\delta_{ij}k + \frac{2}{3}\bar{\rho}\,\delta_{ij}\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \tag{1.6}$$

$$\bar{\rho}\widetilde{u_j''\phi''} = -\frac{\mu_t}{\sigma_\phi}\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j} \tag{1.7}$$

où $k = \frac{1}{2}\widetilde{u_i''u_j''}$ est l'énergie cinétique de turbulence et μ_t est la viscosité turbulente qui s'écrit dans le cadre du modèle $k-\epsilon$:

$$\mu_t = \bar{\rho}\,C_\mu\,\frac{k^2}{\epsilon} \tag{1.8}$$

Le choix du modèle $k-\epsilon$ standard (Jones et Launder (1972)) a été dicté par l'attrait de son rapport temps de calcul sur la qualité des résultats. Ce modèle est un moyen classique, validé par les expériences et commode à utiliser. Il est une des retombées pratiques des études effectuées depuis près d'un siècle sur la turbulence. Ses prédictions sont dans la majorité des cas satisfaisantes (Chieng et Launder (1980) et Maury et Libby (1995)). En outre, malgré les difficultés reliées à la simulation des écoulements à forts taux de cisaillement où la viscosité turbulente n'est plus isotrope, le recours à d'autres modèles plus complexes et plus coûteux demeure injustifiable dans le contexte d'une approche industrielle.

Toutefois, Le modèle $k-\epsilon$ a souvent été blâmé pour son inefficacité à modéliser certains types d'écoulements et ses capacités ont été injustement mises en cause. Le modèle $k-\epsilon$ présente effectivement des limites reliées à la physique des phénomènes de turbulence, mais certains problèmes sont plutôt d'ordre numérique. Il s'agit entre autres de l'incapacité de certains schémas d'assurer la positivité des variables k et ϵ.

En effet, la préservation de la positivité des variables de turbulence présente un défi sérieux quand il s'agit de résoudre des écoulements confinés complexes ou des écoulements externes qui impliquent des problèmes de séparation sur des géométries irrégulières. Plusieurs techniques ont été développées pour traiter ce problème de positivité. Toutefois, des méthodes comme les opérateurs de *clipping*, les schémas *upwind* spéciaux ou les schémas de discrétisation qui permettent de préserver la positivité sont des techniques ad hoc qui présentent des inconvénients sérieux pouvant nuire à la convergence et la précision de la solution (Ilinca et al. (1996)).

Pour pallier ce problème de manière plus formelle et assurer la positivité des variables turbulentes sans altérer la solution, il est possible de résoudre leurs logarithmes

($\hat{k} = ln(k)$ et $\hat{\epsilon} = ln(\epsilon)$) puisque k et ϵ sont positives par définition (Garon (1995)). Le choix particulier de cette transformation de variables parmi tant d'autres est justifié par le comportement des variables k et ϵ qui ont tendance à évoluer sur plusieurs échelles de grandeur et à présenter des changements très rapides. Le fait que le logarithme croit plus lentement que ses arguments contribue à améliorer la précision des solutions là où les variables k et ϵ sont sujettes à de forts gradients.

1.4.3 Loi de paroi

Les effets d'une paroi sur le champ turbulent sont nombreux et complexes. Au voisinage de la paroi, la turbulence revêt un caractère fortement anisotrope et non homogène. Les échelles de longueur sont réduites, les gradients sont intenses et il y a création d'une zone adjacente à la paroi dans laquelle la viscosité moléculaire est dominante.

Le calcul détaillé de ce genre de comportement nécessite l'introduction de points de discrétisation en nombre élevé. Une méthode pratique pour pallier cet inconvénient est de faire un raccordement à une loi universelle. Dans les cas usuels de couche limite sur plaque plane, la loi logarithmique de vitesse est utilisée (Patankar et Spalding (1970)). Dans les cas plus généraux, avec recirculation, ou dans les écoulements tridimensionnels le problème n'est pas résolu de manière satisfaisante étant donné qu'il n'existe plus de loi universelle.

L'approche des fonctions de paroi est donc une approche économique. Elle permet l'emploi de maillages de calcul très lâches. Elle a surtout été adaptée dans le cadre des méthodes de volumes finis. Schiestel (1993) et Wilcox (1993) présentent une étude

complète des différentes formulations de loi de paroi.

Une hypothèse est souvent nécessaire sur l'expression du profil de vitesse moyenne en fonction de la distance à la paroi. La tension de cisaillement totale peut être supposée constante dans l'épaisseur de la couche de paroi (Autret et al. (1987), Chung (1993) et Schiestel (1993)). Dans ces conditions, il existe un profil de vitesse universel dans lequel on distingue une zone visqueuse et zone de loi logarithmique séparées par une zone de transition appelée zone tampon.

1.5 Modèles de combustion

Trois grandes approches ont été utilisées pour étudier les écoulements turbulents réactifs: la simulation numérique directe, la méthode des Vortex, et la modélisation. L'approche directe a été limitée aux écoulements à bas nombres de Reynolds avec chimie simple (Givi et al. (1988)). Si la méthode des Vortex a permis de réduire les problèmes de diffusion numérique et a été fréquemment utilisée dans le cas d'écoulements à haut nombres de Reynolds, son application reste limitée à la combustion avec chimie infiniment rapide (Ghoniem (1986)).

La troisième approche a été, par contre, largement utilisée ces trente dernières années et a engendré différents modèles de combustion que nous allons présenter par la suite. La modélisation de la combustion et son interaction avec la turbulence a été largement discutée dans Ramos (1989) et Borghi et Destriau (1995). On peut aussi trouver des détails pertinents dans Jones (1980), Borghi (1985), Jones et Whitelaw (1982) et Libby et Williams (1980).

1.5.1 Interaction turbulence–combustion: taux de réaction

La fraction massique moyenne $\widetilde{m}_i$ de l'espèce chimique i satisfait à l'équation de bilan générale:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{m}_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\widetilde{m}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}(-\bar{\rho}\widetilde{u_j''m_i''}) + \bar{\rho}\tilde{R}_i \tag{1.9}$$

Toutefois cette équation ne peut être utilisée tant que $\tilde{R}_i$ n'est pas connu. Dans ce qui suit, nous allons illustrer la complexité de ce terme dans le cas d'une réaction de combustion simple.

On considère axiomatique le fait que les atomes et les molécules ne peuvent réagir que s'ils entrent en collision. La loi d'action de masse stipule que le taux de collisions atomiques ou moléculaires devrait être proportionnel au nombre par unité de volume des espèces en collision Par exemple, dans le modèle simple de combustion à trois composantes:

$$X + Y \longrightarrow XY \tag{1.10}$$

le taux de réaction ou le taux de formation doit être proportionnel à $\rho^2 m_X m_Y$. On définit alors le taux de réaction R par :

$$R = k_s\, \rho^2\, m_X\, m_Y \tag{1.11}$$

où k_s est la «constante» spécifique de la réaction. Le comportement empirique de cette constante de réaction en fonction de la température peut être modélisé par la

loi exponentielle:

$$k_s = A\, e^{-B/T} \tag{1.12}$$

où A est appelé facteur de fréquence ou facteur pré–exponentiel. Des justifications précises de cette loi expérimentale sont données par la théorie cinétique des gaz. On préconise pour B la valeur E/R où E représente l'énergie d'activation. E est aussi considérée comme étant l'énergie minimale requise pour transformer une collision en une réaction. La loi exprimée par la relation (1.12) avec $B = E/R$ est appelée loi d'Arrhenius (1889).

Le principal problème relié à l'utilisation de cette loi réside dans la profonde non–linéarité qui apparaît lorsqu'il s'agit de modéliser l'influence de la turbulence sur la réaction. En effet, le calcul du taux de réaction moyen $\widetilde{R}_i$ d'une espèce chimique i se fait en fonction des concentrations massiques instantanées m_i et non à partir des concentrations massiques moyennes $\widetilde{m}_i$ car cela conduirait, selon Jones et Whitelaw (1982), à des erreurs considérables:

$$\widetilde{R}_i \neq R_i(\widetilde{m}_1, \ldots, \widetilde{m}_N, \widetilde{T}, \bar{\rho}) \tag{1.13}$$

Or, le taux de réaction instantané peut être exprimé en fonction des grandeurs moyennes et des fluctuations comme suit:

$$R = (\bar{k}_s + k_s')\,(\bar{\rho} + \rho')\,(\overline{m}_X + m_X')\,(\overline{m}_Y + m_Y') \tag{1.14}$$

Ce qui après quelques manipulations algébriques conduit à la forme:

$$R = A\,\bar{\rho}^2 \overline{m}_X \overline{m}_Y\, e^{-E/R\overline{T}}\,(1+\Upsilon) \tag{1.15}$$

où Υ est un terme extrêmement non–linéaire qui représente l'influence de la turbulence sur le taux de réaction (Khalil (1982)). Il est donné par:

$$\Upsilon = a_0 \frac{\overline{m'_X m'_Y}}{\overline{m}_X \overline{m}_Y} + a_1 \frac{\overline{T'^2}}{\overline{T}^2} + a_2 \left(\frac{\overline{T' m'_X}}{\overline{T}\,\overline{m}_X} + \frac{\overline{T' m'_Y}}{\overline{T}\,\overline{m}_Y} \right) \tag{1.16}$$

avec

$$a_0 = 1 \qquad a_1 = \frac{1}{2}\left(\frac{E}{R\overline{T}}\right)^2 - \frac{E}{R\overline{T}} \qquad a_2 = \frac{E}{R\overline{T}} \tag{1.17}$$

Dans l'équation (1.16), les corrélations doubles de la forme $\overline{T' m'_i}$ sont elles–mêmes fonction de corrélations d'ordre supérieur ce qui rend le problème de fermeture difficilement résolvable. C'est d'ailleurs dans le but de contourner les difficultés engendrées par la modélisation du terme Υ dans le calcul du taux de réaction moyen que les divers modèles de combustion ont été élaborés.

1.5.2 Modèle à chimie infiniment rapide

Le modèle à chimie infiniment rapide suppose que la réaction est tellement rapide par rapport aux mécanismes de mélange que le combustible et l'oxydant ne peuvent coexister au même endroit et que les réactifs réagissent selon un mécanisme de combustion complète en proportions stoechiométriques aussitôt qu'ils sont mélangés. Partant de cette supposition, Williams (1965) a établi qu'une combinaison linéaire

des équations de conservation du combustible et de l'oxydant permet d'aboutir à une équation strictement conservée – sans terme source – où il n'est plus nécessaire d'évaluer les taux de réaction.

Par conséquent, dans ce modèle, l'état thermochimique du mélange des espèces est déterminé par la résolution d'une seule équation de transport en l'occurrence, l'équation de conservation du taux de mélange f. Ainsi, en supposant que toutes les espèces en présence ont le même coefficient de diffusion, les fractions massiques instantanées satisfont l'équation de bilan instantanée usuelle et f satisfait à une équation sans terme de réaction:

$$\frac{\partial(\rho f)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j f) = \frac{\partial}{\partial x_j}\Gamma_f \frac{\partial f}{\partial x_j} \tag{1.18}$$

La détermination de f permet de connaître toutes les fractions massiques des espèces présentes.

L'avantage de cette méthode réside dans sa facilité et rapidité de convergence puisque l'équation de transport du taux de mélange ne contient pas de terme source. Elle permet de déterminer les principales espèces de la réaction, de calculer un champ de température réaliste en plus de prédire la forme et la longueur de la flamme. Elle permet aussi de donner l'allure de l'écoulement, et ce à un coût relativement bas. C'est le modèle le plus simple.

En revanche, ce modèle ne tient pas compte de la dissociation et ne permet pas l'existence d'autres espèces que CO_2 et H_2O dans les produits. De plus, quand le mélange est riche, le CO est généralement présent ce qui affecte la précision des concentrations des espèces et surestime la quantité de combustible non–brûlé. En

outre, en négligeant les fluctuations turbulentes, ce modèle suppose que le combustible et l'oxydant ne peuvent coexister au même endroit pour un instant donné ce qui est contredit par les observations expérimentales.

Ce modèle fut utilisé par Spalding (1971b), Lockwood et Naguib (1975) et Bilger (1975) dans la prédiction de flammes de diffusion. Des applications récentes du modèle par différentes méthodes numériques ont été réalisées par Kim (1987) en éléments finis, par McKenty (1992) en volumes finis avec la formulation vorticité–courant, et par Liu et al. (1993) en volumes finis avec l'approche *multigrid*.

1.5.3 Pondération

Dans les conditions de chimie infiniment rapide, la variable f peut être vue comme la fraction massique d'une espèce inerte subissant uniquement les phénomènes de convection et diffusion, dans un écoulement turbulent (non isotherme). On peut considérer que f représente un «traceur» injecté dans l'écoulement en très faible concentration de manière à ne pas modifier celui–ci. Ce traceur subit uniquement les phénomènes physiques turbulents et est contrôlé seulement par ceux–ci.

Si l'on est capable de bien modéliser la turbulence, on doit être capable de connaître f aussi parfaitement que possible. Puisque f est une variable instantanée dans un écoulement turbulent, la connaissance la meilleure que l'on puisse en avoir est la connaissance de $P(f, \rho)$, la densité de probabilité associée à f et ρ, partout dans l'écoulement.

Ainsi, si nous connaissons $P(f,\rho)$, il est possible de calculer les fractions massiques moyennes $\widetilde{m}_i$, et sans utiliser $\widetilde{R}_i$:

$$\widetilde{m}_i = \int_f m_i(f)\,\widetilde{P}(f)\,df \tag{1.19}$$

où d'après Borghi et Destriau (1995):

$$\begin{aligned} \widetilde{P}(f) &= \frac{1}{\bar{\rho}}\int_\rho \widetilde{\rho P}(f,\rho)\,d\rho \\ \bar{\rho} &= \int_f\int_\rho \rho P(f,\rho)\,df\,d\rho \end{aligned} \tag{1.20}$$

La solution du problème dans ce cas–ci se ramène au calcul de $\widetilde{P}(f)$. Il est intéressant de mentionner que cette méthode peut se généraliser au cas de multiples réactions chimiques réversibles, comme indiqué pour la première fois par Bilger (1975).

Le calcul d'une flamme turbulente nécessite donc le calcul de la fonction de densité de probabilité $\widetilde{P}(f)$. La forme exacte de la fonction de densité de probabilité n'étant pas connue, la solution la plus simple consiste à se donner a priori une forme de $\widetilde{P}(f)$ en ajustant en chaque point les paramètres de cette loi en supposant connues la moyenne $\tilde{f}$ et la variance $g = \widetilde{f''^2}$. Plusieurs formes ont été suggérées comme les fonctions Delta de Spalding (1971a), les lois gaussiennes tronquées de Lockwood et Naguib (1975) ou les fonctions Beta de Richardson et al. (1953) et de Rhodes (1975).

Toutefois, les méthodes les plus satisfaisantes proposent une nouvelle équation de bilan pour $\widetilde{P}(f)$ elle–même. Cette approche, préconisée par Pope (1976) et Lewis et Moss (1978), reste extrêmement coûteuse et s'applique surtout aux flammes de pré–mélange qui ne constituent pas le centre d'intérêt de cette étude. O'Brien et Dopazo

avaient déjà établi en 1974 (Libby et Williams (1980)) l'équation de transport suivante pour $P(f)$.

$$\frac{\partial(\rho P(f))}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{u}_j P(f)) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho\Gamma\frac{\partial P(f)}{\partial x_j}\right) + \frac{\partial}{\partial f}\left(\rho\frac{C_D}{\tau_t}(\bar{f}-f)P(f)\right) \quad (1.21)$$

où τ_t est le taux de mélange turbulent et C_D une constante. L'équation (1.21) est valable dans le cas où ρ est constante mais peut être généralisée en faisant apparaître $\bar{\rho}$, $\widetilde{P}(f)$ et $\tilde{u}_i$.

Quelle est donc l'importance de tenir compte des fluctuations dans une méthode comme celle de chimie infiniment rapide? L'accord entre les calculs et l'expérience ne serait–il pas quand même bon? Il faut pour cela se rappeler que l'existence en un même endroit du combustible et de l'oxydant, dans le cas de chimie infiniment rapide, ne peut être justifiée que par la présence de fluctuations déphasées de ces deux espèces. En revanche, si les fluctuations sont négligées, l'hypothèse de chimie infiniment rapide devient caduc.

En outre, le fait de tenir compte des fluctuations entraîne une diminution de la température moyenne du fait de l'existence de réactifs imbrûlés. La figure (1.1) montre la différence entre la présence et l'absence de fluctuations dans un cas de combustion de méthane dans l'air par chimie infiniment rapide. Un rapport de $\widetilde{f''^2}/\tilde{f} = 0.02$ a été supposé. Nous remarquons que négliger les fluctuations entraîne une erreur sur la température maximale de l'ordre de 20%.

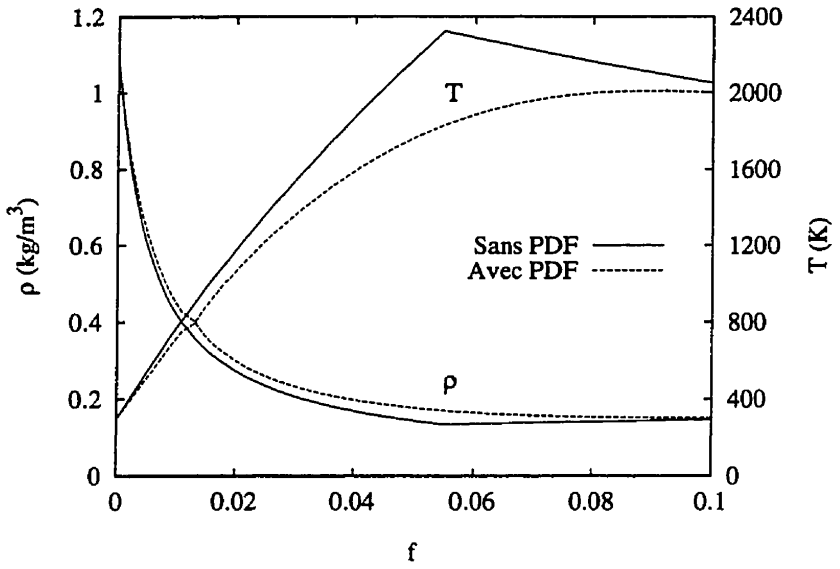


Figure 1.1: Influence des fluctuations turbulentes sur la température et la densité, Calcul de la combustion du méthane dans l'air qui suppose une quantité de fluctuations de f: $\widetilde{f''^2}/\tilde{f} = 0,02$.

1.5.4 Modèle à taux de réaction fini

L'approche de chimie infiniment rapide avec pondération (connue en anglais sous le nom de *conserved scalar method*, car f est une grandeur scalaire conservée) permet d'introduire tous les détails de la turbulence, mais elle est assez lourde à mettre en oeuvre, principalement à cause du calcul de $\widetilde{P}(f)$. Par conséquent, une méthode plus heuristique a été introduite par Magnussen (1975), qui ressemble à celle du modèle d'*Eddy Break Up* (Spalding (1971a)) pour les flammes turbulentes pré–mélangées.

Magnussen a proposé en 1975 une méthode pour appliquer des taux de réactions finis pour les flammes de diffusion turbulentes. Elle est basée essentiellement sur le fait que $\widetilde{R}_i$ doit être contrôlé par le taux de mélange turbulent τ_t. De plus pour assurer que $\widetilde{R}_i$ est nul lorsque $\widetilde{m}_{fu}$ ou $\widetilde{m}_{ox}$ est nulle, le taux de réaction moyen a été défini

par:

$$\widetilde{R}_i = -C_{Mg}\frac{\widetilde{m}_i^0 - \widetilde{m}_i}{\tau_t} min|\widetilde{m}_{fu}, \widetilde{m}_{ox}| \tag{1.22}$$

La constante C_{Mg} est empirique, τ_t est déterminé en résolvant les équations de la turbulence usuelles. Le taux de réaction moyen est alors incorporé dans l'équation de transport de $\widetilde{m}_i$:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{m}_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\widetilde{m}_i) = +\frac{\partial}{\partial x_j}(-\bar{\rho}\widetilde{u_j''m_i''}) + \bar{\rho}\widetilde{R}_i \tag{1.23}$$

Comme le modèle de chimie infiniment rapide a tendance à sous–estimer la consommation de combustible dans la zone de réaction, Hjertagger et Magnussen (1982) ont proposé un modèle où il s'agit de résoudre deux équations de transport, l'une pour f et l'autre pour $\widetilde{m}_{fu}$. Le taux de réaction moyen $\widetilde{R}_{fu}$ a été modélisé à partir de (1.22) dans le contexte du modèle $k-\epsilon$ par:

$$\widetilde{R}_{fu} = -\frac{\widetilde{m}_{fu,b}}{\widetilde{m}_{fu} + \widetilde{m}_{fu,b}} A_{R_{fu}} \frac{\epsilon}{k} \cdot min\,|\widetilde{m}_{fu}, \frac{\widetilde{m}_{O_2}}{s}| \tag{1.24}$$

où $A_{R_{fu}}$ est une constante empirique dépendante de la nature de l'écoulement.

1.5.5 Modèle d'équilibre chimique

Le modèle de chimie infiniment rapide est limité à la prédiction de CO_2 et H_2O et ne peut pas tenir compte de la dissociation. Toutefois, le recours à une approche plus réaliste, où la chimie n'est pas réduite à une réaction unique irréversible à vitesse infiniment rapide, peut engendrer deux complexités: 1) le fait que de nombreuses réac-

tions réversibles soient en présence et 2) que leurs vitesses ne soient pas suffisamment rapides pour atteindre l'équilibre.

La méthode d'équilibre chimique a été introduite pour contourner le premier problème. Elle repose sur le fait que, pour les flammes de diffusion turbulentes, le taux de réaction est beaucoup plus rapide que le taux de mélange de telle sorte que l'équilibre chimique est supposé atteint localement (Bilger (1980)). De plus, l'hypothèse de l'égalité de tous les coefficients de diffusion reste maintenue. En effet, si l'équilibre chimique est réalisé partout, la composition locale de l'écoulement peut être calculée en fonction de f, T et P, quelle que soit l'espèce i (Borghi et Destriau (1995)):

$$m_i = m_i(f, T, P)_{\text{équilibre}} \tag{1.25}$$

Pour le calcul de l'équilibre chimique en soi, la méthode la plus fiable est selon Jones et Whitelaw (1982) la minimisation de l'énergie libre de Gibbs. Gordon et McBride (1971) ont établi un programme numérique basée sur cette approche qui a été largement utilisé dans la communauté scientifique (Kent et Bilger (1976), Jones et Whitelaw (1984) et Weng et Chen (1988)). Dans son livre, Heywood (1986) donne aussi une bonne description de la méthode.

En fait, l'hypothèse de réaction unique infiniment rapide est utilisée comme une première approximation de l'équilibre chimique, qui permet de calculer à peu près correctement les profils des espèces majoritaires et de la température. L'hypothèse de l'équilibre chimique en tout point peut fournir en plus un calcul des espèces minoritaires O, OH, H et permet une meilleure précision sur le calcul de la température et des espèces majoritaires. Une meilleure précision peut aussi être obtenue en tenant compte des fluctuations via une pondération par fonction de densité de probabilité.

1.5.6 Modèle de flammelettes ou micro–flammes

Dans le modèle de flammelettes la flamme de diffusion turbulente est modélisée par un ensemble de flammelettes laminaires. En effet, selon Bray (1976), la flamme de diffusion turbulente n'est pas formée d'un mélange homogène de réactifs mais d'un ensemble de flammelettes de mélange pauvre et riche qui se propagent et interagissent dans une mince zone de diffusion–réaction. Par ailleurs, d'après Borghi et Destriau (1995) lorsque la turbulence n'est pas trop forte, la flamme de diffusion turbulente est constituée d'une longue flammelette continuellement plissée étirée et comprimée alternativement par les mouvements turbulents. Quand la turbulence augmente d'intensité, elle peut engendrer des extinctions locales dues à l'étirement de la flammelette plissée et la flamme turbulente prend la forme de plusieurs flammelettes séparées par des zones d'extinction. Toutefois, une turbulence trop forte risque de provoquer de nombreuses interactions à grande échelle qui peuvent changer la structure de la flamme(Rogg et al. (1986)). C'est pourquoi la modélisation de la flamme de diffusion turbulente par un ensemble de flammelettes laminaires a été limitée aux écoulements à haut nombre de Damköhler (τ_t/τ_c) c'est–à–dire lorsque les phénomènes chimiques sont très rapides devant les phénomènes d'écoulement turbulent: $\tau_c \ll \tau_t$.

Williams (1975) a été parmi les premiers à explorer ce modèle. le principe de la méthode consiste à effectuer des calculs de flamme de diffusion laminaire avec une chimie détaillée pour générer une librairie dans laquelle les fractions massiques et la température sont données en fonction du taux de mélange f et un autre paramètre qui décrit le taux d'étirement. Liew et al. (1981) ont construit leur librairie en se basant sur les mesures de Mitchell et al. (1980) pour la combustion du méthane dans l'air. Quant à Askari-Sardhai et al. (1985) et Peters et Kee (1987), ils ont constitué

leurs librairies de la combustion par un calcul complexe de l'équilibre partiel.

Pour quantifier l'étirement local des flammelettes, deux paramètres peuvent être utilisés: le taux de dissipation ou le taux de déformation. En théorie, c'est le taux de dissipation qui représente correctement l'étirement local (Peters (1986)). Cette approche a été utilisée par Liew et al. (1984) pour la combustion du méthane dans l'air et plus récemment par Sanders et al. (1997) pour prédire la formation des NO_x dans une flamme de diffusion d'hydrogène. Toutefois d'autres études semblent indiquer que l'utilisation du taux de déformation est plus appropriée (Bray et Peters (1993), Müller et al. (1994)).

Par ailleurs, McKenty (1992) a établi une librairie pour son modèle de micro–flammes (ou flammelettes) à partir des résultats de Mitchell et al. (1980). Les fractions massiques et la température ont été tabulées uniquement en fonction du taux de mélange alors que les effets d'étirement et donc de turbulence ont été introduit en utilisant des fonctions de densité de probabilité. Ce modèle donne de meilleures prédictions que le modèle d'équilibre chimique pour le cas du CO et du H_2 mais son application reste limitée aux données expérimentales et aux espèces disponibles dans la librairie.

1.5.7 Modèle hybride

Un aspect important de la simulation des phénomènes de combustion peut être la prédiction des émissions des polluants. Parmi les causes principales de pollution produite par la combustion, on distingue celles qui se produisent que la combustion soit complète ou non (CO_2) et celles qui sont dues à des combustions incomplètes du seul fait de la réalisation d'équilibres chimiques (CO) (Borghi et Destriau (1995)).

La combustion complète de tout composé carboné doit donc conduire à la production de CO_2. L'étape déterminante dans cette émission est la réaction:

$$CO + OH \rightleftharpoons CO_2 + H \tag{1.26}$$

En effet dans la combustion d'hydrocarbures, CO est oxydé presque exclusivement par OH pour former CO_2. La réaction inverse est aussi importante puisqu'elle sert à établir l'équilibre gaz–eau (Gardiner (1984) et Seshadri et Ilincic (1995)). Toutefois, La réaction (1.26) est connue pour être lente et représente un des goulots d'étranglement de la combustion d'hydrocarbures. Son taux de réaction lent ralenti l'oxydation en CO_2 qui est à l'origine de la majeure partie de la chaleur dégagée (Peters et Kee (1987)). D'autres réactions d'oxydation de CO comme la réaction trimoléculaire:

$$CO + O + M \rightleftharpoons CO_2 + M \tag{1.27}$$

sont beaucoup trop lentes pour être considérées (Gardiner (1984) et Borghi et Destriau (1995)).

Or, dans le modèle de réaction infiniment rapide, la formation de CO est complètement négligée alors que dans le modèle d'équilibre chimique la concentration de CO est surestimée puisqu'on suppose que l'équilibre est atteint alors que le taux de réaction dans (1.26) n'est pas assez rapide pour respecter cette hypothèse. Par conséquent, il devient nécessaire de tenir compte de la cinétique de réaction pour mieux prédire les émissions de CO (Bockhorn et Lutz (1984)).

Plusieurs mécanismes ont été établis pour tenir compte de la cinétique de réaction dans la combustion des hydrocarbures. Dans un document fondamental, Gardiner (1984) présente une revue complète des mécanismes réactionnels avec les taux de réaction correspondants pour plusieurs systèmes de combustion incluant les systèmes $C/H/O$ et $N/H/O$. En outre, Westbrook et Dryer (1981) ont fait une étude comparative de différents mécanismes réactionnels d'hydrocarbures en partant d'un mécanisme simpliste à une seule étape où seuls CO_2 et H_2O font partie des produits pour aboutir à un mécanisme complet à plusieurs étapes où la réaction de base, en l'occurrence celle des paraffines:

$$C_nH_{2n+2} + \frac{n}{2}O_2 \rightarrow nCO + (n+1)H_2 \tag{1.28}$$

a été combinée à 21 réactions élementaires impliquant le mécanisme $H_2 - O_2 - CO$. Il en découle que l'introduction d'espèces intermédiaires comme CO ou H_2 et le recours à des mécanismes détaillés permettent une plus grande précision dans la composition et la température du mélange mais demeurent chers en temps de calcul. Par ailleurs, Hautman et al. (1981) proposent un mécanisme réactionnel à quatre étapes pour les paraffines où il s'agit, dans un premier temps, de casser la molécule du combustible C_nH_{2n+2} en C_2H_4 et H_2 puis d'oxyder l'éthylène pour former CO et H_2 et enfin les deux dernières étapes:

$$2CO + O_2 \rightarrow CO_2 \tag{1.29}$$

$$2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O \tag{1.30}$$

Ce mécanisme a été validé pour le propane et d'autres hydrocarbures excepté l'éthane et le méthane.

Pour le méthane Warnatz et Maas (1993) présentent un mécanisme C_1/C_2 détaillé incluant 100 réactions élémentaires et 27 espèces alors que Glarborg et al. (1992) réduisent ce mécanisme à 50 réactions et 19 espèces en excluant les chaînes C_2 et recommandent son utilisation pour les mélanges à richesse modérée ($\varphi < 1,4$). Ces deux mécanismes ont d'ailleurs été appliqués avec succès par Magel et al. (1996) pour la simulation d'une flamme de diffusion turbulente dans un brûleur de 400kW. L'importance de la chaîne C_2 s'est révélée insignifiante. Toutefois, Peters et Kee (1987) démontrent qu'un mécanisme à quatre étapes est en mesure de fournir les propriétés essentielles de la flamme de diffusion, comme la structure et les limites d'extinction, de la même manière qu'un mécanisme complet à 18 réactions qui exclut les chaînes C_2. Des hypothèses d'état stationnaire pour certains radicaux (OH, O, HO_2, CH_3, CHO et CH_2O) et d'équilibre partiel ont été nécessaires pour aboutir à cette simplification. Une année plus tard, ce mécanisme a été encore réduit par Seshadri et Peters (1988) à un mécanisme à trois étapes en supposant que la concentration de l'atome H est aussi en état stationnaire.

$$\begin{aligned} &CH_4 + O_2 \rightarrow CO + H_2 + H_2O && (1) \\ &2H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2H_2O && (2) \\ &CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2 && (3) \end{aligned} \tag{1.31}$$

Ce mécanisme à trois étapes a ensuite été utilisé par Chan et al. (1995) dans le cas du modèle des flammelettes pour la prédiction d'une flamme de diffusion CH_4–Air avec radiation puis repris par Seshadri et Ilincic (1995) pour prédire la structure et les conditions critiques d'extinction de la flamme de diffusion méthane–air. Toutes ces études s'entendent sur le fait que le taux de réaction de la réaction d'oxydation de CO en CO_2 (3) est contrôlé presque entièrement par la réaction exothermique

(1.26). Plus récemment, Hamer et Roby (1997) ont greffé un modèle simplifié à deux étapes au logiciel commercial STAR–CD pour la simulation de la flamme de diffusion CH_4–Air dans une turbine à gaz. Les prédictions de CO ont été satisfaisantes à la sortie de la turbine alors qu'ailleurs dans le domaine, les prédictions ont été de 3 à 15 fois plus grandes que les mesures expérimentales à cause du refroidissement à la paroi qui provoque le phénomène de trempe chimique.

Dans notre approche, on utilise un mécanisme à trois étapes mais en combinant cinétique chimique pour les réactions lentes et équilibre chimique pour les réactions très rapides. Dans le cas du méthane, ce mécanisme est donné par:

$$\begin{aligned} &CH_4 + 0,5O_2 \rightarrow CO + 2H_2 && (I) \\ &2H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2H_2O && (II) \\ &2CO + O_2 \rightleftharpoons 2CO_2 && (III) \end{aligned} \tag{1.32}$$

La réaction (I) permet de casser la chaîne du combustible, en l'occurrence le CH_4. Cela permet de déterminer la concentration de combustible non brûlé pour ensuite déduire celles du CO et du H_2. Les réactions (II) et (III) sont à des échelles de temps très différentes. En effet, la réaction (II) est très rapide et nous proposons d'utiliser un équilibre chimique pour la modéliser, un équilibre où la concentration de CO sera bien entendu figée. Cet équilibre nous permettra en outre de déduire les concentrations de radicaux comme OH et H qui sont nécessaires à la détermination du taux de réaction de l'oxydation de CO en CO_2. Dans le paragraphe (2.3.5), nous présentons le processus détaillé de ce mécanisme réactionnel.

1.6 Modèle numérique

La forte non linéarité des équations de mécanique des fluides couplée à celles des modèles de turbulence et de combustion fait appel aux méthodes numériques pour la résolution du système d'équations résultant. Il devient donc évident que la précision du modèle numérique utilisé pour résoudre les problèmes de convection–diffusion va être déterminante pour la qualité des résultats en combustion.

Le premier outil de simulation numérique de la combustion a été celui de Gosman et al. (1969). Ce modèle, basé sur la méthode des volumes finis, et qui utilisait une formulation vorticité–courant avait son lot de problèmes: diffusion numérique et limitation aux géométries simples.

L'algorithme SIMPLE de Patankar et Spalding (1972), basé sur la méthode des volumes finis, a permis le recours à une formulation en variables primitives (u,v,p) et a été largement utilisé par la suite dans la simulation numérique de la combustion. Toutefois, l'algorithme SIMPLE appliqué à des maillages cartésiens nécessite l'utilisation de maillages décalés (*staggered grids*) pour éviter les problèmes de pression en damier (Patankar (1980)). Cette restriction a donc limité l'utilisation de la méthode à des géométries simples.

Utiliser des maillages décalés est équivalent à satisfaire la condition de Ladyzhenskaya–Babuska–Brezzi dans le contexte des éléments finis lorsque des interpolations d'ordres différents sont utilisées pour les champs de pression et de vitesse. Initialement introduite par Harlow et Welch (1965) sur des maillages cartésiens, cette approche a connu plusieurs variantes en fonction de l'emplacement des variables. Ces variantes ont été largement étudiées et comparées à des schémas colloqués équivalents par

Shih et al. (1989). L'application de ces schémas à des géométries d'intérêt pratique, donc irrégulières, a soulevé la nécessité d'une extension à des maillages curvilignes en utilisant les transformations adéquates. Plusieurs auteurs ont cependant préféré se tourner vers les schémas colloqués pour éviter la complexité de la structure des données engendrée par les schémas décalés (Schneider et Raw (1987)).

Le traitement de géométries complexes avec éventuellement le recours à l'adaptivité ou aux maillages mobiles, a mené inéluctablement à l'utilisation de maillages non structurés. Toutefois, pour ce type de maillage, le problème de couplage vitesse–pression est demeuré présent et les approches qui ont été rapportées traitaient surtout le cas de schémas colloquées (Rhie et Chow (1982)). Plus récemment, une extension de la méthode de correction de pression a été appliquée aux maillages non structurés mais toujours avec des schémas colloqués (Thomadakis et Leschnizer (1996) et Davidson (1996)).

Le recours aux maillages décalés non structurés a été rapporté pour la première fois par Nicolaïdes (1993) qui a utilisé une méthode des co–volumes basée sur un maillage de Voronoi–Delaunay. Toutefois, avec ce type de maillage, l'élancement des mailles est limité. Pour pallier cette contrainte, un schéma de volumes finis a été développé afin d'élargir l'application des maillages décalés non structurés à des cas avec des élancements importants (Rida (1993) et Meng (1994)). C'est la méthode que nous utiliserons dans cette étude.

Dans ce schéma, le champ de vitesse et de pression ont des volumes de contrôle différents. Mais à l'opposé de méthode des co–volumes de Nicolaïdes (1993) ou le schéma cartésien décalé de Patankar et Spalding (1972), le même volume de contrôle est utilisé pour les deux composantes de vitesse puisque le maillage non structuré

n'offre pas de conditions d'orthogonalité. Le choix de la fonction d'interpolation est basé sur une extension de la méthode de *Skewed Mass-Weighted Upwind* de Schneider et Raw (1986). Quant à la procédure de résolution, un algorithme type SIMPLER a déjà été utilisé avec ce nouveau schéma (Rida et al. (1997)) mais nous utiliserons ici une méthode de résolution où les champs de vitesse et de pression sont couplés. Cette approche peut s'avérer coûteuse dans le cas de problèmes tridimensionnels mais elle est plus rapide dans les cas bidimensionnels et axisymétriques qui constituent l'objet de cette thèse.

Chapitre 2

Équations de base

Le problème type que nous cherchons à résoudre est la prédiction, à l'état stationnaire, du champ de vitesses, de la température et des concentrations massiques des espèces chimiques à l'intérieur d'une chambre de combustion. Le combustible et le comburant sont injectés séparément à travers le brûleur dans l'enceinte de combustion où ils se mélangent et réagissent exothermiquement pour donner une flamme diffusive (figure (2.1)). La chaleur dégagée par la réaction modifie considérablement les propriétés des fluides notamment la température et donc la densité ce qui entraîne une accélération du fluide. En outre, l'écoulement est turbulent et cette turbulence contribue fortement à l'interaction combustible–oxydant et donc à l'inter–diffusion moléculaire. Un autre moyen de forcer l'inter–diffusion des particules fluides consiste à injecter l'air avec un degré de mise en rotation (*swirl*) afin de créer un noyau central de recirculation. Ce tourbillon permet par la même occasion aux gaz chauds de la combustion d'être recirculés vers la racine du jet pour chauffer les réactifs frais afin d'entretenir la réaction.

La possibilité de simuler ce phénomène complexe (aéraulique, turbulence et thermochimie) permet d'influer sur la conception des brûleurs, la taille et la forme de la chambre, la quantité de combustible non brûlé ainsi que sur la formation des polluants (CO et NO_x).

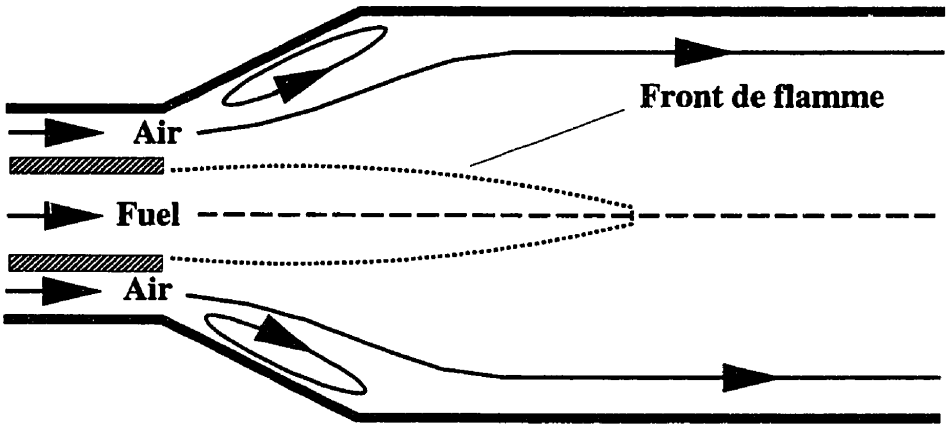


Figure 2.1: Description du problème.

Dans ce chapitre nous allons présenter les équations générales qui régissent les aspects aérodynamique et thermochimique de la combustion. On insistera sur les relations de base qui sont indispensables à la modélisation des flammes de diffusion. Ensuite nous verrons comment ces équations ont été simplifiées et réduites en nombre pour le cas de chaque modèle de combustion.

2.1 Aspect aérothermochimique

2.1.1 Aspect aérodynamique

Pour déterminer l'état aérodynamique de l'écoulement, il faut résoudre les équations de bilan des grandeurs physiques qui expriment le principe de conservation de la masse et de la quantité de mouvement dans un volume élémentaire.

Équation de continuité:

$$\nabla \cdot (\bar{\rho}\,\widetilde{\mathbf{U}}) = 0 \tag{2.1}$$

Équation de mouvement:

$$\nabla \cdot \left(\bar{\rho}\,\widetilde{\mathbf{U}} \otimes \widetilde{\mathbf{U}} - \mu_{eff}(\nabla\widetilde{\mathbf{U}} + \nabla^T\widetilde{\mathbf{U}})\right) = -\nabla \cdot (\bar{p}\,\widetilde{\widetilde{\mathbf{G}}}) \tag{2.2}$$

où $\otimes$ symbolise le produit tensoriel et $\widetilde{\widetilde{\mathbf{G}}}$ représente le tenseur métrique. La viscosité effective est définie par:

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \tag{2.3}$$

où μ est la viscosité laminaire et μ_t la viscosité turbulente qui s'exprime dans le cadre du modèle de turbulence $k-\epsilon$ (Jones et Launder (1972)) par:

$$\mu_t = C_\mu\,\bar{\rho}\,\frac{k^2}{\epsilon} \tag{2.4}$$

Pour que la formulation soit complète, il faut résoudre les équations de transport qui expriment la conservation de l'énergie cinétique de turbulence k et le taux de dissipation de cette énergie ϵ.

Équation de l'énergie cinétique de turbulence:

$$\nabla \cdot \left[\bar{\rho}\,\widetilde{\mathbf{U}}\,k - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\nabla k\right] = P_k - \bar{\rho}\,\epsilon \tag{2.5}$$

Équation du taux de dissipation :

$$\nabla \cdot \left[\bar{\rho}\,\widetilde{\mathbf{U}}\,\epsilon - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}\right)\nabla \epsilon\right] = \left(C_{\epsilon 1}\,P_k - C_{\epsilon 2}\,\bar{\rho}\,\epsilon\right)\frac{\epsilon}{k} \tag{2.6}$$

Le terme P_k représente la production de l'énergie cinétique de turbulence. Il est donné par:

$$P_k = 2\,\mu_t\,tr(\widetilde{\widetilde{\mathbf{D}}}\,\widetilde{\widetilde{\mathbf{D}}}) = 2\,\mu_t\,D_{ij}\,D_{ij} \tag{2.7}$$

$\widetilde{\widetilde{\mathbf{D}}}$ étant le tenseur des taux de déformation et $tr()$ symbolise l'opérateur trace.

Coefficients de fermeture:

Le modèle $k-\epsilon$ comporte cinq coefficients de fermeture qui sont déterminés en remplaçant des corrélations doubles et triples indéterminées par des expressions algébriques qui font intervenir les propriétés de l'écoulement moyen et de la turbulence (Launder et Spalding (1974)). Les valeurs suivantes sont communément utilisées dans le cas des écoulements confinés:

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

Le modèle n'est toutefois adapté qu'aux nombres de Reynolds élevés et ne s'applique donc pas au voisinage de la paroi où les effets visqueux dominent. Pour pallier cette limitation, l'effet de la paroi est modélisé à travers le frottement qu'elle impose au fluide et les gradients de vitesse dans cette région sont calculés en utilisant une méthode communément appelée loi de paroi (Launder et Spalding (1974)). L'application de cette loi a été modifiée dans le code VF pour prévenir les problèmes d'oscillation au voisinage des points de stagnation (McKenty et al. (1994)).

Positivité de k et ϵ:

Afin de préserver la positivité des variables k et ϵ, le recours aux variables logarithmiques ($k = e^{\hat{k}}$ et $\epsilon = e^{\hat{\epsilon}}$) représente une solution pratique. Avec ce changement de variables, les équations de transport de $\hat{k}$ et $\hat{\epsilon}$ peuvent être déduite des équations (2.5 et 2.6) en utilisant les deux relations: $\nabla k = k\nabla\hat{k}$ et $\nabla\epsilon = \epsilon\nabla\hat{\epsilon}$. Ce qui donne:

$$\nabla \cdot \left[\bar{\rho}\,\widetilde{\mathbf{U}}\,\hat{k} - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\nabla\hat{k}\right] = \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\nabla\hat{k}\cdot\nabla\hat{k} + e^{-\hat{k}}\left(P_k - \bar{\rho}\,e^{\hat{\epsilon}}\right) \tag{2.8}$$

$$\nabla \cdot \left[\bar{\rho}\,\widetilde{\mathbf{U}}\,\hat{\epsilon} - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}\right)\nabla\hat{\epsilon}\right] = \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}\right)\nabla\hat{\epsilon}\cdot\nabla\hat{\epsilon} + e^{-\hat{k}}\left(C_{\epsilon 1}\,P_k - C_{\epsilon 2}\,\bar{\rho}\,e^{\hat{\epsilon}}\right) \tag{2.9}$$

Un nouveau terme de production dérivé du terme de diffusion apparaît dans les équations logarithmiques. Dans certains cas, ce terme pourrait perturber la convergence à cause de sa grande non linéarité.

Un autre avantage de la formulation logarithmique réside dans la préservation systématique de la positivité de la viscosité turbulente μ_t qui est maintenant définie

par:

$$\mu_t = C_\mu \, \bar{\rho} \, e^{2\hat{k}-\hat{\epsilon}} \tag{2.10}$$

2.1.2 Aspect thermochimique

Quand il y a combustion, les propriétés physiques du fluide subissent de grandes variations à cause de l'énergie libérée par la réaction chimique. Ceci entraîne une augmentation de la température qui engendre une forte diminution de la densité, la pression ne variant pas beaucoup dans l'enceinte. Nous sommes alors en présence d'écoulements faiblement compressibles ($M \leq 0.2$) à densité variable ($\rho = \rho(T)$) (Rhyming (1985)). L'introduction d'une équation pour le calcul de la densité s'impose. Il s'agit, en l'occurrence, de l'équation d'état pour un mélange gazeux supposé parfait et contenant N espèces chimiques.

Équation d'état:

$$\overline{P} = \bar{\rho} R \widetilde{T} \sum_{i=1}^{N} \frac{\widetilde{m}_i}{M_i} \tag{2.11}$$

La fermeture du système d'équations qui régissent l'aérodynamique de l'écoulement est réalisée une fois la densité calculée. Toutefois, l'équation d'état fait aussi intervenir d'autres inconnues comme la température (donc l'enthalpie) et les espèces chimiques. La détermination de ces variables peut se faire par le biais d'équations de transport et de relations thermodynamiques.

Équation d'enthalpie:

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\left[\bar{\rho}\,\widetilde{\mathbf{U}}\,\tilde{h}-\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_h}\right)\nabla\tilde{h}\right] &= -\nabla\cdot\left[\mu_t\nabla\left((1-\frac{1}{\sigma_h})\frac{\widetilde{U}^2}{2}+(\frac{1}{\sigma_k}-\frac{1}{\sigma_h})\,k\right)\right]\\ &\quad -\nabla\cdot\left[\mu_t\nabla\left(\sum_{i=1}^{N}(\frac{1}{\sigma_i}-\frac{1}{\sigma_h})\,h_{R_i}\,\widetilde{m}_i\right)\right]\\ &\quad +\widetilde{S}_h \qquad (2.12)\end{aligned}$$

Dans le présent travail on ne tient pas compte du transfert de chaleur par rayonnement ($\widetilde{S}_h = 0$). En outre, les échanges diffusifs sont surtout régis par l'intensité de turbulence ce qui se traduit par des coefficients σ_i, σ_h et σ_k proches de l'unité soit la possibilité de négliger le second terme du membre de droite (Gosman et al. (1969)). Enfin, la diffusion turbulente de l'énergie cinétique de turbulence k et de l'énergie cinétique $\widetilde{U}^2/2$ sont négligeables devant celle de $\tilde{h}$ ce qui réduit l'équation de l'enthalpie à (Viollet (1986)):

$$\nabla\cdot\left[\bar{\rho}\,\widetilde{\mathbf{U}}\,\tilde{h}-\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_h}\right)\nabla\tilde{h}\right]=0 \qquad (2.13)$$

L'enthalpie est reliée au reste des variables par (Viollet (1986)):

$$\tilde{h}=\int_{T_0}^{\widetilde{T}}\left(\sum_{i=1}^{N}\tilde{c}_{P,i}\,\widetilde{m}_i\right)d\widetilde{T}+\sum_{i=1}^{N}h_{R_i}\,\widetilde{m}_i \qquad (2.14)$$

où h_{R_i} est l'enthalpie de formation de l'espèce i et T_0 représente la température de l'état de référence de l'enthalpie. Quant aux coefficients $\tilde{c}_{P,i}$, ils peuvent être exprimés en fonction de la température à partir de tables empiriques (Janaf (1986)).

D'autre part, la conservation des concentrations massiques des espèces chimiques $\widetilde{m}_i$ est régie par des équations de convection–diffusion avec terme source. Ces équations

sont toutefois assujetties à la contrainte:

$$\sum_{i=1}^{N} \widetilde{m}_i = 1 \tag{2.15}$$

pour un système contenant N espèces chimiques.

Équation de transport de $\widetilde{m}_i$ ($i \in [1, N]$) :

$$\nabla \cdot \left[\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{U}} \widetilde{m}_i - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_i} \right) \nabla \widetilde{m}_i \right] = \bar{\rho} \widetilde{R}_i \tag{2.16}$$

Pour toutes les espèces chimiques, les coefficients $\sigma_i = 0.9$ (Khalil et al. (1975)) afin de souligner l'effet de la turbulence sur les échanges par diffusion. Quant au terme source $\widetilde{R}_i$, il représente le taux de formation moyen ou le taux de destruction moyen de l'espèce i et ce sont les problèmes reliés à sa détermination qui sont à l'origine des nombreux modèles de combustion.

2.2 Relations communes aux modèles de combustion

Dans la modélisation de l'aspect aérothermochimique de la combustion, nous avons identifié (9+N) inconnues soient: $\tilde{u}$, $\tilde{v}$, $\bar{p}$, k, ϵ, μ_t, $\bar{\rho}$, $\widetilde{T}$, $\tilde{h}$ et $\widetilde{m}_i$ où $i \in [1, N]$. Pour les déterminer, il faut résoudre (9+N) équations dont (6+N) sont différentielles ce qui constitue déjà un système de taille. On peut, toutefois, éliminer une équation différentielle en exploitant l'équation algébrique (2.15). Quant au nombre des espèces chimiques prises en compte dans la composition du mélange, il dépend essentiellement du type de réaction considéré (à une seule ou à plusieurs étapes).

Dans ce qui suit, nous allons voir comment on peut réduire le nombre d'équations à résoudre tout en préservant la physique du phénomène .

2.2.1 Le taux de mélange

On considère une réaction chimique à une seule étape où le combustible (généralement un hydrocarbure C_xH_y) réagit avec le comburant pour donner des produits selon les proportions:

$$1\,kg\,\text{combustible} + s\,kg\,\text{oxydant} \longrightarrow (1+s)\,kg\,\text{Produits} \tag{2.17}$$

où s est le coefficient stoechiométrique de la réaction. Écrivons les équations de transport du combustible $\widetilde{m}_{fu}$ et de l'oxydant $\widetilde{m}_{O_2}$ à partir de l'équation (2.16):

$$\nabla \cdot \left[\bar{\rho}\,\widetilde{\mathbf{U}}\,\widetilde{m}_{fu} - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{fu}}\right)\nabla\widetilde{m}_{fu}\right] = \bar{\rho}\tilde{R}_{fu} \tag{2.18}$$

$$\nabla \cdot \left[\bar{\rho}\,\widetilde{\mathbf{U}}\,\widetilde{m}_{O_2} - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{O_2}}\right)\nabla\widetilde{m}_{O_2}\right] = \bar{\rho}\tilde{R}_{O_2} \tag{2.19}$$

On introduit ensuite la variable $\tilde{\zeta}$ pour représenter la concentration massique moyenne du combustible en excès ou en défaut de la stoechiométrie:

$$\tilde{\zeta} = \widetilde{m}_{fu} - \frac{\widetilde{m}_{O_2}}{s} \tag{2.20}$$

Une combinaison linéaire des équations (2.18) et (2.19) permet de déduire une équation de transport pour $\tilde{\zeta}$ sous la forme:

$$\nabla \cdot \left[\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{U}} \tilde{\zeta} - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_f} \right) \nabla \tilde{\zeta} \right] = 0 \tag{2.21}$$

Il est à noter que l'équation de $\tilde{\zeta}$ n'a pas de terme source puisque les proportions de la réaction chimique imposent $\tilde{R}_{fu} = \tilde{R}_{O_2}/s$. En outre, on suppose que toutes les espèces chimiques ont le même coefficient de diffusion turbulente et donc que le nombre de Schmidt turbulent est constant (Spalding (1979)), en l'occurrence, $\sigma_{fu} = \sigma_{O_2} = \sigma_f$.

On définit ensuite une variable scalaire qui va servir à déterminer les proportions de chaque réactif dans le mélange. Selon Khalil (1982), le choix le plus direct est le taux de mélange définie par:

$$\tilde{f} = \frac{\tilde{\zeta} - \tilde{\zeta}_A}{\tilde{\zeta}_F - \tilde{\zeta}_A} \tag{2.22}$$

où les indices A et F désignent respectivement les conditions dans le jet d'entrée de l'oxydant (Air) et du combustible (*Fuel*) pour lesquelles $\tilde{f}$ prend respectivement les valeurs 0 et 1.

L'équation de transport du taux de mélange $\tilde{f}$ est déduite de celle de $\tilde{\zeta}$:

$$\nabla \cdot \left[\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{U}} \tilde{f} - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_f} \right) \nabla \tilde{f} \right] = 0 \tag{2.23}$$

Le scalaire $\tilde{f}$ est strictement conservé puisqu'il obéit à des conditions de Neumann nulles ($\nabla \tilde{f} \cdot \mathbf{n} = 0$) sur toutes les frontières (de vecteur normal $\mathbf{n}$) à l'exception de l'entrée des réactifs. Par conséquent, chaque valeur de $\tilde{f}$ entre 0 et 1 correspond à un état particulier du mélange qui permet de déterminer les concentrations massiques

des réactifs. D'ailleurs, dans tous les modèles de combustion, on cherche à déterminer la concentration massique des espèces chimiques en fonction du taux de mélange et cela aboutit à des distributions comme celle montrée à la figure (2.2)

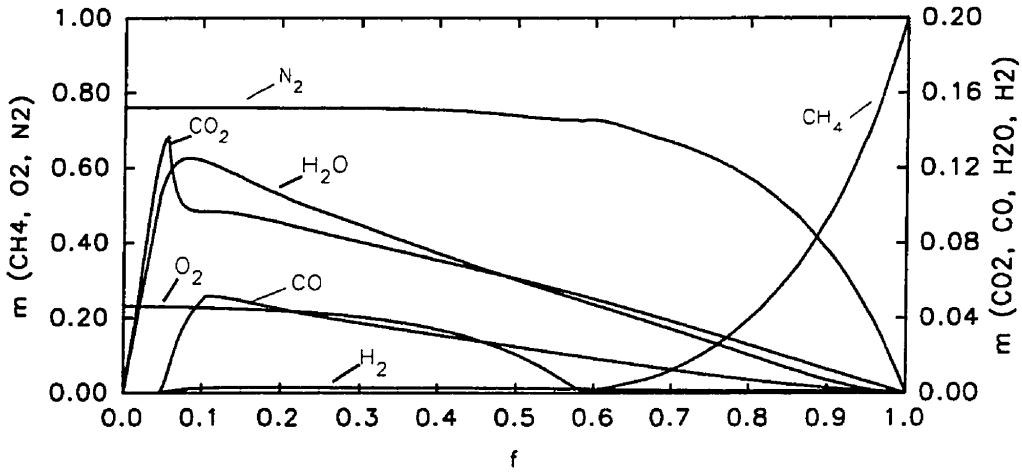


Figure 2.2: Concentration massique des produits de combustion en fonction du taux de mélange pour la combustion du méthane dans l'air.

2.2.2 Enthalpie et température

Dans le cas où les échanges radiatifs et les échanges d'énergie avec le milieu ambiant sont nuls et si les effets de diffusion moléculaire et de thermoconduction sont négligeables (ce qui est le cas d'une flamme turbulente), la conservation de l'enthalpie et du taux de mélange est décrite par la même équation (2.13) ou (2.23). Ceci permet

d'écrire, à l'instar de l'équation (2.22):

$$\tilde{f} = \frac{\tilde{h} - \tilde{h}_A}{\tilde{h}_F - \tilde{h}_A} \tag{2.24}$$

où h_A et h_F sont les enthalpies massiques de l'oxydant et du combustible aux températures d'injection respectives T_A et T_F des deux gaz. Le calcul de la température se fait alors suivant la relation:

$$\tilde{h} = \int_{T_0}^{\tilde{T}} \left(\sum_{i=1}^{N} \tilde{c}_{P,i} \widetilde{m}_i \right) d\tilde{T} + \sum_{i=1}^{N} h_{R_i} \widetilde{m}_i \tag{2.25}$$

La relation (2.24) nous permet d'éliminer une équation de transport additionnelle. Cependant, lorsqu'il y a des échanges de chaleur pariétaux, cette relation devient caduc et nous devons calculer l'enthalpie à l'aide de son équation de transport complète (2.13). Dans ce cas, pour tenir compte de l'effet de la turbulence sur l'enthalpie, nous ne pouvons pas utiliser la fonction de densité de probabilité telle que décrite à la section (1.5.3) de cette étude. En effet, la détermination de l'enthalpie moyenne nécessite une fonction de densité de probabilité bimodale qui dépend à la fois de f et de h et dont la forme est inconnue *a priori*.

2.3 Modèles de combustion

Dans cette section nous allons présenter les équations qui régissent les modèles de combustion de la librairie CMBLIB. Mais avant cela, nous allons commencer par décrire brièvement ces quatre modèles.

Le modèle de chimie infiniment rapide suppose que la réaction chimique se fait en une

seule étape de manière complète et irréversible. Pour la méthode à taux de réaction fini, elle repose sur ces mêmes hypothèses en imposant, toutefois, un taux de réaction fini pour la fraction massique du combustible afin de tenir compte des hydrocarbures non–brûlés. En ce qui concerne le modèle d'équilibre chimique, la réaction est toujours supposée suffisamment rapide non pas pour la considérer complète mais pour supposer que l'équilibre entre les produits et les réactifs est atteint localement. Enfin, il y a le modèle de micro–flammes qui se base sur des données expérimentales pour établir des corrélations entre le taux de mélange et les concentrations massiques des espèces chimiques présentes.

2.3.1 Modèle à chimie infiniment rapide

Dans ce modèle, comme son nom l'indique, on suppose que la réaction chimique est si rapide que celle–ci est complétée aussitôt que les réactifs sont mélangés. En d'autres termes, dans le cas de mélange stoechiométrique, le combustible et l'oxydant disparaissent rapidement et complètement pour générer des produits. Toutefois, si le mélange est pauvre tout le combustible est consommé et il reste de l'oxygène dans les produits. Par contre, si le mélange est riche, tout l'oxygène est consommé et le combustible fait partie des produits.

Cette approximation est raisonnable dans le cas où la réaction chimique est infiniment rapide par rapport au temps nécessaire au mélange des réactifs. Ceci est effectivement le cas des flammes de diffusion où la propagation de la flamme est entièrement déterminée par la diffusion turbulente (§(1.2)). Toutefois, cette hypothèse suppose aussi que le combustible et le comburant ne peuvent pas coexister en même temps au même endroit (nous verrons par la suite comment remédier à cette limitation).

Nous considérons donc une réaction chimique irréversible à une seule étape où le combustible (généralement un hydrocarbure C_xH_y) réagit avec le comburant pour donner des produits selon les proportions:

$$\nu_{fu}C_xH_y + \nu_{O_2}O_2 \longrightarrow \nu_{CO_2}CO_2 + \nu_{H_2O}H_2O \tag{2.26}$$

où les ν_i sont les coefficients (nombres de moles) pour la réaction stoechiométrique. Le coefficient stoechiométrique de la réaction s qui représente la masse stoechiométrique d'oxygène nécessaire à la combustion d'un kilogramme de combustible s'écrit alors:

$$s = \frac{M_{O_2}}{M_{fu}} \frac{\nu_{O_2}}{\nu_{fu}} \tag{2.27}$$

Concentration massique des réactifs :

Si le rythme de combustion est infiniment rapide de manière que l'oxydant et le combustible ne peuvent pas coexister alors, lorsque les réactifs se rencontrent, soit tout l'oxygène est consommé soit tout le combustible est brûlé, et ce dépendant de la richesse du mélange. Nous sommes donc en présence d'une réaction complète modélisée par:

$$\begin{aligned} 0 \leq \tilde{f} \leq f_{st} : \quad & \widetilde{m}_{fu} = 0 \\ & \widetilde{m}_{O_2} = m_{O_2,A} \frac{f_{st} - \tilde{f}}{f_{st}} \end{aligned} \tag{2.28}$$

$$\begin{aligned} f_{st} \leq \tilde{f} \leq 1 : \quad & \widetilde{m}_{O_2} = 0 \\ & \widetilde{m}_{fu} = m_{fu,F} \frac{\tilde{f} - f_{st}}{1 - f_{st}} \end{aligned} \tag{2.29}$$

où le taux de mélange stoechiométrique est donné par:

$$f_{st} = \frac{m_{O_2,A}}{s\, m_{fu,F} + m_{O_2,A}} \tag{2.30}$$

Le détail de cette formulation peut être trouvé dans le livre de Spalding (1979).

Concentration massique d'un gaz inerte :

L'équation de transport d'un gaz inerte, en l'occurrence l'azote, n'a pas de terme source car celui–ci ne réagit pas. La concentration massique du gaz inerte $\widetilde{m}_{in}$ et le taux de mélange $\tilde{f}$ sont alors régis par la même équation de convection–diffusion (avec $\sigma_{in} = \sigma_f$), ce qui permet de déduire:

$$\tilde{f} = \frac{\widetilde{m}_{in} - \widetilde{m}_{in,A}}{\widetilde{m}_{in,F} - \widetilde{m}_{in,A}} \tag{2.31}$$

La concentration massique d'un gaz inerte dans les produits de combustion est alors donnée par:

$$\widetilde{m}_{in} = \widetilde{m}_{in,A}\,(1 - \tilde{f}) \tag{2.32}$$

Concentration massique des produits :

Maintenant que les concentrations $\widetilde{m}_{fu}$, $\widetilde{m}_{O_2}$ et $\widetilde{m}_{in}$ sont connues, la concentration massique des produits est déduite de l'équation (2.15):

$$\widetilde{m}_{pr} = 1 - (\widetilde{m}_{O_2} + \widetilde{m}_{fu} + \widetilde{m}_{in}) \tag{2.33}$$

Pour obtenir les concentrations massiques des différents produits, nous avons recours aux proportions de la réaction chimique (2.26) et ainsi:

$$\widetilde{m}_{CO_2} = \frac{\nu_{CO_2} M_{CO_2}}{\nu_{CO_2} M_{CO_2} + \nu_{H_2O} M_{H_2O}} \widetilde{m}_{pr} \tag{2.34}$$

$$\widetilde{m}_{H_2O} = \frac{\nu_{H_2O} M_{H_2O}}{\nu_{CO_2} M_{CO_2} + \nu_{H_2O} M_{H_2O}} \widetilde{m}_{pr} \tag{2.35}$$

Calcul de l'enthalpie, de la température et de la densité :

Pour un écoulement adiabatique, il a déjà été établi que l'enthalpie pouvait être déduite du taux de mélange moyen par:

$$\tilde{h} = (\tilde{h}_F - \tilde{h}_A)\,\tilde{f} + \tilde{h}_A \tag{2.36}$$

Par ailleurs, la relation de la température avec l'enthalpie est donnée par:

$$\tilde{h} = \int_{T_0}^{\widetilde{T}} \left(\sum_{i=1}^{N} \tilde{c}_{P,i}\, \widetilde{m}_i \right) d\widetilde{T} + \sum_{i=1}^{N} h_{R_i}\, \widetilde{m}_i \tag{2.37}$$

Nous avons recours à la méthode itérative de Newton pour résoudre cette équation non–linéaire et obtenir la température du mélange $\widetilde{T}$. Les chaleurs spécifiques sont calculées par des corrélations de Gordon et McBride (1971). Enfin, la densité du mélange est calculée à partir de l'équation des gaz parfaits:

$$\bar{\rho} = \frac{M_{mel}\,\overline{P}}{R\,\widetilde{T}} \tag{2.38}$$

où M_{mel} représente la masse molaire du mélange définie par:

$$\frac{1}{M_{mel}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\widetilde{m}_i}{M_i} \tag{2.39}$$

2.3.2 Modèle à taux de réaction fini

Le modèle précédent tend à surestimer la concentration du combustible non–brûlé. En effet, il n'est pas tout à fait exact de supposer que le taux de réaction est infiniment rapide car, compte tenu de l'influence de la turbulence, ce taux est fini dans certaines régions de la flamme. Cela a pour effet de fausser les concentrations des espèces chimiques, en particulier, celle du combustible.

Pour pallier ce problème, nous rajoutons une équation de transport pour la fraction massique du combustible afin d'introduire les effets de la turbulence sur le taux de réaction et d'avoir une meilleure estimation de $\widetilde{m}_{fu}$. Le terme source de cette équation est une expression simple basée sur le taux de dégénérescence des tourbillons donnée par Hjertagger et Magnussen (1982).

$$\nabla \cdot \left[\bar{\rho}\,\widetilde{\mathbf{U}}\,\widetilde{m}_{fu} - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{fu}}\right)\nabla\widetilde{m}_{fu}\right] = -\frac{\widetilde{m}_{fu,b}}{\widetilde{m}_{fu} + \widetilde{m}_{fu,b}} A_{R_{fu}}\,\bar{\rho}\,\frac{\epsilon}{k} \cdot min|\widetilde{m}_{fu}, \frac{\widetilde{m}_{O_2}}{s}| \tag{2.40}$$

où $\widetilde{m}_{fu,b}$ est la concentration de combustible brûlé et $A_{R_{fu}}$ est une constante empirique qui dépend de la nature de l'écoulement. Par défaut cette constante prend habituellement la valeur 4.

Le processus de calcul des concentrations massiques, de la température et de la densité se fait de la même manière que dans le modèle précédent à l'exception de la concentration du combustible non–brûlé qui est donnée par son équation de transport.

En résumé, le seul avantage du modèle actuel sur celui de chimie infiniment rapide réside dans une meilleure estimation de la quantité de combustible non–brûlé. Ce modèle peut toutefois être étendu à plusieurs réactions consécutives en prenant comme terme source le minimum entre le terme basé sur la dégénérescence des tourbillons et le terme d'Arrhenius. Cependant, les constantes $A_{R_{fu}}$ doivent être déterminées de façon empirique pour le type d'écoulement considéré sinon les résultats en seront fortement affectés.

2.3.3 Modèle d'équilibre chimique

L'hypothèse de chimie infiniment rapide suppose une réaction complète et irréversible ce qui n'est pas tout à fait exact. En outre, les modèles thermochimiques utilisés sont simplistes dans ce sens que toute formation de monoxyde de carbone est négligée. Ceci entraîne inéluctablement une surestimation des températures et des concentrations des produits.

Une alternative au modèle de chimie infiniment rapide consiste à continuer à faire l'hypothèse d'une réaction chimique suffisamment rapide non pas pour que cette réaction se fasse en une seule étape mais pour que l'équilibre chimique soit atteint localement pour (T,P) données. Le modèle consiste alors à calculer cet équilibre et à déduire les concentrations des espèces, la température et la densité.

En effet, les lois de thermodynamique définissent le critère d'équilibre chimique comme suit: si un système d'espèces chimiques réagit à température et pression constantes en absence de travail alors l'application de la première loi donne:

$$\delta Q = dH \tag{2.41}$$

et la seconde loi stipule que:

$$\delta Q \leq T\,dS \tag{2.42}$$

soit que:

$$dH - TdS \leq 0 \tag{2.43}$$

On déduit du second principe le sens d'évolution du système, donc d'une réaction chimique de la gauche vers la droite, à T et P données, tel que la variation dG de la fonction énergie libre $G = H - TS$, soit négative; et dans le sens contraire pour $dG > 0$. Ainsi, à l'équilibre, le G total du système passe par un minimum et la relation suivante est satisfaite:

$$(dG)_{P,T} = 0 \tag{2.44}$$

Décrivons alors le processus de calcul de l'équilibre chimique pour la réaction d'un hydrocarbure $C_\alpha H_\beta O_\eta N_\gamma$ dans l'air. La relation stoechiométrique de cette réaction est donnée par:

$$\begin{aligned} \varepsilon\varphi C_\alpha H_\beta O_\eta N_\gamma + \nu_{O_2} O_2 + \nu_{N_2} N_2 \;\rightleftharpoons\; & \nu_1 CO_2 + \nu_2 H_2O + \nu_3 N_2 + \nu_4 O_2 + \\ & \nu_5 CO + \nu_6 H_2 + \nu_7 NO + \nu_8 CH_4 + \\ & \nu_9 C(s) + \nu_{10} C_3H_8 + \nu_{11} O + \nu_{12} NO_2 + \\ & \nu_{13} OH + \nu_{14} H + \ldots \end{aligned} \tag{2.45}$$

où ε est définie par:

$$\varepsilon = \frac{\nu_{O_2}}{\alpha + \frac{1}{4}\beta - \frac{1}{2}\eta} \tag{2.46}$$

et φ représente la richesse du mélange:

$$\varphi = \frac{F}{F_{st}} \tag{2.47}$$

F étant le rapport de la masse du combustible sur celle de l'air.

Pour un mélange de N espèces chimiques, l'énergie libre de Gibbs s'écrit:

$$G = \sum_{j=1}^{N} \mu_j \, \nu_j \tag{2.48}$$

où μ_j est le potentiel chimique, une propriété intensive, défini par:

$$\mu_j = \left(\frac{\partial G}{\partial \nu_j}\right)_{T,\, P,\, \nu_i\, (i \neq j)} \tag{2.49}$$

Pour un gaz parfait, cette équation prend la forme suivante:

$$\frac{\mu_j}{RT} = \frac{\mu_j^0}{RT} + ln\left(\frac{\nu_j}{\nu}\right) + ln\left(\frac{\overline{P}}{P_0}\right) \tag{2.50}$$

avec $\nu = \sum_{j=1}^{N} \nu_j$ et

$$\frac{\mu_j^0}{RT} = \frac{(G^0 - H_{298}^0)}{RT} + \frac{\Delta H_{298}^0}{RT} \tag{2.51}$$

Les valeurs de $(G^0 - H_{298}^0)/RT$ et de $\Delta H_{298}^0/RT$ peuvent être déterminées à partir

des relations de Gordon et McBride (1971). L'état d'équilibre du mélange est déterminé par la minimisation de l'énergie libre de Gibbs en respectant la contrainte de conservation des atomes qui se traduit par:

$$\sum_{j=1}^{N} a_{ij}\,\nu_j = b_i^0 \qquad\qquad i \in [1, L] \tag{2.52}$$

ou encore

$$b_i = \sum_{j=1}^{N} a_{ij}\,\nu_j \qquad\qquad i \in [1, L] \tag{2.53}$$

avec

a_{ij} : nombre d'atomes de l'élément i dans l'espèce j

b_i^0 : nombre d'atomes de l'élément i dans les réactifs

b_i : nombre d'atomes de l'élément i dans les produits

L : nombre des différents atomes présents dans la réaction

La condition d'équilibre est imposée par $(dG)_{P,T} = 0$. Nous sommes donc en présence d'un problème de minimisation d'une fonction G à N variables ν_j. Dans ce qui suit nous allons présenter deux façons de résoudre ce problème.

Minimisation avec contraintes d'égalité: Multiplicateurs de Lagrange

Le problème consiste à minimiser la fonction de Gibbs:

$$G = \sum_{j=1}^{N} \mu_j\,\nu_j \tag{2.54}$$

sujette à

$$b_i = b_i^0 = \sum_{j=1}^{N} a_{ij}\,\nu_j \qquad\qquad i \in [1, L] \tag{2.55}$$

Si nous introduisons la fonction g telle que:

$$g = G + \sum_{i=1}^{L} \lambda_i\,(b_i - b_i^0) \tag{2.56}$$

où les λ_i représentent des multiplicateurs de Lagrange, la condition d'équilibre est ramenée à:

$$0 = dg = \sum_{j=1}^{N} \left(\mu_j + \sum_{i=1}^{L} \lambda_i a_{ij}\right) \delta\nu_j + \sum_{i=1}^{L} (b_i - b_i^0)\,\delta\lambda_i \tag{2.57}$$

En considérant que les variations $\delta\lambda_i$ et $\delta\nu_i$ sont indépendantes, l'équation (2.57) peut être scindée en deux systèmes d'équations:

$$\mu_j + \sum_{i=1}^{L} \lambda_i a_{ij} = 0 \qquad\qquad j \in [1, N] \tag{2.58}$$

$$\sum_{j=1}^{N} a_{ij}\nu_j - b_i^0 = 0 \qquad\qquad i \in [1, L] \tag{2.59}$$

En introduisant l'expression du potentiel chimique pour un gaz parfait dans l'équation (2.58) et connaissant le couple (T, P), l'équilibre thermochimique du mélange est déterminé par le système à $(N + L + 1)$ équations non–linéaires suivant:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N} a_{ij}\nu_j - b_i^0 = 0 & i \in [1, L] \\ \frac{\mu_j^0}{RT} + ln\left(\frac{\nu_j}{\nu}\right) + ln\left(\frac{P}{P_0}\right) + \sum_{i=1}^{L} \frac{\lambda_i}{RT} a_{ij} = 0 & j \in [1, N] \\ \nu = \sum_{j=1}^{N} \nu_j \end{cases} \tag{2.60}$$

où les inconnues sont les ν_j, les λ_i et ν.

Minimisation avec contraintes d'inégalité: Pénalisation

Dans certains cas, la méthode d'équilibre chimique peut aboutir à des résultats non réalistes telle la méthanation (création de méthane à partir de C et de H). Par exemple, dans le cas de combustibles constitués de méthane, d'oxyde de carbone, d'hydrogène et d'autres hydrocarbures, la concentration de méthane a tendance à dépasser la concentration initiale lorsque le mélange est riche. Ce problème n'apparaît que dans le cas où le combustible est composé de plusieurs hydrocarbures et seulement pour certaines proportions de ces composés.

Il ne s'agit pas ici d'une erreur dans la méthode: la formation de méthane à partir de composés organiques est tout à fait plausible moyennant un laps de temps très grand ce qui est une des prémices de l'équilibre thermodynamique. Toutefois, dans le contexte actuel les réactions chimiques responsables de ce phénomène n'ont pas le temps d'entrer en jeu puisqu'elles sont très lentes.

Pour pallier ce problème, nous proposons d'imposer des contraintes aux concentrations des composés qui risquent de présenter des comportements non réalistes. Il s'agit de limiter ces concentrations aux valeurs obtenues par sans réaction. Ainsi, dans le cas hypothétique d'un combustible formé de CH_4, de C_2H_6 et de CO_2, il y aura des limites supérieures pour le méthane et l'éthane pour éviter respectivement la méthanation ou l'éthanation et une limite inférieure pour le dioxyde de carbone pour freiner la dissociation.

Le problème à résoudre devient alors un cas de minimisation avec contraintes d'égalité et d'inégalité. Si $\mathbf{X}$ est un vecteur de dimension N représentant les inconnues ν_j, Il s'agit de minimiser la fonction

$$G(\mathbf{X}) = \sum_{j=1}^{N} \mu_j \, \nu_j \tag{2.61}$$

sujette à

$$\begin{cases} h_i(\mathbf{X}) = \sum_{j=1}^{N} a_{ij}\nu_j - b_i^0 = 0 & i \in [1, L] \\ g_j(\mathbf{X}) \leq 0 & j \in [1, N] \end{cases} \tag{2.62}$$

où les fonctions g_j représentent les contraintes d'inégalité ou les limites éventuellement imposées aux ν_j.

La résolution de ce type de problème est en général compliquée à cause des contraintes d'inégalité. Pour ce faire, nous utiliserons une approche itérative où à chaque itération le problème est ramené à un problème de minimisation sans contrainte, facile à résoudre. Il s'agit de la méthode de pénalisation externe qui entre dans le cadre général de l'approche SUMT (*Sequential Unconstrained Minimization Techniques*) où il s'agit de définir une pseudo–fonction Φ telle que (Vanderplaats (1984)):

$$\Phi(\mathbf{X}) = G(\mathbf{X}) + r_p P(\mathbf{X}) \tag{2.63}$$

où $P(\mathbf{X})$ est une fonction de pénalisation imposée, r_p est un scalaire qui détermine le degré de la pénalisation et l'indice p représente l'étape de la minimisation sans contrainte. Le scalaire r_p est maintenu constant à chaque étape de minimisation sans contrainte.

Dans le cas de la méthode de pénalisation externe, la fonction $P(\mathbf{X})$ prend la forme:

$$P(\mathbf{X}) = \sum_{j=1}^{N} [max\,(0, g_j(\mathbf{X}))]^2 + \sum_{i=1}^{L} [h_i(\mathbf{X})]^2 \tag{2.64}$$

Ainsi, pour chaque valeur de r_p dans l'équation (2.63) la fonction Φ est minimisée en résolvant:

$$\nabla\Phi(\mathbf{X}) = 0 \tag{2.65}$$

Considérons maintenant le choix du multiplicateur r_p. En général, les calculs sont amorcés avec de petites valeurs de r_p qui sont augmentées régulièrement jusqu'à la convergence. Cette technique permet d'avoir un bon conditionnement et d'éviter des violations de contraintes (Vanderplaats (1984)).

Procédure de calcul

Que ce soit un problème de minimisation avec ou sans contraintes d'inégalité, la procédure de calcul générale du modèle d'équilibre chimique est itérative et se fait comme suit:

1. Un calcul initial des concentrations massiques en fonction du taux de mélange est effectué en utilisant le modèle simple de chimie infiniment rapide.

2. Un premier estimé de la température du mélange est alors obtenu et comme la pression est supposée constante dans l'enceinte, le couple $(\widetilde{T},\overline{P})$ est connu.

3. À partir du couple $(\widetilde{T},\overline{P})$, le système (2.60) ou (2.65) est résolu par une méthode de Newton pour déterminer les concentrations massiques des produits de combustion.

4. Connaissant l'enthalpie de mélange de son équation de transport, nous vérifions si la relation intégrale enthalpie–température suivante est satisfaite.

$$\tilde{h} = \int_{T_0}^{\widetilde{T}} \left(\sum_{i=1}^{N} \tilde{c}_{P,i}\, \widetilde{m}_i \right) d\widetilde{T} + \sum_{i=1}^{N} h_{R_i}\, \widetilde{m}_i$$

5. Dans l'affirmative, la densité est calculée sinon retour à l'étape 3.

La validation de ce modèle a été réalisée par McKenty (1992) dans le cas de la combustion du méthane dans l'air où seules les espèces CH_4, O_2, N_2, CO_2, CO, H_2O, H_2 et NO ont été considérées dans l'équation de réaction (2.45). Des comparaisons ont été effectuées avec les résultats numériques d'un code de calcul de la NASA qui fait un calcul d'équilibre chimique en considérant toutes les espèces. La concordance est très satisfaisante comme le montre la figure (2.3).

Le modèle d'équilibre a été étendu de 8 à 55 espèces chimiques pour élargir le spectre de son application. Il a fallu établir des corrélations exprimant les propriétés thermodynamiques (G, H, c_P et S) en fonction de la température pour les produits de combustion qui nous intéressent ainsi que les hydrocarbures qu'on se propose de

traiter. Nous avons arrêté notre choix à 55 espèces composées de 6 atomes de base (C, H, O, N, S et Ar) dont voici la liste complète: C, CH, CH_2, CH_3, CH_3OH, CH_4, CN, C_2H, C_2H_2, C_2H_3, C_2H_4, C_2H_5, C_2H_6, C_2H_5OH, C_2N_2, C_3H_6, C_3H_8, C_4H_{10}, $C_4H_{10}(iso)$, C_6H_6, C_7H_8, C_7H_{16}, C_8H_{18}, $C_{10}H_8$, CO, CO_2, H, HCN, HNO, HNO_2, HNO_3, H_2, H_2O, H_2S, H_2SO_4, O, OH, O_2, N, NH, NH_2, NH_3, NO, NO_2, NO_3, N_2, N_2O, S, SH, SO, SO_2, SO_3 et Ar. Les données thermodynamiques pour ces espèces peuvent être trouvées dans les tables de Janaf (1986) et de Rossini et al. (1953).

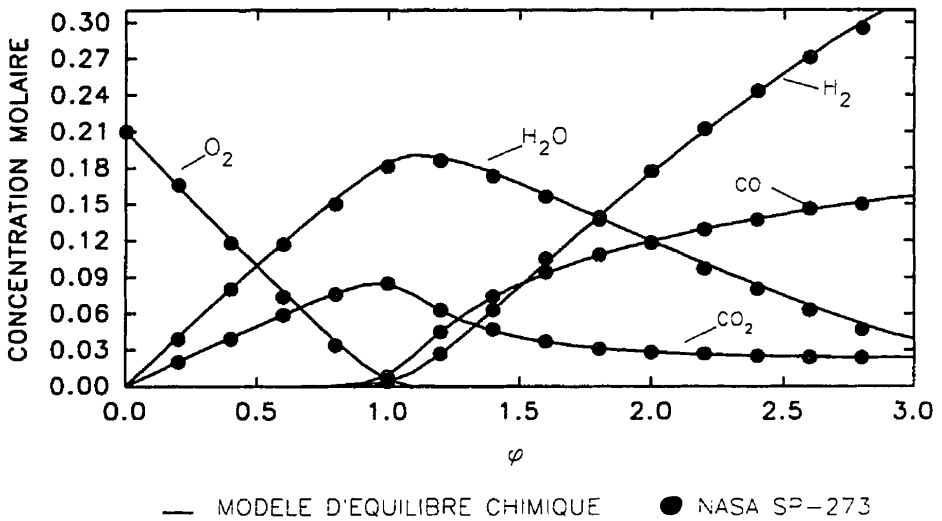


Figure 2.3: Équilibre chimique du méthane dans l'air. Comparaison des concentrations molaires en fonction de la richesse du mélange avec les résultats de Jones (1980).

Le problème avec le modèle d'équilibre chimique réside dans la nécessité de résoudre un nombre d'équations de plus en plus important au fur et à mesure qu'on augmente le nombre d'espèces chimiques traitées, et ce à chaque point de calcul. Comme la

méthode d'équilibre chimique est itérative, l'extension envisagée risque de coûter cher en temps CPU et en mémoire de stockage. Pour pallier ce problème, les concentrations ont été tabulées en fonction du taux de mélange sans pour autant nuire à la qualité des résultats.

En résumé, ce modèle se distingue des deux modèles précédents puisqu'il permet le calcul des espèces dissociées telles CO et H_2 soit une meilleure prédiction du champ de température. Toutefois, ce modèle tend à surestimer les concentrations de combustible non–brûlé, de monoxyde de carbone et des oxydes d'azote. En effet, les taux de réaction de CO et NO sont nettement plus lents que ceux des autres espèces ce qui ne leur permet pas d'atteindre l'équilibre chimique localement à l'intérieur d'une flamme de diffusion. Nous allons d'ailleurs nous pencher sur cette lacune du modèle d'équilibre chimique en introduisant le modèle hybride (§(2.3.5)). Mais actuellement, comme la surestimation du CO n'a lieu que dans les minces zones où le mélange est très riche, l'erreur est négligée. Par conséquent, le modèle d'équilibre chimique peut être considéré satisfaisant quant à la prédiction du CO et meilleur en ce qui concerne la précision des concentrations des espèces et du champ de température.

2.3.4 Modèle de micro–flammes

Les trois modèles présentés jusqu'à présent se basent sur des hypothèses qui soit négligent complètement la formation du monoxyde de carbone soit la surestiment. Ils partent du fait que la réaction chimique est assez rapide pour être complète ou pour atteindre un équilibre chimique. Dans les deux cas, il est possible de déduire les concentrations des produits, le champ de température et la densité.

Dans ce quatrième modèle, l'approche est différente. Elle est basée sur le concept des flammelettes. Il s'agit de supposer que la combustion dans une flamme de diffusion ne se fait pas dans un mélange parfaitement homogène mais que les réactifs sont présents en poches de combustible et de comburant. Dans l'interstice qui sépare ces poches, il y a naissance de petites flammes communément appelées micro–flammes. L'intérêt derrière cette approche réside dans la possibilité de traiter ces micro–flammes comme des flammes laminaires où le taux de réaction ne dépend pas de la turbulence. Toutefois, ces micro–flammes restent influencées par la production et la dégénérescence des tourbillons. Le compromis consiste alors à limiter l'influence de la turbulence sur la combustion au taux de mélange moyen et d'exprimer les concentrations des espèces chimiques en fonction de ce taux de mélange et de sa fluctuation.

En partant de cette hypothèse, il est possible de déduire les produits de combustion à partir de mesures expérimentales dans des flammes laminaires. Actuellement, la librairie CMBLIB dispose de corrélations empiriques pour des flammes laminaires du méthane dans l'air (voir 2.4). Avec ces données, nous supposons que chaque point de calcul est le lieu d'une micro–flamme laminaire et que l'influence de la turbulence se fait à travers $\tilde{f}$ et f'' (figure 2.4).

La procédure de calcul est quasiment la même que celle du modèle d'équilibre chimique. En effet, c'est un processus itératif sur la température dans lequel les concentrations des produits sont déterminées expérimentalement dans le modèle de micro–flamme alors qu'elles sont calculées via une minimisation de l'énergie de Gibbs dans le modèle d'équilibre chimique.

En résumé, l'approche physique de la réaction change avec le modèle de micro–flamme. L'hypothèse émise ne concerne plus la vitesse de réaction mais plutôt le mécanisme

de la réaction. Néanmoins, la procédure de calcul reste presque identique à celle du modèle d'équilibre chimique. Les avantages du modèle de micro–flamme sont la simplicité d'utilisation, le coût relativement bas et la possibilité de prédire les concentrations des espèces dissociées comme CO et H_2 . En revanche, ce modèle est très dépendant de la précision des mesures empiriques et n'est valide, dans notre cas, que pour des flammes de méthane dans l'air (ce qui ne pose pas de problèmes au Canada puisque le gaz naturel est presque exclusivement composé de méthane). Néanmoins, le concept du modèle reste facilement transposable à d'autres combustibles à condition de disposer des données expérimentales correspondantes.

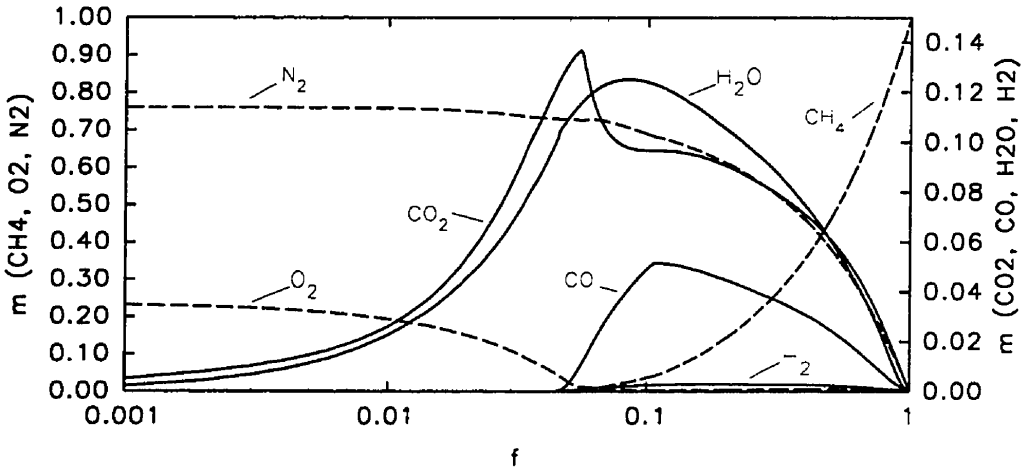


Figure 2.4: Concentration massique des produits en fonction du taux de mélange calculées avec le modèle de micro–flammes pour la combustion du méthane dans l'air (McKenty (1992)).

2.3.5 Modèle hybride

Dans le modèle de chimie infiniment rapide, on suppose que la réaction est complète, irréversible et qu'elle se fait en une seule étape. Les seuls produits de combustion considérés sont le bioxyde de carbone et l'eau. Les concentrations massiques des produits sont alors affectées et la température du mélange surestimée. Cette méthode néglige complètement la formation des polluants comme le monoxyde de carbone. Cela est dû au fait que le temps de réaction du CO est à une échelle de temps très supérieure à celle des autres produits. D'ailleurs, c'est cette même raison qui fait que le modèle d'équilibre chimique a tendance à surestimer la concentration du CO pour les mélanges riches.

Pour pallier ce problème, on pourrait scinder l'équation de réaction en plusieurs étapes successives qui tiendraient compte de la formation des produits qui nous intéressent comme le CO. Illustrons cela par l'exemple de la réaction du méthane dans l'air. Nous allons alors considérer un mécanisme réactionnel en trois étapes:

$$\begin{aligned} &CH_4 + 0,5O_2 \rightarrow CO + 2H_2 && (I) \\ &2H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2H_2O && (II) \\ &2CO + O_2 \rightleftharpoons 2CO_2 && (III) \end{aligned} \tag{2.66}$$

La détermination de la concentration des produits de réaction et de la température du mélange nécessite un processus de calcul particulier que nous pouvons décrire comme suit:

1. Dans cette première phase, il s'agit de casser la molécule de combustible en l'occurrence celle du CH_4 suivant la réaction (I). Cela permet de déterminer la

concentration de combustible non brûlé pour en déduire les concentrations de CO et H_2. Pour ce faire nous pouvons, d'une part, utiliser le modèle à chimie infiniment rapide, le modèle d'équilibre ou même le modèle de micro–flammes si les données sont disponibles. D'autre part, la concentration du combustible non brûlé peut être aussi calculée en résolvant l'équation de transport de $\widetilde{m}_{fu}$ à condition de disposer du taux de réaction de la réaction (I). Dans le cas d'un combustible formé de plusieurs hydrocarbures cette dernière alternative peut s'avérer compliquée et coûteuse. De plus, le couplage de la turbulence au taux de réaction devient alors très complexe et introduit une source d'erreur additionnelle. C'est pour ces raisons que nous préconisons la première approche.

A l'issue de cette phase, nous disposons de la concentration massique initiale $\widetilde{m}^0_{CO}$ de CO. Nous pouvons alors déduire le terme de production initiale de monoxyde de carbone P^0_{CO}.

2. Nous effectuons un calcul d'équilibre chimique des produits de la réaction suivant la réaction (II), les produits tels CO et CH_4 non brûlé étant figés. En effet, les espèces H_2, O_2 et H_2O réagissent beaucoup plus vite que le CO. Par conséquent, nous pouvons considérer que les produits H_2, O_2 et H_2O réagissent presque instantanément alors que la quantité de CO formée se limite momentanément à celle calculée à la phase 1.

3. À l'issue de la deuxième phase, nous avons la nouvelle concentration $\widetilde{m}_{O_2}$ puisqu'une partie de l'oxygène a servi à l'oxydation de H_2 en H_2O. En outre l'équilibre chimique nous permet aussi de déterminer les concentrations des radicaux comme OH et H qui serviront à déterminer le taux de réaction de CO.

Ce dernier est d'ailleurs donné par :

$$R_{CO} = min(R_{CO}^{EBM}, R_{CO}^{Arrhenius}) + P_{CO}^{0} \tag{2.67}$$

où R_{CO}^{EBM} et $R_{CO}^{Arrhenius}$ sont les taux de réactions donnés respectivement à partir de l'*Eddy Break-Up Model* et du modèle d'Arrhenius par:

$$R_{CO}^{EBM} = -\frac{\widetilde{m}_{CO}^{0} - \widetilde{m}_{CO}}{\widetilde{m}_{CO}^{0}} A_{R_{CO}} \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} \cdot min|\widetilde{m}_{CO}, \frac{\widetilde{m}_{O_2}}{s}| \tag{2.68}$$

$$R_{CO}^{Arrhenius} = \bar{\rho}^2 M_{CO} \left(k_{inverse} n_{CO_2} n_H - k_{direct} n_{CO} n_{OH}\right) \tag{2.69}$$

où $n_i = \widetilde{m}_i / M_i$ et M_i est la masse molaire de l'espèce i. Dans le cas de l'équation (2.69), nous estimons que l'oxydation de CO en CO_2 se fait presque exclusivement suivant la réaction (Gardiner (1984)):

$$CO + OH \rightleftharpoons CO_2 + H \tag{2.70}$$

Les constantes spécifiques de cette réaction s'écrivent sous la forme classique $k_s = AT^b e^{-E/RT}$. Dans le cas direct, $A = 4,4 \times 10^6\, cm^3/mol/s$, $b = 1,5$ et $E = -3,1\, kJ/mol$ alors que dans le sens inverse $A = 1,6 \times 10^{14}\, cm^3/mol/s$, $b = 0$ et $E = 110\, kJ/mol$ (Gardiner (1984)).

Une fois le taux de réaction connu, nous résolvons l'équation de conservation de $\widetilde{m}_{CO}$.

$$\nabla \cdot \left[\bar{\rho}\, \widetilde{\mathbf{U}}\, \widetilde{m}_{CO} - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{CO}}\right) \nabla \widetilde{m}_{CO}\right] = \tilde{R}_{CO} \tag{2.71}$$

4. Connaissant maintenant la concentration finale de CO, nous pouvons déduire la concentration de CO_2 suivant la réaction (III).

$$\widetilde{m}_{CO_2} = (1+s)(\widetilde{m}^0_{CO} - \widetilde{m}_{CO}) \tag{2.72}$$

où s représente le coefficient stoechiométrique de la réaction (III).

5. Une fois toutes les concentrations massiques déterminées, nous pouvons calculer la température du mélange $\widetilde{T}$ et la densité $\bar{\rho}$.

2.3.6 Comparaison des modèles de combustion

Au paragraphe (2.2) nous avons établi les relations de base qui sont communes à tous les modèles de combustion. En effet, dans chaque modèle il s'agit de déterminer le taux de mélange, la température, la densité et les concentrations massiques des espèces. La différence entre les modèles réside alors dans la manière de déterminer ces concentrations.

Dans le modèle de chimie infiniment rapide, la réaction est supposée complète ce qui permet d'exprimer les concentrations des réactifs en fonction du taux de mélange puis de déduire les concentrations des produits de la réaction (CO_2 et H_2O) grâce à la stoechiométrie de la réaction.

Pour le modèle à taux de réaction fini, nous restons dans le cadre du modèle précédent sauf que la concentration du combustible est déterminée via une équation de transport. Cela permet uniquement une meilleure approximation quant à la quantité de combustible non–brûlé.

En ce qui concerne le modèle d'équilibre chimique, nous faisons toujours l'hypothèse que la réaction est rapide, mais dans le but d'atteindre un équilibre chimique qu'il s'agit de calculer grâce à la minimisation de l'énergie de Gibbs. Nous pouvons alors obtenir les concentrations massiques des espèces en fonction du taux de mélange.

Dans le cas du modèle de micro–flammes, l'approche change puisqu'il ne s'agit plus d'émettre des hypothèses sur la vitesse de réaction mais sur la façon dont la réaction a lieu. Ainsi, en utilisant des mesures expérimentales, nous sommes en mesure d'établir la distribution des concentrations massiques des espèces en fonction du taux de mélange.

Enfin, le modèle hybride permettra de mieux prédire la concentration massique de CO tout en respectant la relativité des vitesses de formation des différents produits de réaction. Ceci comblera une lacune des modèles de la librairie CMBLIB qui soit négligent complètement le CO (chimie infiniment rapide) soit surestiment sa concentration (équilibre chimique). Il faut toutefois remarquer que dans le cas où le combustible est le méthane, le modèle de micro–flammes donne de bonnes prédictions pour le CO.

Nous remarquons donc que dans chaque modèle, la finalité est de déterminer l'évolution des concentrations en fonction du taux de mélange. Les chemins pour y arriver dépendent des hypothèses émises. Quant au calcul de l'enthalpie, de la température ou de la densité il se fait de la même manière et peut néanmoins changer si nous désirons plus de précision.

D'autre part, le recours aux fonctions de densité de probabilité augmente la précision des résultats puisqu'il permet de tenir compte de l'effet de la turbulence. Dans le modèle de chimie infiniment rapide, la considération des PDF améliore l'allure du champ de température et lui donne une forme plus physique en mettant en évidence

les forts gradients de température. Pour le modèle à taux de réaction fini, l'utilisation de PDF augmente de complexité puisque la fonction de densité de probabilité pour le traitement de $\widetilde{m}_{fu}$ est plutôt bimodale ($P = P(f, m_{fu})$) et inconnue *a priori*. Quant aux modèles d'équilibre chimique et de micro–flamme, ils sont capables d'une grande précision qui pourrait être affectée par l'omission des PDF.

2.4 Pondération

Tous les modèles présentés donnent l'état thermodynamique instantané du mélange en fonction de f. Mais, supposer que $\widetilde{m}_i = m_i(f)$ revient à ne pas tenir compte de l'effet de la turbulence sur la combustion ce qui est difficilement concevable (§(1.2)). Or, précisément, l'influence du caractère intermittent de la turbulence sur les concentrations se fait à travers le taux de mélange moyen et de sa fluctuation f''. La distribution des concentrations massiques moyennes est alors déterminée uniquement en fonction de $\tilde{f}$ et de f'' en ayant recours à une pondération statistique.

L'application de l'opérateur de moyenne statistique pour tenir compte de la turbulence sur l'expression de grandeurs comme $m_i(f)$ nécessite la connaissance de la fonction de densité de probabilité du taux de mélange $\tilde{P}(f)$ telle que:

$$\tilde{f} = \int_0^1 f\, \tilde{P}(f)\, df \tag{2.73}$$

où $\int_x^y \tilde{P}(f) df$ représente la probabilité de rencontrer, au point de l'espace considéré, un taux de mélange compris entre x et y. En général, pour toute quantité scalaire ϕ

fonction de f, la valeur moyenne est donnée par:

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \phi(f)\,\widetilde{P}(f)\,df \tag{2.74}$$

avec une exception pour l'expression de la densité moyenne qui est donnée par:

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \int_0^1 \frac{1}{\rho(f)}\,\widetilde{P}(f)\,df \tag{2.75}$$

L'expression de $\widetilde{P}(f)$ étant inconnue, il s'agit de se donner une forme qui tienne compte de $\tilde{f}$ et de la variance $g = \widetilde{f''^2}$. Pour cette étude, nous avons choisi deux formes pour $\widetilde{P}(f)$, la fonction Beta de Richardson et al. (1953) et la fonction Delta de Spalding (1971a).

La fonction Beta

La fonction Beta semble la mieux adaptée à nos calculs puisqu'elle est naturellement bornée entre 0 et 1 (Rhodes (1975)). Elle est donnée par:

$$\widetilde{P}(f) = \frac{f^{a-1}\,(1-f)^{b-1}}{\int_0^1 f^{a-1}\,(1-f)^{b-1}\,df} \tag{2.76}$$

où les paramètres a et b permettent d'ajuster $\widetilde{P}(f)$ à chaque point de calcul en fonction de $\tilde{f}$ et de g tel que:

$$a = \tilde{f}\left(\frac{\tilde{f}\,(1-\tilde{f})}{g} - 1\right) \qquad b = \frac{(1-\tilde{f})}{\tilde{f}}\,a$$

La valeur locale de la variance g est obtenue à partir de son équation de transport (Khalil (1982)):

$$\nabla \cdot (\bar{\rho}\,\widetilde{\mathbf{U}}\,g - \Gamma_g \nabla g) = C_{g1}\,\mu_{eff}\,(\nabla \tilde{f})^2 - C_{g2}\,\bar{\rho}\,\frac{\epsilon}{k}\,g \tag{2.77}$$

où le premier et le second terme du membre de droite représentent la production et la dissipation des fluctuations et où les coefficients C_{g1} et C_{g2} sont des constantes.

Les fonctions Beta présentent l'avantage de la simplicité. Elles comportent cependant un risque de comportement aberrant lorsque $\tilde{f}$ est proche de 0 ou de 1 qui conduit à des lois non–réalistes pour lesquelles $\tilde{P}(f)$ tend vers l'infini à l'une des bornes (Viollet (1986)). Pour pallier ce problème, la fonction Delta est utilisée.

La fonctions Delta

L'approche de la fonction Delta consiste à diviser le domaine en quatre régions selon les valeurs que prennent $\tilde{f}$ et g au point où l'on veut calculer la valeur moyenne d'une grandeur donnée.

- Région 1: $0 < \tilde{f} < 1$

$$\tilde{P}(f) = a_1\,[\delta(f_+) + \delta(f_-)] \tag{2.78}$$

$$a_1 = \frac{1}{2} \qquad f_+ = \tilde{f} + \sqrt{g} \qquad f_- = \tilde{f} - \sqrt{g}$$

- Région 2: $\tilde{f} < 0,5$ et $\tilde{f} - \sqrt{g} < 0$

$$\tilde{P}(f) = a_2\delta(0) + a_3\delta(f_+) \tag{2.79}$$

$$a_2 = \frac{g}{\tilde{f}^2 + g} \qquad a_3 = \tilde{f}^2 + g$$

- Région 3: $\tilde{f} > 0,5$ et $\tilde{f} + \sqrt{g} > 1$

$$\tilde{P}(f) = a_2\delta(f_-) + a_3\delta(1) \tag{2.80}$$

$$a_2 = \frac{(1-\tilde{f})^2}{(1-\tilde{f})^2 + g} \qquad a_3 = \frac{g}{(1-\tilde{f})^2 + g}$$

- Région 4: grandes oscillations de $\tilde{f}$ et $g > g_{max}$

$$\tilde{P}(f) = (1-\tilde{f})\delta(0) + \tilde{f}\delta(1) \tag{2.81}$$

$$g_{max} = (1-\tilde{f})\tilde{f}$$

2.5 Conditions aux frontières

2.5.1 Conditions d'entrée

Les vitesses à l'entrée sont généralement connues et imposées sous la forme $\tilde{u} = u_{in}$ et $\tilde{v} = v_{in}$.

Dans le cas d'écoulements turbulents, les valeurs de k et ϵ sont déduites de données expérimentales où via des estimations raisonnables sous la forme:

$$k_{in} = \lambda \tilde{U}_{in}^2 \qquad \epsilon_{in} = C_\mu \frac{k_{in}^{3/2}}{\alpha D_H} \tag{2.82}$$

où $\lambda = \frac{3}{2} I_t^2$ et I_t est l'intensité de turbulence, D_H est le diamètre hydraulique et α est une quantité qui dépend de la longueur de mélange. Les paramètres λ et α varient d'un auteur à l'autre.

Les autres variables (ρ, T, h, m_i) sont déterminées en fonction de l'état du fluide sous forme de conditions de Dirichlet. Ainsi, le taux de mélange est fixé à 1 à l'entrée du combustible et à 0 à celle de l'air.

2.5.2 Conditions de sortie et de symétrie

Le domaine est supposé suffisamment long pour que l'écoulement soit entièrement développé à la sortie. La condition frontière pour n'importe quelle variable s'écrit:

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \tag{2.83}$$

Sur l'axe de symétrie, les gradients radiaux sont pris à zéro excepté pour la vitesse radiale v où une condition de Dirichlet nulle est imposée.

2.5.3 Condition de paroi

Le traitement de la paroi demeure un problème critique dans la simulation des écoulements turbulents. Le modèle k–ϵ utilisé dans cette étude est un modèle à haut nombre de Reynolds et n'est pas applicable à proximité de la paroi où les effets visqueux sont importants, d'où le recours à la méthode de loi de paroi. La méthode consiste principalement à modéliser les effets de la parois à travers la friction qu'elle impose au fluide. Par conséquent, afin de déterminer le comportement de la vitesse dans la couche limite, les quantités τ_w et u_* sont introduites pour quantifier le taux de cisaillement et la vitesse de friction à la paroi, respectivement. Ces deux variables sont reliées par l'expression suivante:

$$\tau_w = \rho\, u_*^2 \tag{2.84}$$

où le taux de cisaillement τ_w est supposé constant jusqu'à une distance y_P de la paroi (Schiestel (1993)).

La couche limite peut être séparée en deux zones : la zone visqueuse où les effets visqueux dominent et la zone de loi logarithmique. Dans la zone visqueuse, l'équation de mouvement est réduite à:

$$\tau_w = \mu \frac{\partial u}{\partial y} \tag{2.85}$$

La vitesse de friction à un noeud P proche de la paroi est donnée par:

$$u_* = \left(\frac{\mu\, u_P}{\rho\, y_P}\right)^{1/2} \tag{2.86}$$

On définit alors une vitesse universelle adimensionnelle par:

$$u^+ = \frac{u_P}{u_*} = \frac{\rho y_P u_*}{\mu} = y^+ \tag{2.87}$$

où y^+ représente une longueur de référence.

La zone visqueuse prévaut dans la région où y^+ est inférieure à la valeur de transition y_u^+. Ainsi, si $y^+ \geq y_u^+$, le point de calcul P se trouve désormais dans la zone logarithmique. Une analyse dimensionnelle basée sur le théorème de Vaschy–Buckingham permet d'obtenir la vitesse de friction à la paroi suivant la relation:

$$u^+ = \frac{u_P}{u_*} = \frac{1}{\kappa} ln\,(E\,y^+) \tag{2.88}$$

où $E = 9.0$ et $\kappa = 0.41$ sont respectivement le coefficient de rugosité et la constante de Karman. Les valeurs de E et κ ainsi que la valeur de y_u^+ peuvent être déterminées en exprimant les conditions de transition entre la zone visqueuse et la zone logarithmique.

En supposant que la production de l'énergie cinétique de turbulence est localement égale à sa dissipation:

$$\mu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 = \rho\epsilon \tag{2.89}$$

nous obtenons les valeurs suivantes pour k et ϵ au point P:

$$k_P = \frac{u_*^2}{\sqrt{C_\mu}} \qquad\qquad \epsilon_P = \frac{|u_*|^3}{\kappa y_P} \tag{2.90}$$

Les conditions frontières à la paroi sont calculées à partir des conditions de glissement et d'imperméabilité:

$$\begin{cases} \mathbf{U_P} \cdot \mathbf{n} & = & 0 \\ \mu_{eff} \dfrac{\partial}{\partial n} (\mathbf{U}_P \cdot \mathbf{t}) & = & \tau_w\, sgn(-\mathbf{U}_P, \mathbf{t}) \end{cases} \tag{2.91}$$

où $\mathbf{n}$ est le vecteur normal à la paroi et $\mathbf{t}$ est un vecteur tangentiel défini par $\mathbf{t} = \mathbf{U}_P / \|\mathbf{U}_P\|$.

Dans le cas de conditions non adiabatiques le flux à la paroi $\dot{q}_w$ qui est défini par:

$$\dot{q}_w = \left(\frac{c_P\,\mu}{Pr} + \frac{c_P\,\mu_t}{Pr_t}\right)\left(\frac{\partial T}{\partial n}\right)_w \tag{2.92}$$

est déterminé par la relation suivante:

$$\dot{q}_w = u_* \frac{\rho\, c_P\,(T_P - T_w)}{T^+} \tag{2.93}$$

où T^+ est une température universelle adimensionnelle qui obéit à:

$$\begin{cases} T^+ = Pr\, y^+ & y^+ \leq y_T^+ \\ T^+ = Pr_t\,(u^+ + \Psi) & y^+ > y_T^+ \end{cases} \tag{2.94}$$

où la valeur de transition y_T^+ est donnée par:

$$y_T^+ = \frac{Pr_t}{\kappa Pr}\left(ln(E y_T^+) + \Psi\kappa\right) \tag{2.95}$$

La fonction empirique Ψ est connue par la corrélation de résultats d'expérience:

Patankar et Spalding (1970):

$$\Psi = 3,68\left(\frac{Pr}{Pr_t}\right)^{-1/4}\left(\frac{Pr}{Pr_t} - 1\right)$$

Jayatilleke (1969):

$$\Psi = 9,24\left[\left(\frac{Pr}{Pr_t}\right)^{3/4} - 1\right]\left[1 + 0,28\,exp\left(-0,007\,\frac{Pr}{Pr_t}\right)\right]$$

En utilisant une formulation basée sur les profils universels de vitesse et de température, la prédiction du flux de chaleur pariétal peut être biaisée. La normalisation basée sur u_* présente des lacunes pour les écoulements décollés pour lesquels le frottement vient à s'annuler. En effet, au voisinage d'un point de stagnation où le taux de cisaillement est nul, le flux de chaleur tend vers zéro (équation (2.93)) ce qui est contraire aux observations expérimentales qui prédisent plutôt un flux maximal dans cette région (Ignat et al. (1996)).

Pour pallier ce problème, nous avons recours à une formulation qui a largement été utilisée dans les techniques de volumes finis (Pun et Spalding (1977)) et qui permet une plus grande généralité en prenant $\sqrt{k_P}$ comme échelle de vitesse. Dans ce cas, une condition de Neumann nulle est imposée sur k au point P et une deuxième vitesse de référence est calculée à partir de l'énergie cinétique de turbulence:

$$u_\tau = \sqrt{k_P}\, C_\mu^{1/4} \tag{2.96}$$

La relation $u^+(y^+)$ reste formellement identique mais les échelles de normalisation sont différentes:

$$u^+ = \frac{u_P}{u_*} \qquad\qquad y^+ = \frac{\rho y_P u_\tau}{\mu} \tag{2.97}$$

Le taux de cisaillement et le flux de chaleur pariétaux deviennent:

$$\tau_w = \rho u_* u_\tau \qquad\qquad \dot{q}_w = u_\tau \frac{\rho\, c_P\, (T_P - T_w)}{T^+} \tag{2.98}$$

Puisque la vitesse u_τ est basée sur l'énergie cinétique de turbulence, elle demeure non nulle aux points de stagnation et de rattachement. Cette propriété permet d'avoir,

dans ces régions, des flux de chaleur non nuls qui concordent avec les constatations expérimentales.

Les conditions frontières pour toutes les autres variables sont obtenues en supposant que les parois sont adiabatiques et non poreuses. Pour une variable scalaire ϕ, cela se traduit par:

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \tag{2.99}$$

À ce niveau, il y a deux façons de choisir la frontière de calcul pariétale. La première consiste à décaler le domaine de calcul du domaine réel par une distance y_P, et ce quelle que soit la grandeur physique. Dans la deuxième alternative, seul le domaine de calcul de k et ϵ est décalé de la paroi (figure (2.5)). Une étude comparative de ces deux méthodes a été menée et les détails peuvent être trouvés dans (Rida (1993)). Dans cette étude, la première approche est utilisée.

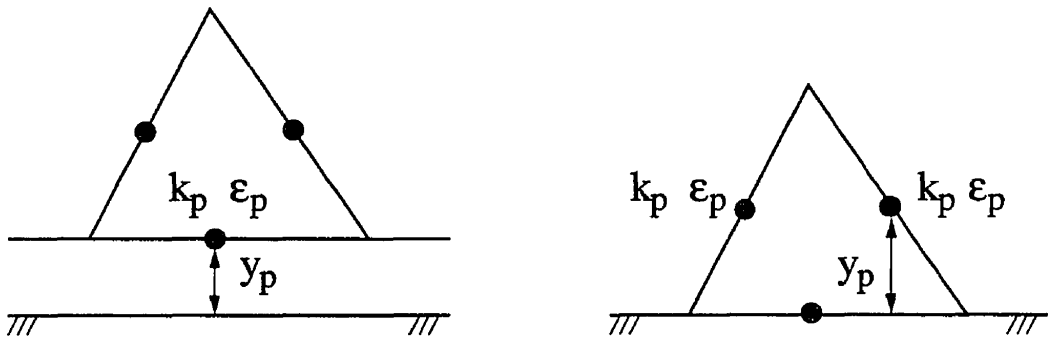


Figure 2.5: Domaine de calcul avec loi de paroi.

2.6 Résumé des conditions de combustion et de simulation

Dans ce qui suit, nous allons résumer les hypothèses et les restrictions formulées auparavant et nous présenterons un tableau récapitulatif des équations de base.

2.6.1 Hypothèses et restrictions

- Géométrie
  - bidimensionelle
  - axisymétrique
- Transfert de chaleur
  - parois adiabatiques, température fixée ou flux de chaleur.
  - absence de radiation
  - coefficients de diffusions égaux à ceux des espèces
- Turbulence
  - modèle $k-\epsilon$
  - loi de paroi
- Combustion
  - flamme de diffusion
  - combustible monophasique gazeux
  - coefficients de diffusion égaux pour toutes les espèces
  - PDF pour l'interaction turbulence–réaction
- Formulation
  - variables primitives (u,v,p)

2.6.2 Résumé des équations de base

La forme générale de l'équation de transport est donnée par:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(r\bar{\rho}\tilde{u}\phi\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(r\bar{\rho}\tilde{v}\phi\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(r\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(r\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial y}\right) + S_\phi \qquad (2.100)$$

Les valeurs de ϕ, Γ et S_ϕ correspondant aux différentes variables sont présentées au tableau (2.1). Dans le cas cartésien bidimensionnel r et α_{axi} prennent respectivement les valeurs 1 et 0, alors que dans le cas axisymétrique r représente le rayon et $\alpha_{axi} = 1$.

Tableau 2.1: Valeurs de ϕ, Γ et S_ϕ pour l'équation générale de transport.

Variable	ϕ	Γ	S_ϕ
Masse	1	0	0
Vitesse axiale	$\tilde{u}$	μ_{eff}	$\frac{\partial}{\partial x}\left(r\mu_{eff}\frac{\partial\tilde{u}}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(r\mu_{eff}\frac{\partial\tilde{v}}{\partial x}\right)$ $-r\frac{\partial\overline{P}}{\partial x} - \frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial x}\left(r\mu_t\nabla\cdot\widetilde{\mathbf{U}}\right)$
Vitesse radiale	$\tilde{v}$	μ_{eff}	$\frac{\partial}{\partial x}\left(r\mu_{eff}\frac{\partial\tilde{u}}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(r\mu_{eff}\frac{\partial\tilde{v}}{\partial y}\right) - r\frac{\partial\overline{P}}{\partial y}$ $-\left(2\mu_{eff}\frac{\tilde{v}}{r}\right)\alpha_{axi} - \frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial y}\left(r\mu_t\nabla\cdot\widetilde{\mathbf{U}}\right)$
Énergie cinétique	k	$\mu + \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k}$	$r\left(P_k - \bar{\rho}\epsilon\right)$
Taux de dissipation	ϵ	$\mu + \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\epsilon}$	$r\frac{\epsilon}{k}\left(C_{\epsilon 1}P_k - C_{\epsilon 2}\bar{\rho}\epsilon\right)$
Taux de mélange	$\tilde{f}$	$\mu + \frac{\mu_{eff}}{\sigma_f}$	0
Fluctuation	g	$\mu + \frac{\mu_{eff}}{\sigma_g}$	$rC_{g1}\mu_{eff}(\nabla\tilde{f})^2 - rC_{g2}\bar{\rho}\frac{\epsilon}{k}g$
Enthalpie	$\tilde{h}$	$\mu + \frac{\mu_{eff}}{\sigma_h}$	0
Combustible	$\widetilde{m}_{fu}$	$\mu + \frac{\mu_{eff}}{\sigma_{m_{fu}}}$	$-r\frac{\widetilde{m}_{fu,b}}{\widetilde{m}_{fu}+\widetilde{m}_{fu,b}}A_{R_{fu}}\bar{\rho}\frac{\epsilon}{k}\cdot min\lvert\widetilde{m}_{fu}, \frac{\widetilde{m}_{O_2}}{s}\rvert$

Chapitre 3

Solution numérique

Les équations qui régissent les écoulements turbulents réactifs forment un système d'équations de convection–diffusion avec terme source qui sera résolu numériquement. Nous présentons dans ce chapitre les différentes étapes de la résolution.

3.1 Discrétisation

Les équations qui régissent l'écoulement sont discrétisées par un schéma de volumes finis qui représente l'extension de la méthodologie des maillages décalés aux maillages non structurés telle que développée par Rida (1993). La méthode utilise une formulation en variables primitives (u,v,p) basée sur un maillage triangulaire. À l'opposé de l'approche de Nicolaïdes (1993), les centroïdes des triangles sont utilisés à la place des *circumcenters* pour définir le maillage dual. Les vitesses sont donc placées aux milieu des côtés des triangles alors que la pression est située au centroïde. Toutes les autres variables, comme k et ϵ sont aussi stockées aux côtés.

Le volume de contrôle pour l'équation de continuité est le triangle lui–même alors que le co–volume pour les équations de mouvement et les équations de transport est un polygone centré sur le côté du triangle (figure (3.1)).

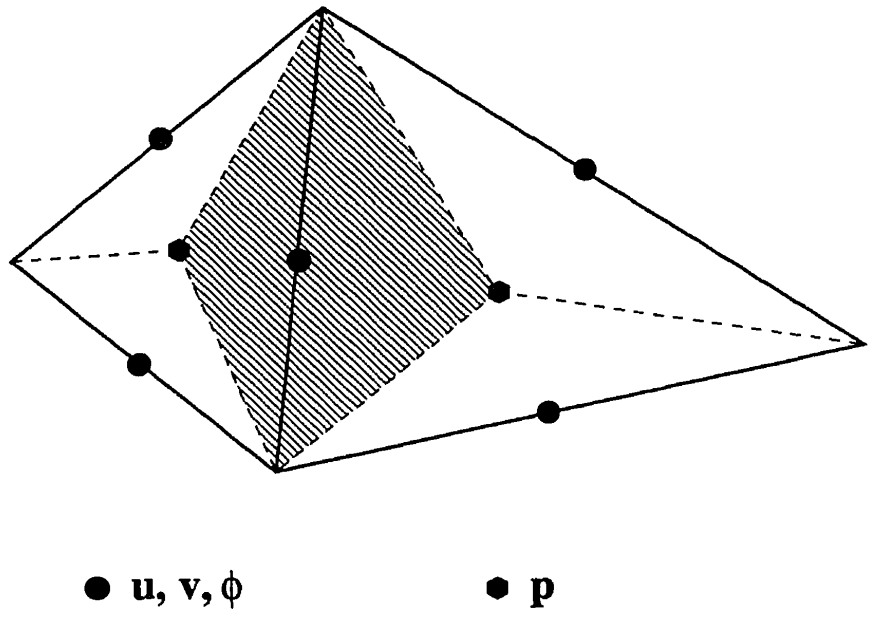


Figure 3.1: Volume de contrôle.

3.1.1 Discrétisation d'une équation de transport

L'équation de bilan générale pour les écoulements turbulents réactifs peut être écrite sous la forme générique suivante (par soucis de simplicité nous enlevons le symbole de moyenne):

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{U}\phi - \Gamma_\phi \nabla \phi) = S_\phi \tag{3.1}$$

où Γ_ϕ est le coefficient de diffusion de la variable ϕ.

En intégrant l'équation (3.1) sur un volume de contrôle Ω_C et en utilisant le théorème de Gauss, nous obtenons la forme intégrale suivante:

$$\oint_{\partial\Omega_C} (\rho \mathbf{U}\phi - \Gamma_\phi \nabla\phi) \cdot \mathbf{n} d\Gamma = \int_{\Omega_C} S_\phi d\Omega \tag{3.2}$$

ou encore

$$\oint_{\partial\Omega_C} (\rho \mathbf{U}\phi - \Gamma_\phi \nabla\phi) \cdot \mathbf{n} r dl = \int_{\Omega_C} S_\phi r dA \tag{3.3}$$

Dans le cas bidimensionnel: $r = 1$, $d\Omega = zdA$ et $d\Gamma = zdl$, alors que pour le cas axisymétrique: $r = y$, $d\Omega = 2\pi r dA$ et $d\Gamma = 2\pi r dl$

La discrétisation de l'équation intégrale (3.3) pour un volume de contrôle centré au point de calcul i (figure (3.2)) conduit à l'expression usuelle (Patankar (1980)):

$$a_i\phi_i + \sum_{k=1}^{4} a_k\phi_k = d_i^\phi \tag{3.4}$$

où la sommation est sur les voisins du point de calcul i. Une caractéristique très intéressante de ce schéma est que le nombre de voisins est toujours quatre. Ceci permet de réduire la largeur de bande de la matrice spécialement lorsqu'une numérotation judicieuse est utilisée.

3.1.2 Fonction d'interpolation

Plusieurs fonctions d'interpolations ont été étudiées pour la discrétisation du terme de convection (Rida (1993)). La méthode du *Skewed Mass-Weighted Upwind* a été

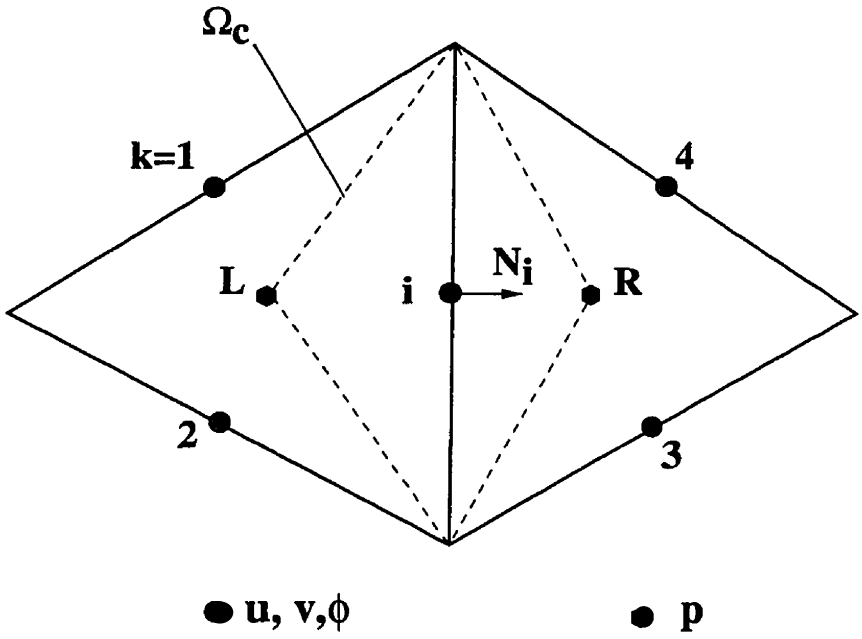


Figure 3.2: Nomenclature du volume de contrôle.

retenue pour sa simplicité puisque les autres ont abouti à des résultats sensiblement identiques. En effet, dans le cas d'écoulements turbulents *a fortiori* avec réaction chimique, l'écoulement est plutôt gouverné par les termes sources que par le terme convectif ou le terme diffusif.

La méthode du *Skewed Mass–Weighted Upwind* de Schneider et Raw (1986) pour éléments quadrilatères a été étendue aux éléments triangulaires de forme quelconque (Rida et al. (1997)). Ainsi, en utilisant l'approximation du point milieu, la valeur de ϕ au point d'intégration p (figure (3.3)) est déterminée comme suit:

$$\dot{m}_p > 0 \qquad \begin{cases} \phi_p &= f_p\phi_t + (1 - f_p)\phi_1 \\ f_p &= \min\left[\max\left(\dfrac{\dot{m}_t}{\dot{m}_p}, 0\right), 1\right] \end{cases} \tag{3.5}$$

$$\dot{m}_p < 0 \qquad \begin{cases} \phi_p &= f_p\phi_q + (1-f_p)\phi_2 \\ f_p &= \min\left[\max\left(\frac{\dot{m}_q}{\dot{m}_p}, 0\right), 1\right] \end{cases} \tag{3.6}$$

où $\dot{m}_p = [r\rho(\mathbf{U}\cdot\mathbf{n})]_p\, l_{ao}$ est le débit massique qui traverse la face p, $\dot{m}_q$ et $\dot{m}_t$ sont les débits massiques à travers les faces q et t, et l_{ao} est la longueur de la face p. En combinant les expressions des équations (3.5) et (3.6) avec des expressions similaires pour les faces q et t, les valeurs de ϕ_p, ϕ_q et ϕ_t sont données par:

$$\begin{aligned} \phi_p &= \zeta_p\phi_t + \varsigma_p\phi_1 + \sigma_p\phi_2 + \chi_p\phi_q \\ \phi_q &= \zeta_q\phi_p + \varsigma_q\phi_2 + \sigma_q\phi_3 + \chi_q\phi_t \\ \phi_t &= \zeta_t\phi_q + \varsigma_t\phi_3 + \sigma_t\phi_1 + \chi_t\phi_p \end{aligned} \tag{3.7}$$

où ζ_j, ς_j, σ_j et χ_j pour $(j = p, q, t)$ sont des coefficients qui prennent les valeurs suivantes:

$$\begin{cases} \dot{m}_j > 0 \;:\; \zeta_j = f_j, \quad \varsigma_j = 1-f_j, \quad \sigma_j = 0, \quad \chi_j = 0 \\ \dot{m}_j < 0 \;:\; \zeta_j = 0, \quad \varsigma_j = 0, \quad \sigma_j = 1-f_j, \quad \chi_j = f_j \end{cases} \tag{3.8}$$

Les valeurs de ϕ_p, ϕ_q et ϕ_t sont utilisées pour calculer les flux aux faces d'intégration.

La discrétisation du terme de diffusion est basée sur une interpolation linéaire au niveau du triangle. Quant aux termes sources, ils sont supposés constants par triangle et sont linéarisés suivant les règles de Patankar (1980) sous la forme:

$$S_\phi = S_{\phi_1} + S_{\phi_2}\phi \tag{3.9}$$

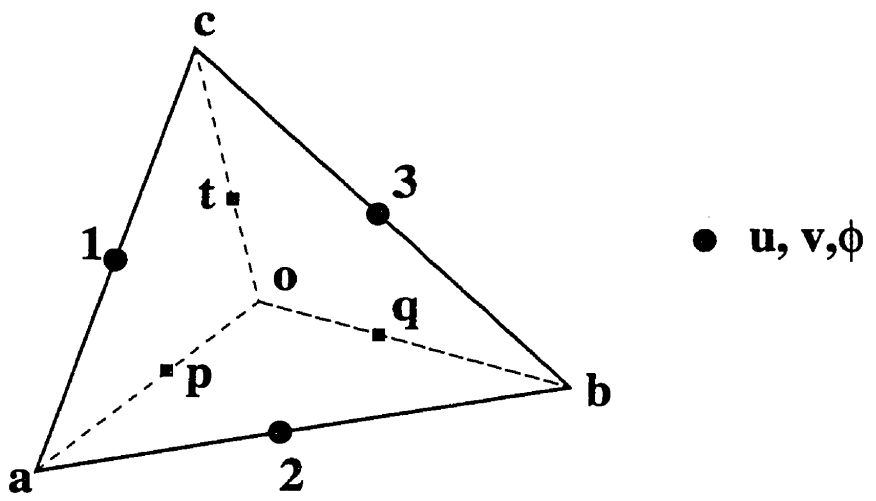


Figure 3.3: Détails de discrétisation pour la fonction d'interpolation.

3.1.3 Traitement de la pression

La pression étant considérée constante par élément, la discrétisation des équations de mouvement sous la forme de l'équation (3.4) donne:

$$\begin{cases} a_i u_i + \sum_{k=1}^{4} a_k u_k &= -\Delta p_i r_i l_i N_{ix} + d_i^u \\ a_i v_i + \sum_{k=1}^{4} a_k v_k &= -\Delta p_i r_i l_i N_{iy} + d_i^v \end{cases} \tag{3.10}$$

où $\mathbf{N}_i$ est un vecteur normal dirigé du triangle L vers le triangle R comme décrit à la figure (3.2) et $\Delta p = p_R - p_L$.

Le volume de contrôle pour la pression est le triangle lui–même. La forme discrète de l'équation de continuité s'écrit alors:

$$\sum_{i=1}^{3} \rho_i r_i (u_i n_{ix} + v_i n_{iy}) l_i = 0 \tag{3.11}$$

où l_i et $\mathbf{n}_i$ sont respectivement la longueur et la normale extérieure du côté i.

Le choix de la procédure de résolution conditionne le couplage entre la vitesse et la pression. Ainsi, quand les équations de mouvement sont séparées de l'équation de continuité, une équation pour la pression est établie en substituant les équations (3.10) dans la relation (3.11). C'est le cas des algorithmes type SIMPLER. Par ailleurs, il est possible d'employer l'approche directe où le système (3.10 et 3.11) est résolu de manière couplée: c'est la procédure qui sera utilisée dans cette étude.

3.2 Calcul numérique des PDF

Le calcul intégral des fonctions de densité de probabilité, en particulier la fonction Beta, est très coûteux et nécessite une attention particulière afin de réduire au maximum le temps de calcul. En effet, la forme de $\widetilde{P}(f)$ n'est pas la même partout dans le domaine et le recours systématique à la fonction Beta peut s'avérer aussi coûteux qu'inutile.

Quand $\tilde{f}$ est proche des bornes 0 et 1 ou lorsque les valeurs de la variance sont trop grandes la fonction Beta prend des formes non réalistes et la fonction delta est plus appropriée. En outre, lorsque la valeur de g est très petite, on est quasiment en présence d'un impulsion de Dirac puisque même avec un nombre faramineux de points d'intégration, il est très difficile de converger avec une Beta. Il faut donc trouver un moyen d'éviter ces calculs inutiles qui peuvent parfois couvrir une grande partie du domaine. Pour ce faire, il faut prévoir la forme que peut prendre $\widetilde{P}(f)$ dans la zone de flamme et ailleurs dans le domaine de calcul.

3.2.1 Forme des PDF

Il est clair que dans le jet du combustible, $\widetilde{P}(f)$ est une impulsion de Dirac puisque f est exactement égal à 1 (figure (3.4b)). De même, très loin en aval de la flamme, $\widetilde{P}(f)$ prend la forme d'une impulsion de Dirac en 0 (figure (3.4a)). Dans le voisinage immédiat du conduit de combustible, $\widetilde{P}(f)$ est plutôt une combinaison de deux impulsions de Dirac l'une en $f = 1$ et l'autre en $f = 0$ pour témoigner du passage d'une particule de combustible ou de comburant, respectivement (figure (3.4c)). C'est dans la flamme elle même que $\widetilde{P}(f)$ commence à prendre une forme gaussienne à mesure qu'on s'éloigne du jet et que la variance $\widetilde{f''^2}$ devient de plus en plus petite (figure (3.4d)) et c'est dans cette zone que le recours à la fonction Beta est justifié. La figure (3.5) donne l'allure de la fonction Beta pour différentes valeurs de la valeur moyenne du taux de mélange et de sa variance. Les graphes y représentent l'évolution de $\widetilde{P}(f)/\widetilde{P}(f)_{max}$ dans l'intervalle [0,1] pour différents couples ($\tilde{f}$,g).

Toutefois, ces détails sur la forme de $\widetilde{P}(f)$ demeurent qualitatifs et ne renseignent pas sur l'étendue de chaque forme dans le domaine. Le recours à des limiteurs, basés sur les valeurs extrêmes que peuvent prendre $\tilde{f}$ et g, pour réduire l'utilisation de la fonction Beta pourrait pénaliser la précision des résultats. En effet, ces limites ne sont pas absolues et varient d'un problème à l'autre ce qui rend difficile leur généralisation.

3.2.2 Intégration numérique des PDF

Le problème consiste à calculer numériquement, pour chaque variable $\tilde{\phi}$, en chaque point de calcul i défini par son taux de mélange moyen $\tilde{f}_i$ et sa variance $g_i = \widetilde{f''^2}_i$,

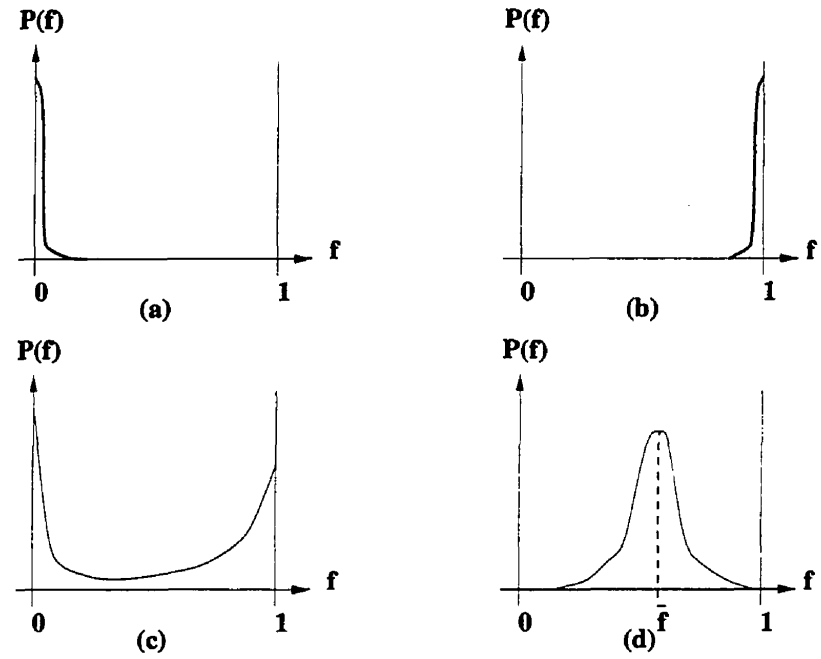


Figure 3.4: Forme de $\widetilde{P}(f)$ à différents endroits du domaine.

l'intégrale suivante:

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \phi(f)\, \widetilde{P}(f)\, df \tag{3.12}$$

qui une fois discrétisée devient:

$$\tilde{\phi}_i = \sum_{k=0}^{N} a_k\, \phi(f_k)\, \widetilde{P}(f_k, \tilde{f}_i, g_i)\, (\Delta f)_k \tag{3.13}$$

où a_k sont des coefficients d'intégration et N est le nombre de points d'intégration dans l'intervalle [0,1]. Les expressions de $\widetilde{P}(f)$ et de $\phi(f)$ sont à déterminer.

La détermination de $\phi(f)$ peut se faire soit par un calcul systématique avec un nombre de points N choisi en fonction de la précision recherchée ce qui risque d'être coûteux, soit par une tabulation limitée à un nombre de points N fixé d'avance ce qui peut en revanche affecter la précision.

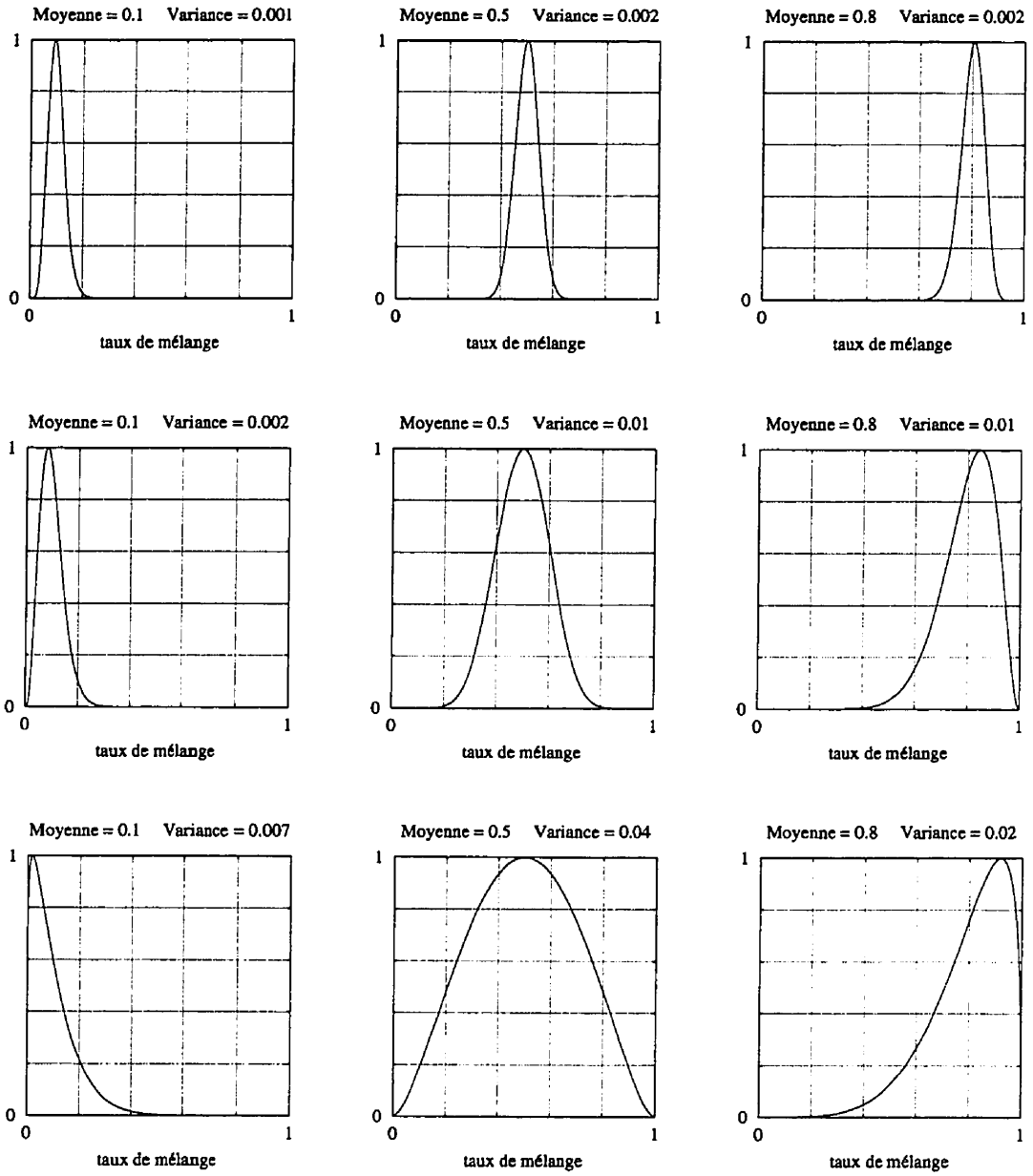


Figure 3.5: Allure de la fonction de densité de probabilité Beta $(\tilde{P}(f)/\tilde{P}(f)_{max})$. De gauche à droite: $\tilde{f} = 0,1; 0,5; 0,8$. La variance g augmente de haut en bas.

En ce qui concerne la forme de $\tilde{P}(f)$, elle est fonction de la région du domaine où le calcul a lieu et dépend par conséquent des conditions d'écoulement, notamment $\tilde{f}$ et g. $\tilde{P}(f)$ peut donc prendre la forme d'une fonction Beta, d'une impulsion de Dirac ou d'une fonction Delta (constituée de deux pôles de Dirac). Généralement, la fonction Beta est utilisée en premier lieu puisqu'elle est la mieux adaptée à nos calculs et au cas où l'intégration ne converge pas pour une des raisons citées auparavant, elle est remplacée par une fonction Delta ou Dirac. Pour éviter d'appeler systématiquement la fonction Beta, un pré–calcul est effectué au début de chaque cas test pour construire une base de données qui permet de tabuler la forme de $\tilde{P}(f)$ pour $0 \leq \tilde{f} \leq 1$ et $0 \leq g \leq g_{max}$, et ce pour chaque variable $\tilde{\phi}$ à moyenner. Ainsi, lorsqu'il s'agira de calculer $\tilde{\phi}_i$, connaissant le couple $(\tilde{f}_i, g_i)$, il sera possible de pointer vers la forme de $\tilde{P}(f)$ à utiliser.

Somme toute, que $\phi(f)$ soit tabulée ou non et que la forme de $\tilde{P}(f)$ soit prédéterminée ou pas, il est nécessaire d'optimiser le calcul de l'intégrale (3.13). Nous utilisons la formule de *Simpson* $\frac{1}{3}$ qui a une erreur locale de $O(h^5)$. Elle est définie pour une fonction γ sur un intervalle $[x_1, x_3]$ de longueur $2h$ par:

$$\int_{x_1}^{x_3} \gamma(x)\, dx = \frac{h}{3}\,(\gamma_1 + 4\gamma_2 + \gamma_3) \tag{3.14}$$

Toutefois, aux bornes 0 et 1 où la PDF présente des singularités, une expression décalée de la formule de *Simpson* est utilisée avec toujours une erreur locale de $O(h^5)$. Par exemple, sur l'intervalle $]x_0, x_2]$ de longueur de $2h$ l'intégrale s'écrit:

$$\int_{x_0}^{x_2} \gamma(x)\, dx = \frac{h}{3}\,(8\gamma_1 - 5\gamma_2 + 4\gamma_3 - \gamma_4) \tag{3.15}$$

Par ailleurs, nous avons employé une stratégie qui consiste à réaliser des convergences locales au lieu d'une convergence globale. Par exemple, le domaine de calcul [0,1] est subdivisé en cinq sous–intervalles dotés chacun d'un nombre de points d'intégration maximal n_{max}. Tant que la convergence n'est pas atteinte dans tous les sous–intervalles, le nombre de point d'intégration est augmenté dans les sous–intervalles non convergés sans atteindre n_{max}. Si n_{max} est dépassé dans l'un des sous–intervalles, la fonction Beta est écartée et nous avons recours à une fonction Delta ou Dirac.

Une étude comparative est effectuée au chapitre 4 pour mettre en évidence les avantages et les inconvénients de toutes les alternatives présentées dans ce paragraphe concernant $\tilde{P}(f)$, $\phi(f)$ et la valeur de N (ou n_{max}).

3.3 Solution du système

La discrétisation des équations de convection–diffusion mène à des systèmes d'équations algébriques linéarisés de la forme:

$$A\Phi = B \tag{3.16}$$

Pour faciliter la résolution du système (3.16), les points du domaines sont numérotés de manière à réduire la taille de la bande de la matrice A chose qui est facilitée par le fait que chaque point de calcul possède au plus quatre voisins. La résolution est effectuée par une méthode directe et efficace qui utilise la décomposition LU et le stockage en lignes de ciel développée par Page et al. (1989).

Par ailleurs, pour faciliter la convergence, il est souvent nécessaire de sous–relaxer la solution:

$$\Phi^{k+1} = \Phi^k + \omega(\Phi^{k+1} - \Phi^k) \tag{3.17}$$

où ω est le facteur de relaxation et k représente le niveau d'itération. Les facteurs de relaxation sont assez sévère pour la viscosité turbulente et la densité ($\omega < 0{,}5$) et varient entre 0,5 et 0,9 pour les autres variables. Mais, ces valeurs sont très influencées par la complexité du cas traité (nombre de Reynolds, vitesse d'injection des réactifs, complexité du domaine, loi de paroi ...)

La procédure générale de calcul se déroule comme suit:

1. Estimation initiale de toutes les variables.
2. Calcul des conditions frontières pour u et v à la paroi.
3. Calcul des coefficients de l'équation de mouvement et de continuité.
4. Résolution couplée de (u,v,p).
5. Calcul des conditions de paroi pour k et ϵ
6. Calcul de k et ϵ
7. Calcul de la viscosité turbulente μ_t
8. Calcul des variables scalaires nécessaires (f, h, g, m_{fu})
9. Calcul des concentrations massiques, de la température et de la densité suivant le modèle choisi
10. Pondération par fonction de densité de probabilité si requis.
11. Vérifier la convergence et retourner à l'étape 2 si nécessaire.

Chapitre 4

Validations

Il s'agit de valider toutes les stratégies numériques présentées dans le chapitre précédent, à savoir:

- établir l'ordre du schéma en turbulence;
- comparer les approches logarithmique et originale du modèle $k-\epsilon$;
- valider le schéma pour le type d'écoulement turbulent réactif;
- valider la loi de paroi à deux échelles de vitesse;
- comparer la procédure COUPLÉE à l'algorithme SIMPLER;
- valider les changements apportés au calcul numérique de la pondération par fonction de densité de probabilité.

Les validations seront effectuées sur des cas analytiques ou expérimentaux et comparées à des données expérimentales ou à d'autres calculs numériques puisés dans la littérature.

4.1 Ordre du schéma numérique

L'ordre du schéma de volumes finis utilisé a déjà été établi dans une étude antérieure (Rida et al. (1997)). Toutefois, cette validation n'a été effectuée que dans le cas d'un écoulement laminaire. Il est donc nécessaire de tester le comportement du schéma et d'établir son ordre lorsque l'écoulement devient turbulent.

Pour ce faire, deux études de convergence de maillage ont été conduites en utilisant des cas tests où les solutions analytiques sont connues. Il s'agit de la couche cisaillée de Schlichting (1960) et de la cavité carrée de Smith et Hutton (1982).

Pour calculer l'erreur exacte, la norme L_2 a été utilisée pour tous les champs (u, v, p, k et ϵ). En effet, comme aucune de ces variables n'est continue sur le domaine de calcul, l'utilisation de la norme H_1 serait une erreur. L'expression de l'erreur exacte est donnée par:

$$E_{\phi}^{exacte} = ||\phi - \phi^{exacte}||_{0,\Omega} \tag{4.1}$$

où

$$||\phi||_{0,\Omega} = \left[\int_{\Omega} |\phi|^2 \, d\Omega\right]^{\frac{1}{2}} \tag{4.2}$$

Comme la pression p est définie à une constante près, nous avons introduit la pression normalisée $\hat{p}$ définie par:

$$\hat{p} = p - p_{ref} \qquad \text{avec} \qquad p_{ref} = \frac{\int_{\Omega} p d\Omega}{\int_{\Omega} d\Omega} \tag{4.3}$$

4.1.1 Couche cisaillée

Il s'agit d'une couche de cisaillement isobare et isotherme inspirée de la solution analytique de Schlichting (1960). La solution est donnée par:

$$u = u_1 \left[\left(\frac{1+r}{2} \right) + \left(\frac{1-r}{2} \right) erf \left(\frac{\sigma y}{x} \right) \right] \qquad v = u_1 \left(\frac{1-r}{2} \right) + \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{\sigma y}{x}\right)^2}$$

$$k = k_0 \left[c_k + e^{-\left(\frac{\sigma y}{x}\right)^2} \right] \qquad \epsilon = \frac{\epsilon_0}{x} \left[c_k + e^{-\left(\frac{\sigma y}{x}\right)^2} \right]^2 \tag{4.4}$$

$$\mu_t = \mu_{t_0} x$$

où les valeurs suivantes sont utilisées: $u_1 = 1$, $r = 0$, $\sigma = 13.5$ et

$$k_0 = \frac{343}{75000} u_1^2 (1-r) \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}} \qquad \epsilon_0 = \frac{343}{22500} C_\mu u_1^3 (1-r)^2 \frac{\sigma^2}{\pi}$$

$$\mu_{t_0} = \frac{343}{250000} \rho u_1$$

Pour que les équations de mouvement et de turbulence vérifient ces expressions, les termes sources appropriés ont été ajoutés.

Le problème est résolu sur un rectangle (Ω) défini par $[100, 300] \times [-75, 75]$. Des conditions de Dirichlet sont imposées à toutes les variables (u, v, k et ϵ) sur les quatre frontières excepté pour la frontière $y = -75$ où il y a une condition de Neumann nulle sur v pour aider à maintenir le niveau de pression à zéro. Des calculs ont été effectués sur sept maillages allant de (20×15) à (120×90) ou encore pour un pas variant de $h = 10$ à $h = 1,7$.

La figure (4.1) présente l'évolution du logarithme des erreurs exactes de k, de ϵ, de la pression p et de la norme du vecteur vitesse $\mathbf{U}$ en fonction de $ln(h)$. En calculant les pentes des droites lorsque celles–ci ne varient plus, nous déduisons que le schéma est *a priori* d'ordre un.

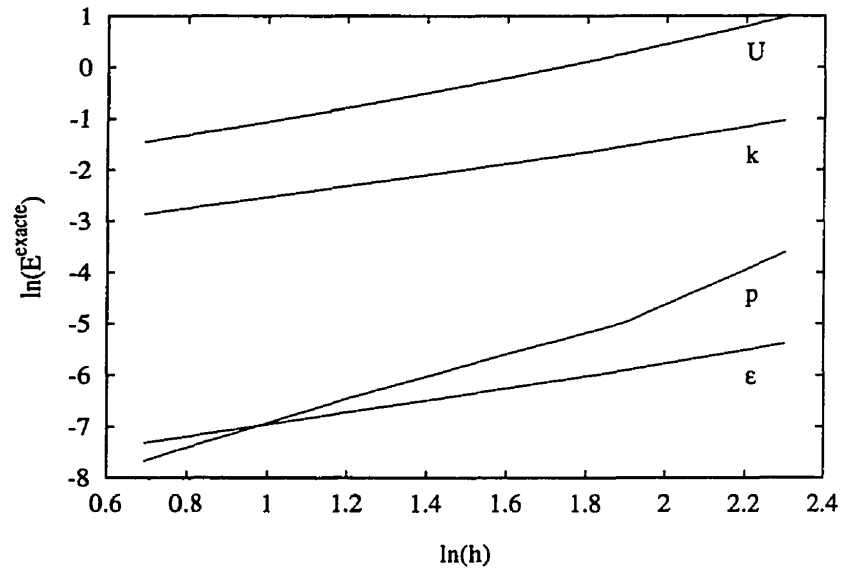


Figure 4.1: Évolution de l'erreur exacte en fonction du pas h pour la couche cisaillée de Schlichting (1960).

Toutefois, pour une meilleure précision nous préférons tourner le domaine de calcul d'un certain angle θ pour établir l'influence de l'orientation du maillage sur l'ordre du schéma. En plus du cas $\theta = 0°$, des calculs ont été effectués pour différentes valeurs de θ (30°, 45°, 60°, et $-$ 45°). Le tableau (4.1) résume les résultats obtenus.

Les résultats varient marginalement d'une orientation à l'autre. Peut–on alors affirmer que l'ordre du schéma est 1? Ce cas test, s'il nous renseigne sur la capacité du schéma à reproduire des résultats turbulents avec précision et à bien se comporter dans le

Tableau 4.1: Ordre du schéma dans le cas de la couche cisaillée de Schlichting (1960) pour différentes inclinaisons du maillage.

	$\|\mathbf{U}\|$	p	k	ϵ
$\theta = 0°$	$1,249$	$2,399$	$1,065$	$1,163$
$\theta = 30°$	$1,253$	$2,395$	$1,070$	$1,165$
$\theta = 45°$	$1,264$	$2,387$	$1,071$	$1,166$
$\theta = 60°$	$1,276$	$2,358$	$1,074$	$1,168$
$\theta = -45°$	$1,258$	$2,399$	$1,072$	$1,166$

cas de couches cisaillées avec de fortes variations de k et ϵ, demeure un problème unidimensionnel sans recirculation ce qui n'est pas tout à fait le genre de problèmes que nous sommes amenés à traiter. D'où la nécessité de recourir à un test de validation qui soit bidimensionnel avec recirculation.

4.1.2 Cavité carrée

Pour établir la performance de nouveaux schémas Smith et Hutton (1982) proposent de résoudre un problème où le champ de vitesse est, par définition, à divergence nulle tel que:

$$u(x,y) = 2y(1-x^2) \qquad v(x,y) = -2x(1-y^2) \tag{4.5}$$

Le caractère solénoïdal du champs de vitesse ($\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$) donne lieu à des lignes de tourbillon qui confèrent à l'écoulement un caractère bidimensionnel, à l'opposé du cas

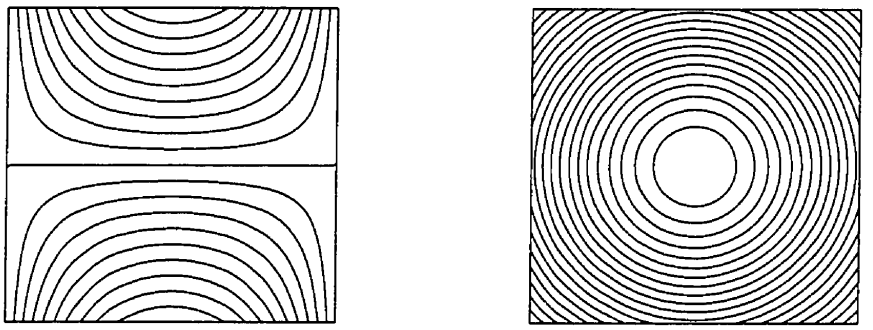
test précédent (voir figure (4.2) pour les isolignes de u et de k). La pression et les variables de turbulence ont été fixées aux expressions suivantes:

$$p(x,y) = x^2 + y^2 \tag{4.6}$$

$$k(x,y) = e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)} \qquad \epsilon(x,y) = C_\mu\, e^{\frac{1}{2}(x^2+y^2)} \tag{4.7}$$

$$\mu_t(x,y) = e^{-\frac{3}{2}(x^2+y^2)} \tag{4.8}$$

Les termes sources des équations de mouvement et de turbulence ont été ajustés de manière à vérifier ces expressions analytiques.



(a) vitesse u *(b)* Énergie cinétique de turbulence k

Figure 4.2: Isolignes de u et de k pour le cas de Smith et Hutton (1982).

Le problème est résolu sur le carré (Ω) défini par $[-1,1] \times [-1,1]$. Des conditions de Dirichlet sont imposées à toutes les variables (u, v, k et ϵ) sur les quatre frontières. Les calculs sont effectués sur neuf maillages différents allant de (10×10) à (90×90) ou encore pour un pas h allant de $0,222$ à $0,025$.

La figure (4.3) montre l'évolution du logarithme des erreurs exactes de k, ϵ, p et de la norme de U en fonction de $ln(h)$. En calculant les pentes des droites lorsque celles–ci ne varient plus, nous obtenons les valeurs du tableau (4.2)

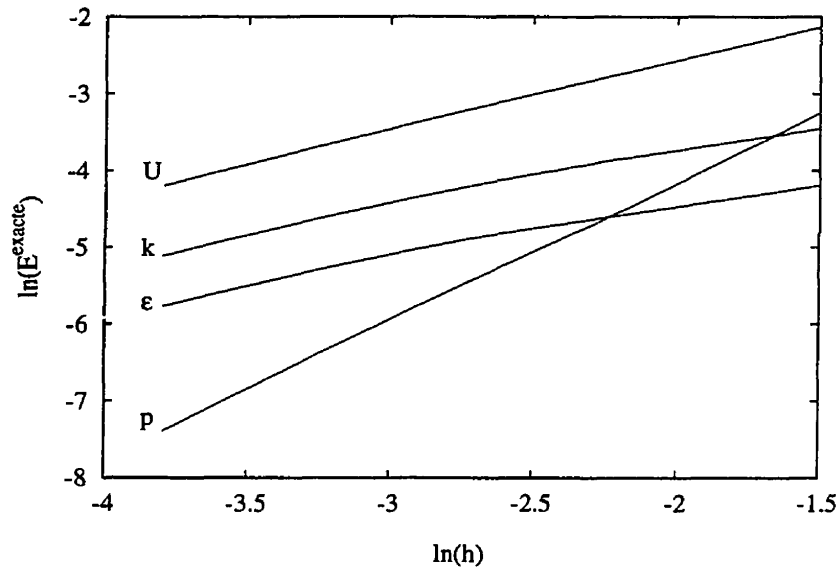


Figure 4.3: Évolution de l'erreur exacte en fonction du pas h pour le cas analytique de Smith et Hutton (1982).

Tableau 4.2: Ordre du schéma dans le cas de Smith et Hutton (1982).

Variable	$\|U\|$	p	k	ϵ
Ordre	0,95	1,87	0,91	0,89

Toutefois, il se peut que l'erreur exacte décroisse avec la diminution de h sans que la solution converge vers la solution exacte. Pour éliminer cette alternative, des coupes de u et de k le long de la diagonale [(-1,-1);(1,1)] sont présentées à la figure (4.4) pour trois maillages différents, du plus grossier au plus fin. Il est clair que la solution numérique tend vers la solution analytique.

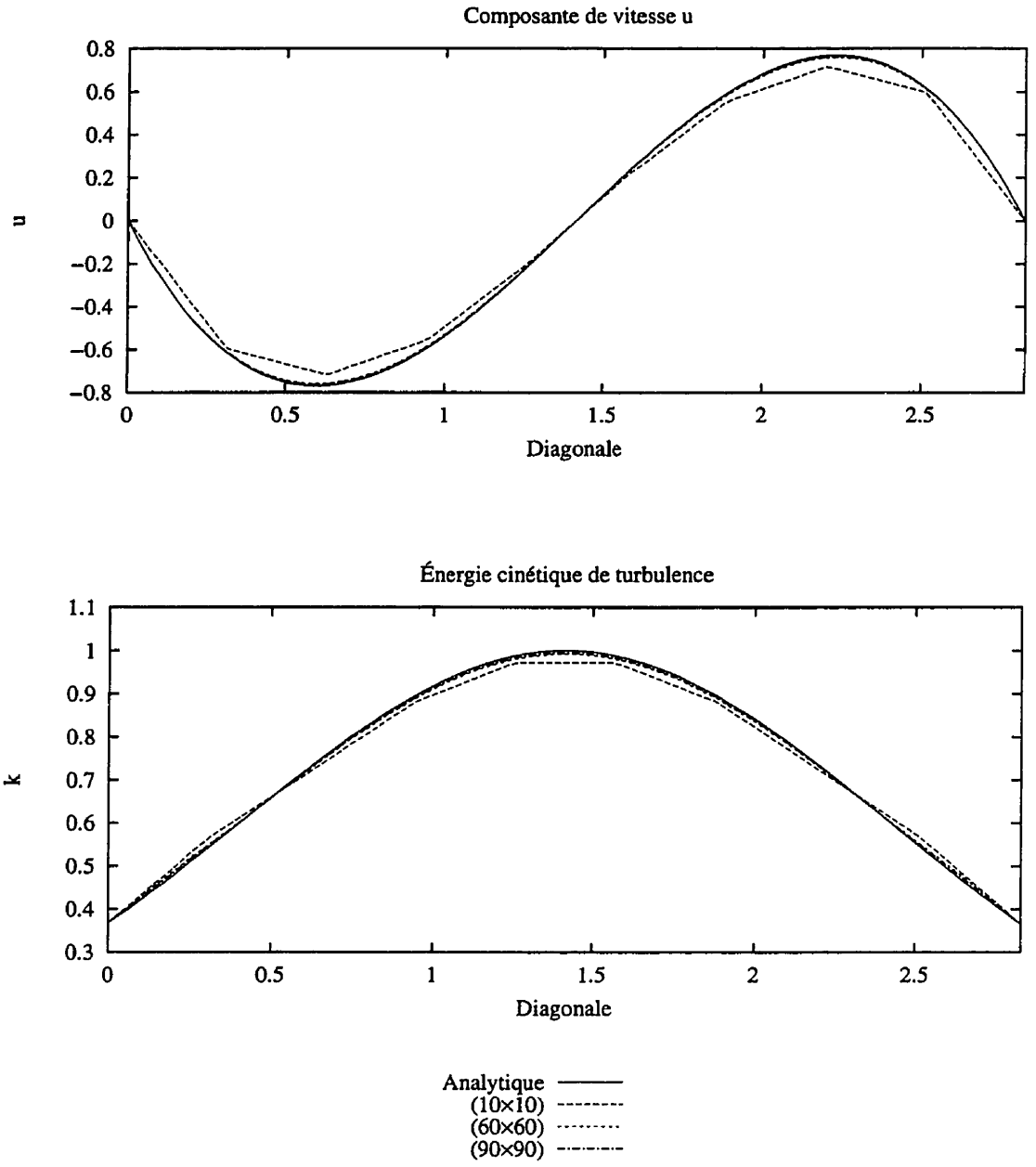


Figure 4.4: Évolution de u et de k sur la diagonale [(-1,-1);(1,1)], comparaison avec la solution analytique de Smith et Hutton (1982).

Quand il s'agit de traiter des cas bidimensionnels avec recirculation, l'ordre du schéma descend légèrement en dessous de un. Ceci nous prouve que le choix du cas test pour établir l'ordre d'un schéma doit être le plus sévère possible et le plus proche des conditions dans lesquelles le schéma va être utilisé.

4.2 Approche logarithmique du modèle $k-\epsilon$

Comme il a été mentionné au §(1.4.2), la préservation de la positivité de k et ϵ peut devenir problématique quand il s'agit de simuler des écoulements avec de fortes variations de k et ϵ. Ceci représente un problème numérique qui n'est pas relié aux performances réelles du modèle. Ainsi, le changement des variables k et ϵ en variables logarithmiques $\hat{k}$ et $\hat{\epsilon}$ peut apporter de nettes améliorations à la précision de la solution surtout lorsque k ou ϵ atteignent des valeurs très faibles ou lorsque les gradients sont très prononcés (couche de cisaillement, paroi). Dans plusieurs problèmes, le rapport entre les valeurs maximale et minimale de k ou de ϵ est très élevé (10^{10}) et résoudre pour $\hat{k}$ et $\hat{\epsilon}$ permet de capter tous les niveaux de ces variables.

Pour montrer la pertinence de l'approche logarithmique, une étude comparative a été menée avec l'approche originale sur un cas où la solution analytique est connue. Il s'agit du problème de la couche cisaillée turbulente dont les données ont été présentées au §(4.1.1).

Les calculs ont été effectués pour quatre maillages, du plus lâche au plus fin, à un nombre de Reynolds de 10^4. La mesure de la précision des résultats est basée sur le calcul de l'erreur exacte relative Er_{ϕ}^{exacte} sur le domaine (Ω) comme suit:

$$Er_{\phi}^{exacte} = \frac{||\phi - \phi^{exacte}||_{0,\Omega}}{||\phi^{exacte}||_{0,\Omega}} \tag{4.9}$$

où ϕ^{exacte} est la fonction analytique de ϕ.

Le tableau (4.3) présente l'erreur exacte relative $Er_{\phi}^{exacte} \times 10^3$ des variables $\hat{k}$, $\hat{\epsilon}$ et μ_t pour les deux approches logarithmique et originale. Il est clair que les résultats de la méthode logarithmique sont nettement plus précis surtout pour μ_t.

Tableau 4.3: L'erreur exacte relative $Er \times 10^3$ pour différents maillages.

Maillage	# de triangles	Méthode	$Er_{\hat{k}}^{exacte}$	$Er_{\hat{\epsilon}}^{exacte}$	$Er_{\mu_t}^{exacte}$
1	1624	Originale	22,650	11,830	143,70
		Logarithmique	11,330	8,929	59,55
2	4224	Originale	10,390	4,916	70,89
		Logarithmique	3,952	3,184	19,25
3	7344	Originale	7,695	3,477	50,39
		Logarithmique	3,012	2,405	13,64
4	10736	Originale	6,162	2,728	41,32
		Logarithmique	2,250	1,788	9,49

Les figures (4.5) et (4.6) montrent la distribution des isolignes de $\hat{k}$ et $\hat{\epsilon}$, respectivement. Il devrait y avoir une symétrie par rapport à $y = 0$ d'après les équations (4.4). Si l'approche logarithmique réussit à préserver la symétrie, l'approche originale présente des erreurs qui peuvent être attribuées aux forts gradients de k et ϵ et à la

condition nulle de Neumann sur v à la frontière inférieure.

L'aspect le plus intéressant de ce test est l'évolution linéaire de la viscosité turbulente. Puisque les isolignes de μ_t sont verticaux, on peut mesurer la qualité de la solution à travers l'évolution de la distribution de μ_t dans le domaine. La figure (4.7) montre cette évolution pour les quatre maillages, du plus lâche au plus fin.

L'approche originale n'aboutit ni à la distribution linéaire pour μ_t ni à la symétrie par rapport à $y = 0$ même avec le maillage le plus fin. Par contre, avec l'approche logarithmique, l'allure linéaire de μ_t apparaît dès le second maillage avec de légères oscillations dans les régions ou les gradients de $\hat{k}$ et $\hat{\epsilon}$ sont forts.

Obtenir de bons résultats avec la méthode logarithmique nécessite moins de points de calcul que la méthode originale. En effet, les variables logarithmiques varient plus lentement que les variables originales ce qui aide à mieux à capter les forts gradients qui sont en jeu.

L'approche logarithmique a été appliquée à d'autres cas tests. Il a été très difficile d'obtenir une solution lorsque le domaine comportait des parois et ce, quelle que soit la loi de paroi utilisée, à profil universel ou à deux échelles de vitesse. Le problème de convergence provenait des nouveaux termes de production $\nabla\hat{k} \cdot \nabla\hat{k}$ et $\nabla\hat{\epsilon} \cdot \nabla\hat{\epsilon}$ qui sont très non linéaires. En effet, si le processus itératif est amorcé sans ces termes, la convergence est très directe mais au moment de leur prise en compte, la solution diverge rapidement et ce, quels que soient les facteurs de sous–relaxation appliqués.

Nous avons présenté cette avenue des variables logarithmiques pour montrer qu'il est possible d'améliorer la précision de la solution. Toutefois, le recours à cette approche dans des cas avec loi de paroi reste problématique.

(a) Originale *(b) Logarithmique*

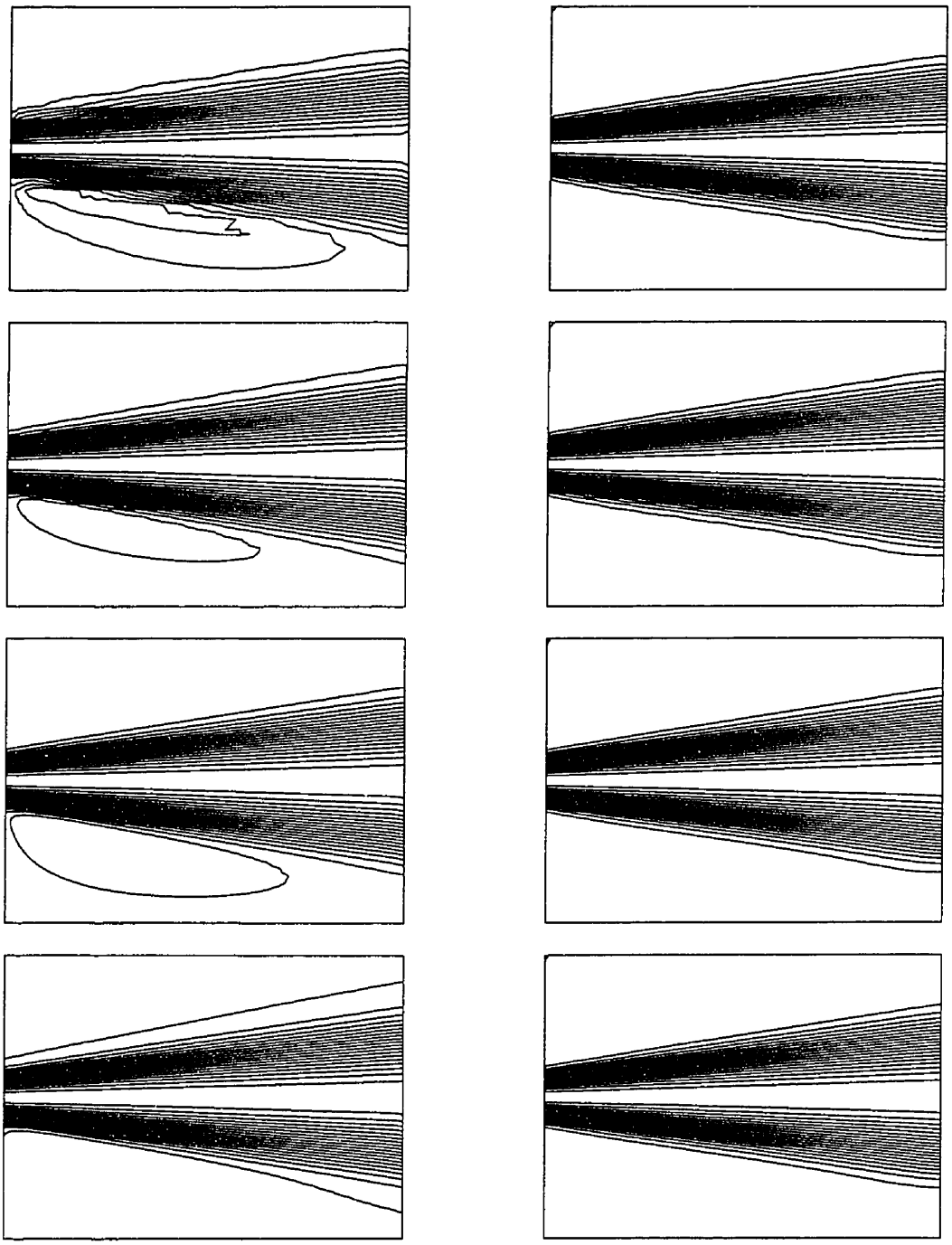


Figure 4.5: Isolignes de k, du maillage le plus lâche (en haut) au plus fin (en bas), dans le cas de la couche cisaillée de Schlichting (1960).

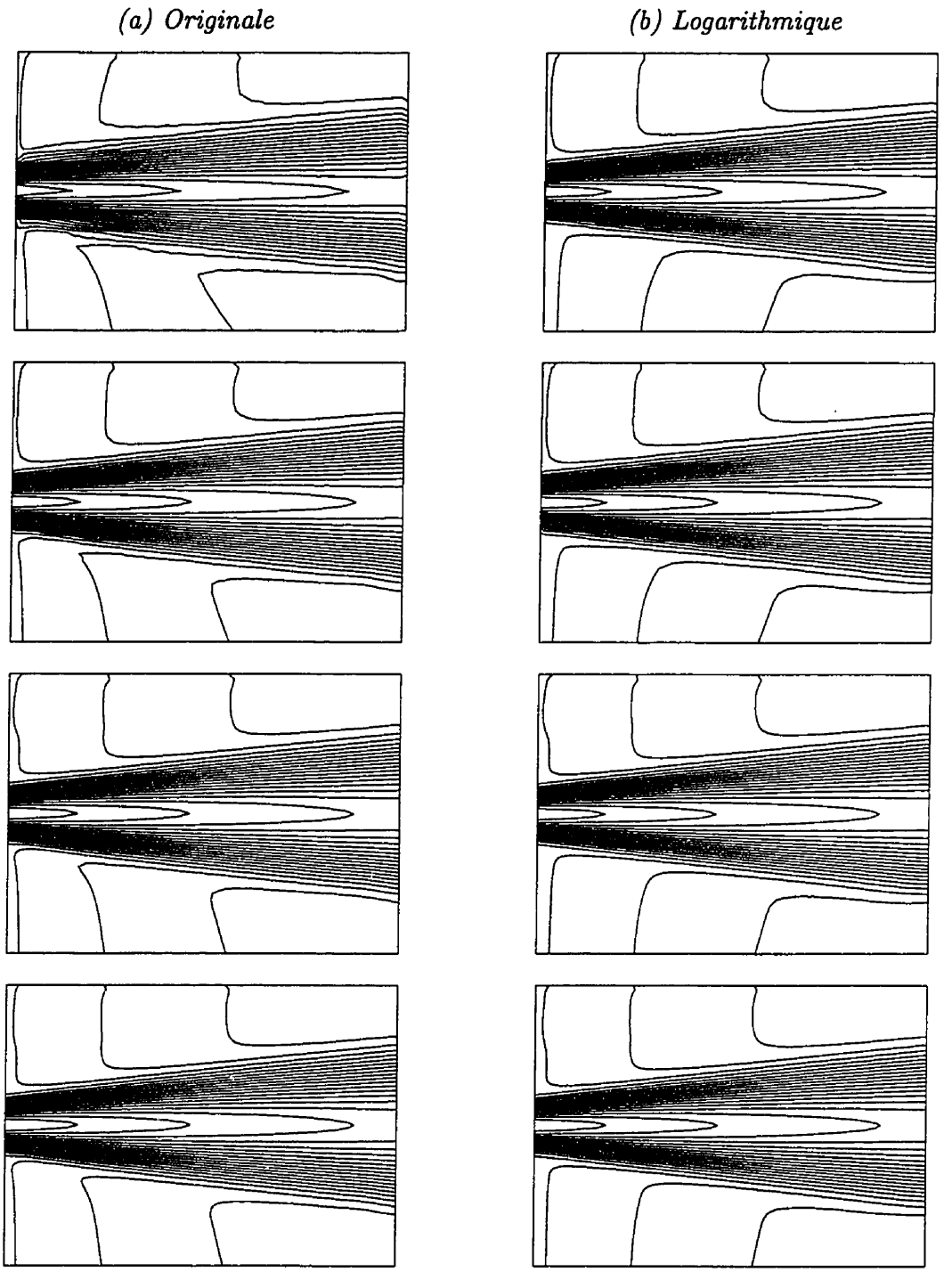


Figure 4.6: Isolignes de ϵ, du maillage le plus lâche (en haut) au plus fin (en bas), dans le cas de la couche cisaillée de Schlichting (1960).

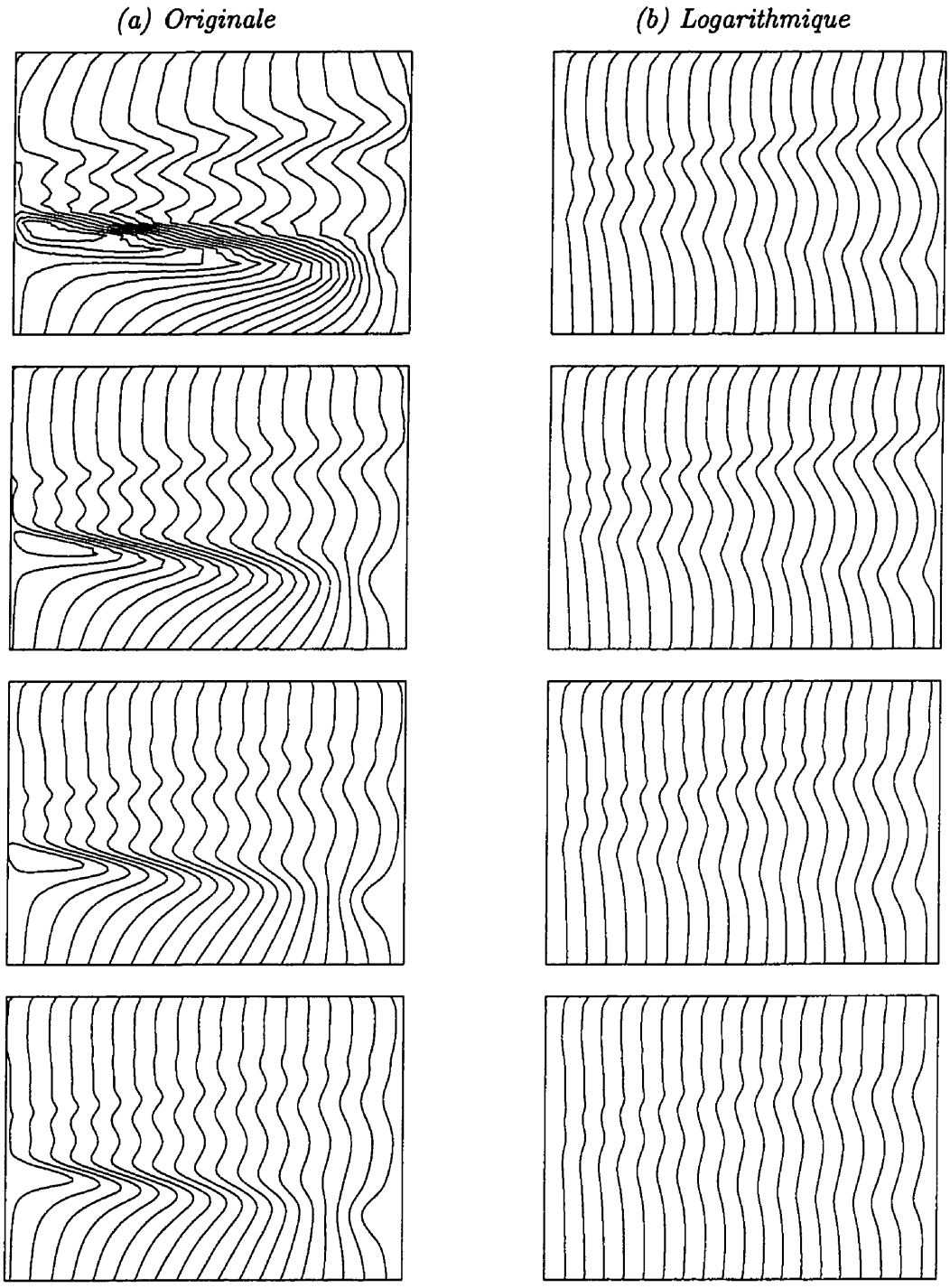


Figure 4.7: Isolignes de μ_t, du maillage le plus lâche (en haut) au plus fin (en bas), dans le cas de la couche cisaillée de Schlichting (1960).

4.3 Écoulement type: jets coaxiaux

Dans cette partie nous proposons de valider le schéma de volumes finis pour le cas type d'écoulements turbulents réactifs que nous serons amenés à traiter en l'occurrence, un écoulement à deux jets coaxiaux dans un combusteur axisymétrique.

L'écoulement de deux jets coaxiaux en atmosphère confinée est une représentation idéalisée d'une flamme de diffusion dans un combusteur axisymétrique. Les jets ont des vitesses d'injection différentes et leur mélange est critique pour l'efficacité du brûleur. La couche de cisaillement générée par la différence des vitesses des jets jumelée à la turbulence de l'écoulement contribuent à intensifier l'inter–diffusion du combustible et du comburant. Ceci conduit à une augmentation considérable de la surface de contact entre les réactifs, favorisant l'inter–diffusion moléculaire qui est la condition de la réaction.

La figure (4.8) représente la géométrie utilisée par Habib et Whitelaw (1979) dans leur expérience de deux jets coaxiaux isothermes. L'air est injecté à travers deux conduites annulaire et centrale à respectivement $u_a = 15\,m/s$ et $u_p = 5\,m/s$ dans une enceinte axisymétrique de diamètre D. Les paramètres de turbulence à l'entrée (équation (2.82)) ont été fixées à $\lambda = 0.003$ et $\alpha = 0.03$. Les calculs ont été effectués sur quatre maillages différents (29×125), (34×150), (39×175) et (45×200) afin de tester aussi l'influence du maillage sur la solution.

Les figures (4.9) et (4.10) présentent les isovaleurs de la composante de vitesse u et de l'énergie cinétique de turbulence k. On remarque nettement la couche de cisaillement entre les deux injecteurs et les forts gradients de k et de u qui en résultent. L'énergie cinétique de turbulence présente aussi de forts gradients au voisinage de la zone de

recirculation. Le point de rattachement se trouve à $2,80D$ des injecteurs dans le maillage le plus fin ce qui est quand même inférieur à la valeur expérimentale de $3,28D$.

L'indépendance de la solution par rapport au maillage est vérifiée. En effet, les profils présentés dans les figures (4.11) à (4.14) sont presques confondus à partir du Maillage 2 (34×150). La figure (4.11) montre les prédictions pour la vitesse axiale u à différentes stations en amont des jets pour les quatre maillages. Il y a une bonne concordance avec les résultats expérimentaux de Habib et Whitelaw (1979). Néanmoins, le fait que u soit adimensionnalisée par rapport à la vitesse u_c sur l'axe peut suggérer que la vitesse axiale n'est pas à la même échelle que les valeurs empiriques. Toutefois, à la figure (4.12), l'évolution de la vitesse u_c sur l'axe de symétrie se compare bien aux résultats expérimentaux ce qui, par conséquent, prouve que les résultats de la figure (4.11) sont en bon accord avec l'expérience tant qualitativement que quantitativement.

Les figures (4.13) et (4.14) montrent respectivement l'évolution de la tension normale et de l'énergie cinétique de turbulence sur l'axe de symétrie. Il y a une bonne concordance entre la simulation et l'expérience pour la tension normale. Le modèle $k-\epsilon$ reproduit bien les variations de ces deux quantités. Les comparaisons sont plus qualitatives que quantitatives mais les résultats sont assez proches pour être acceptables. Toutefois, au voisinage de la zone de recirculation où l'hypothèse d'isotropie n'est plus valable, le profil de k est assez décalé de l'expérience.

Nous pouvons conclure que les aspects aérodynamique et turbulent de l'écoulement sont assez précis pour nous permettre d'entamer la simulation numérique d'écoulements turbulents réactifs.

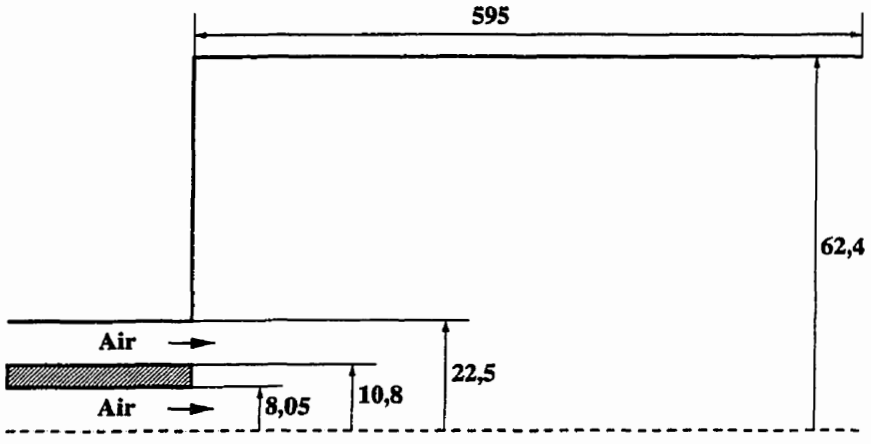


Figure 4.8: Géométrie utilisée pour les deux jets coaxiaux confinés, expérience de Habib et Whitelaw (1979) (dimensions en mm).

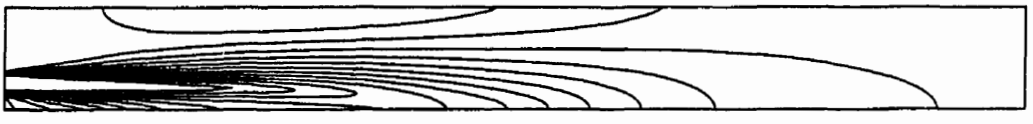


Figure 4.9: Isolignes de u pour les deux jets coaxiaux confinés, simulation de l'expérience de Habib et Whitelaw (1979).

Figure 4.10: Isolignes de k pour les deux jets coaxiaux confinés, simulation de l'expérience de Habib et Whitelaw (1979).

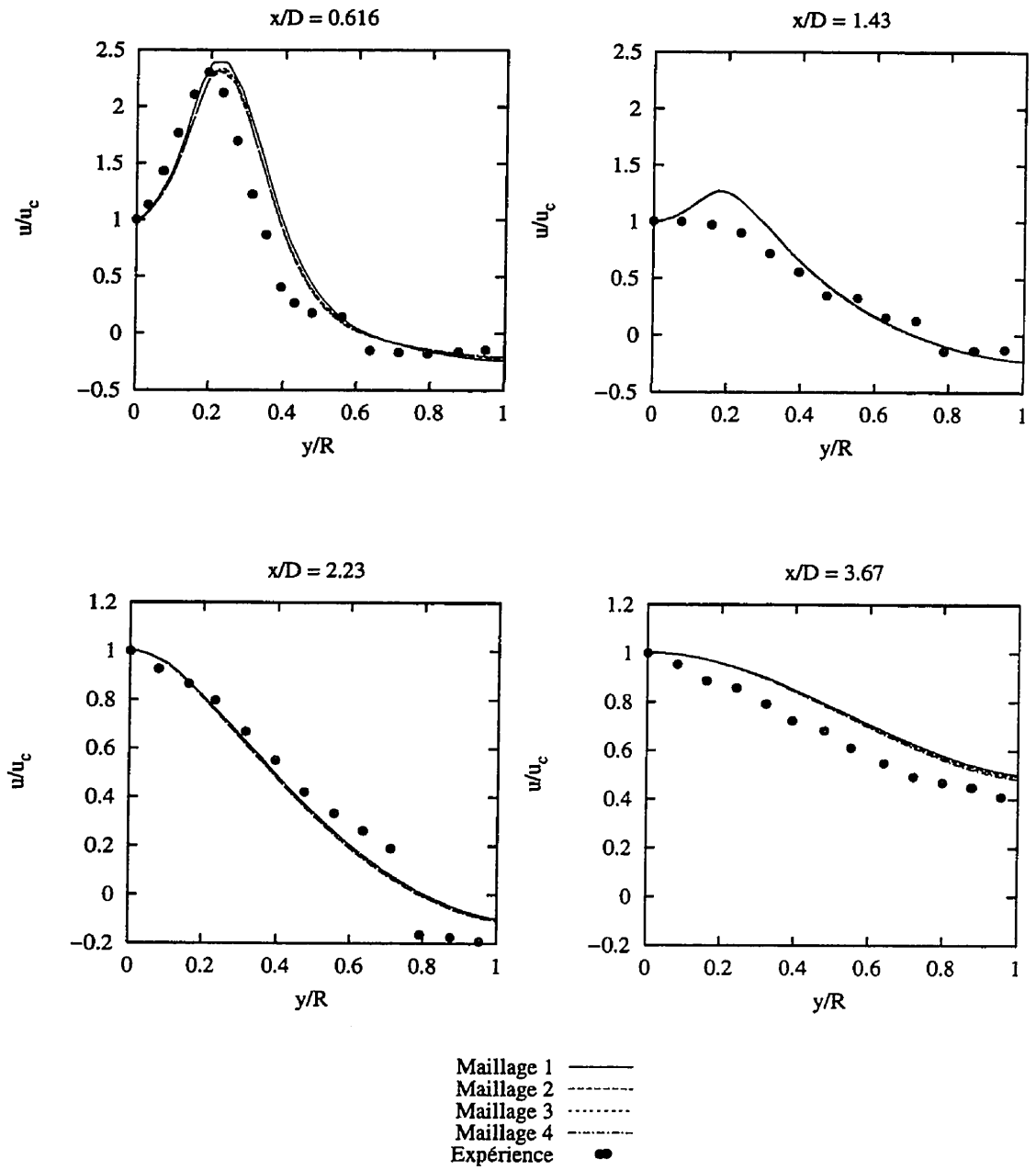


Figure 4.11: Distribution de u/u_c à différentes stations de mesure axiales, comparaison avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979).

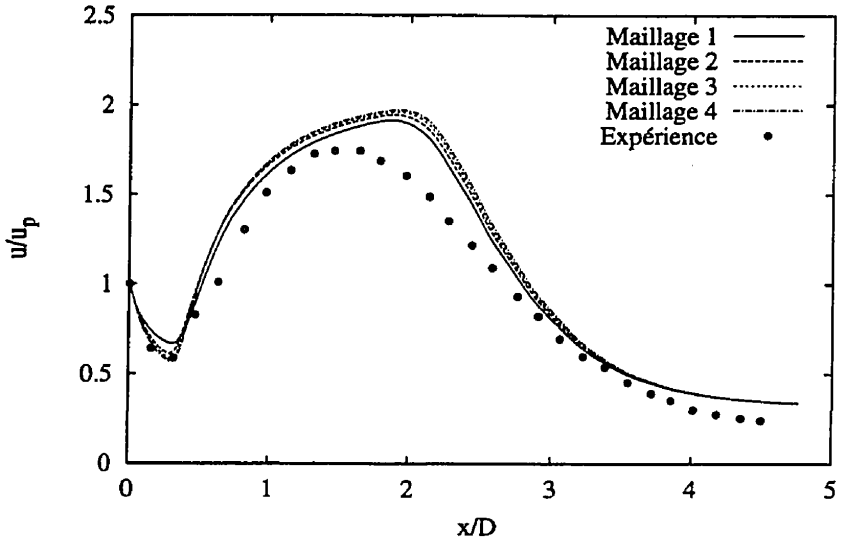


Figure 4.12: Évolution de la vitesse axiale sur l'axe de symétrie, comparaison avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979).

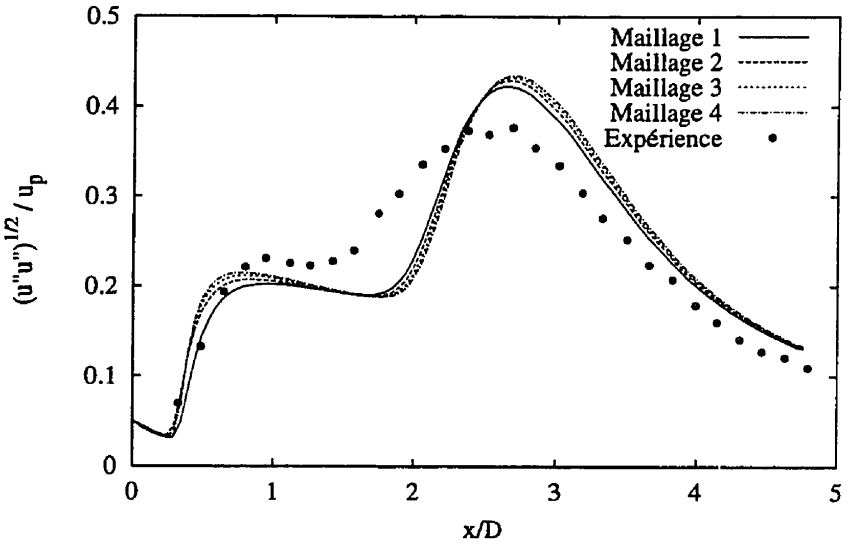


Figure 4.13: Évolution de la tension normale sur l'axe de symétrie, comparaison avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979).

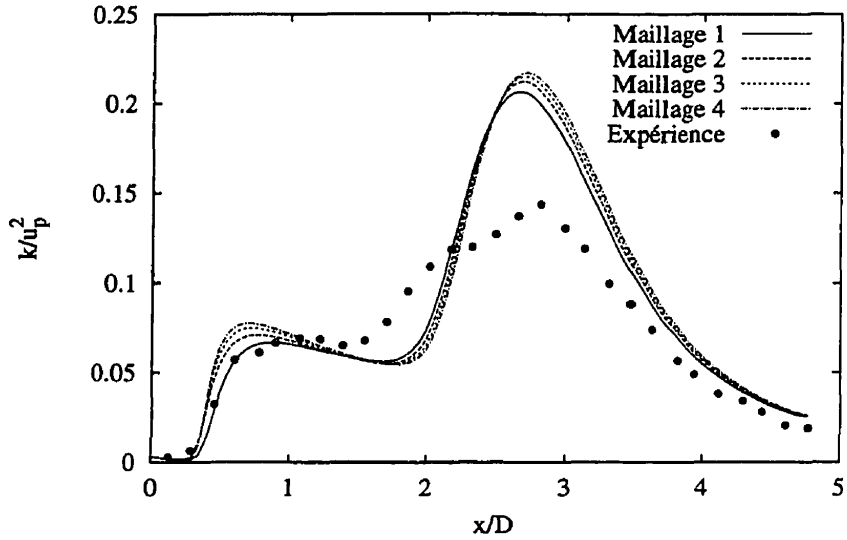


Figure 4.14: Évolution de l'énergie cinétique de turbulence sur l'axe de symétrie, comparaison avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979).

4.4 Loi de paroi à deux échelles de vitesse

Afin de valider la loi de paroi à deux échelles de vitesses, nous avons utilisé le cas test de Habib et Whitelaw (1979) pour sa complexité et parce qu'il représente le type d'écoulement en atmosphère confinée que nous serons amenés à traiter.

Pour ce faire, les prédictions basées sur la loi de paroi à deux échelles de vitesse ont été comparées à celles obtenues avec la loi de paroi au profil universel. La figure (4.15) montre que la loi de paroi à deux échelles de vitesse n'influence quasiment pas les profils de u. Quant aux profils sur l'axe de symétrie, l'allure des courbes de u et de k ne change pas d'une loi à l'autre. Des améliorations marginales sont apportées par la loi à deux échelles de vitesse concernant le maximum global de k et de u sur l'axe (figures (4.16) et (4.17)) et aussi par rapport à la longueur de recirculation qui passe de $2,80D$ à $2,84D$, à comparer avec la valeur expérimentale de $3,28D$.

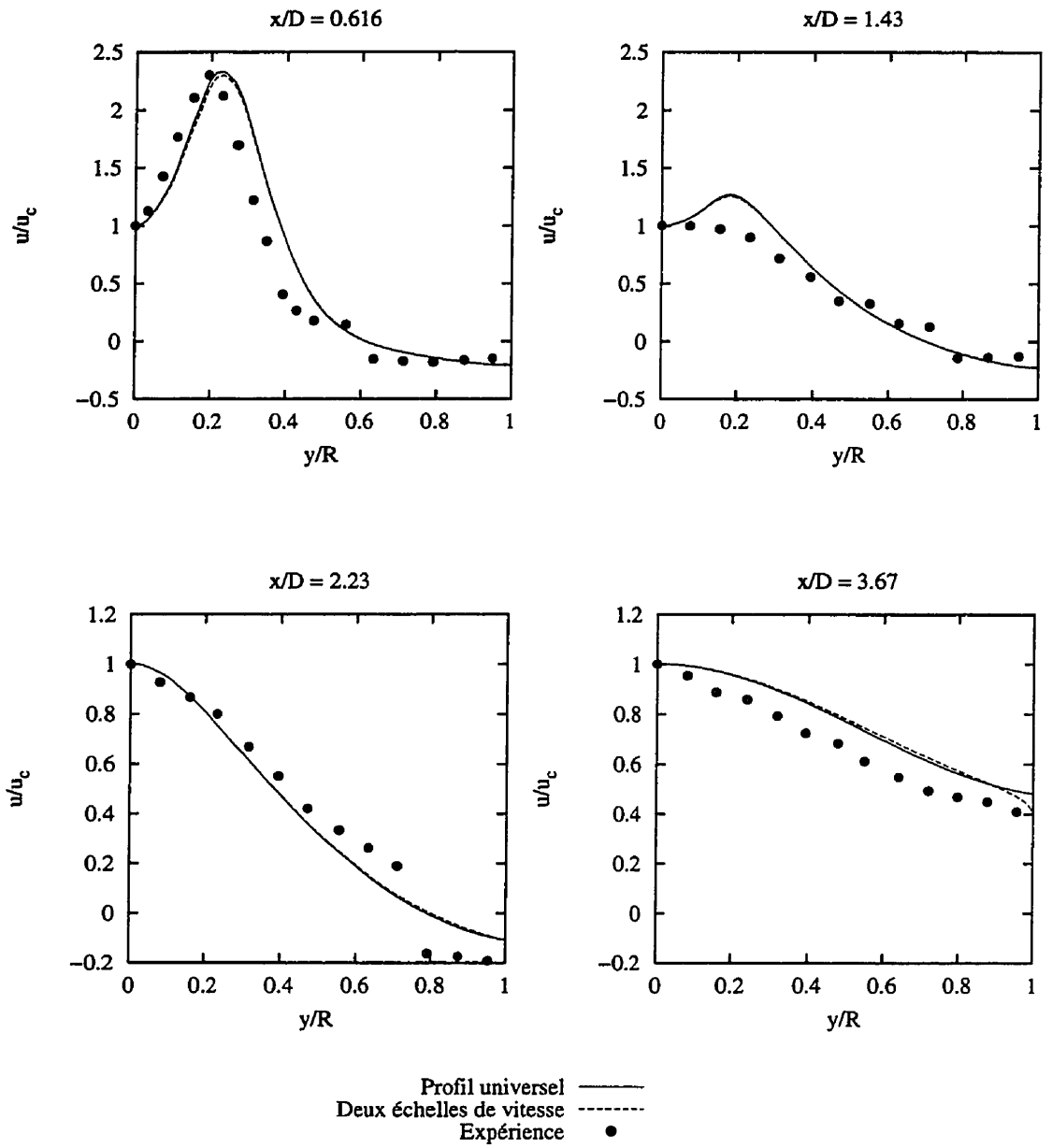


Figure 4.15: Distribution de u/u_c à différentes stations de mesure axiales, comparaison des résultats des deux lois de paroi avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979).

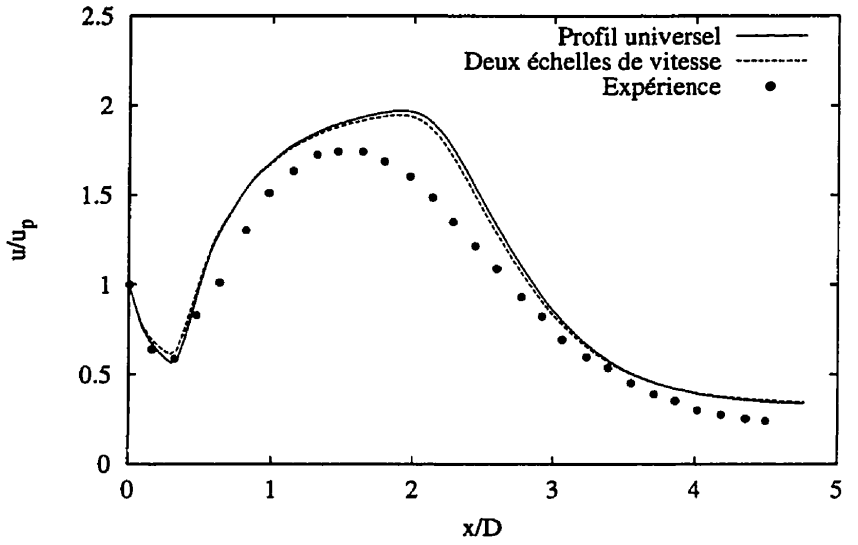


Figure 4.16: Évolution de la vitesse axiale sur l'axe de symétrie, comparaison des résultats des deux lois de paroi avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979).

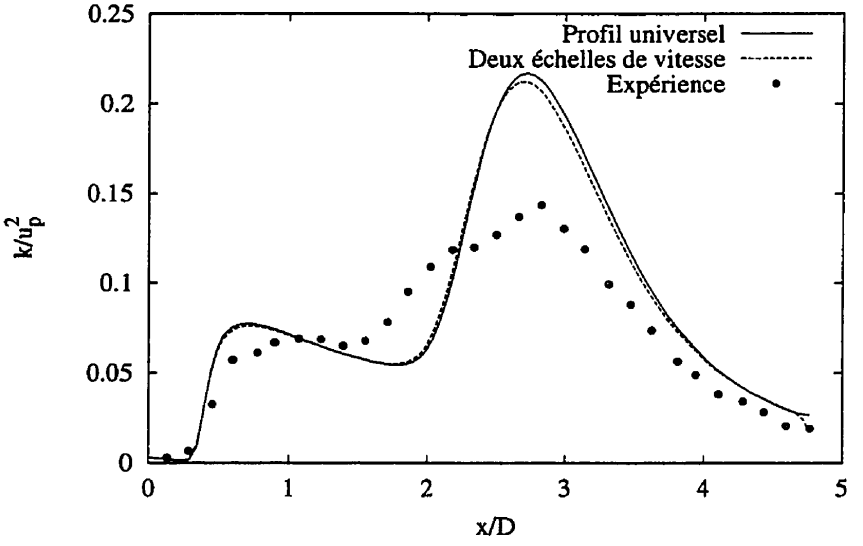


Figure 4.17: Évolution de l'énergie cinétique de turbulence sur l'axe de symétrie, comparaison des résultats des deux lois de paroi avec les mesures de Habib et Whitelaw (1979).

Les différences engendrées par les deux lois de parois peuvent être considérées insignifiantes pour cet écoulement de jets coaxiaux isothermes. En effet, la pertinence de la loi à deux échelles de vitesse n'apparaît que dans les cas de transfert de chaleur pariétal là où la loi de paroi au profil universel à tendance à sous–estimer le flux de chaleur à la paroi (§(2.5.3)). Cela sera mis en évidence ultérieurement dans le chapitre des résultats.

4.5 Méthode COUPLÉE et algorithme SIMPLER

Le cas test des deux jets coaxiaux de Habib et Whitelaw (1979) a aussi servi de base de comparaison pour l'ancien algorithme SIMPLER (Rida (1993)) et la nouvelle procédure où les variables primitives (u, v et p) sont résolues de manière couplées (méthode COUPLÉE).

Pour les quatre maillages étudiés, les calculs ont été effectués sur un IBM–RISC 6000 590. Le tableau (4.4) montre les temps de calcul obtenus et la mémoire utilisée. Les temps ont été normalisés par rapport au temps le plus court (3185 s) requis par le maillage 1 avec la méthode COUPLÉE alors que l'espace mémoire a été normalisé par rapport à l'espace occupé par la méthode SIMPLER avec le maillage 1 (19,5 Mega Octets).

La procédure COUPLÉE est nettement plus rapide que l'algorithme SIMPLER dans un rapport de presque 6 et ce rapport augmente avec le raffinement du maillage (il est de 10 pour le maillage le plus fin). Cet avantage est dû essentiellement au caractère bidimensionnel des géométries traitées puisqu'en trois dimensions la tendance risque sûrement de s'inverser à cause de la largeur de bande de la matrice (renumérotation

difficile) et de la nécessité de passer à une résolution itérative. En revanche, avec la procédure COUPLÉE, l'espace mémoire occupé est largement supérieur à celui du SIMPLER mais cela ne pose pas de problème avec la technologie actuelle pourvu qu'on se limite aux cas 2D.

Pour que la méthode COUPLÉE soit aussi performante, il est nécessaire d'effectuer une bonne numérotation des équations et des variables de manière à réduire au maximum la largeur de bande de la matrice globale. Si l'agencement des équations de Navier–Stokes et la renumérotation des points de calcul n'est pas optimisée, le temps de calcul peut devenir jusqu'à 100 fois plus lent.

Tableau 4.4: Comparaison entre la procédure COUPLÉE et l'algorithme SIMPLER.

		Temps		Mémoire	
Maillage	# de points	COUPLÉE	SIMPLER	COUPLÉE	SIMPLER
1	29×125	1,00	5,64	2,76	1,00
2	34×150	2,31	12,50	4,27	1,42
3	39×175	3,64	27,06	6,27	1,96
4	45×200	5,72	58,27	9,16	2,70

4.6 Amélioration du calcul des PDF

La pondération par fonction de densité de probabilité d'une fonction $\phi(f)$ au point i revient à déterminer la moyenne $\tilde{\phi}_i$ connaissant le taux de mélange moyen $\tilde{f}_i$ et la variance g_i. Il s'agit donc d'évaluer l'intégrale:

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \phi(f)\, \widetilde{P}(f)\, df \tag{4.10}$$

qui une fois discrétisée devient:

$$\tilde{\phi}_i = \sum_{k=0}^{N} a_k\, \phi(f_k)\, \widetilde{P}(f_k, \tilde{f}_i, g_i)\, (\Delta f)_k \tag{4.11}$$

Le calcul de l'intégrale est articulé autour des trois points suivants:

- le nombre de points d'intégration N;
- la forme de $\widetilde{P}(f)$;
- l'évaluation de $\phi(f)$.

Notre configuration, dite *Standard*, pour ces trois points est la suivante:

- nombre de points d'intégration $N = 1000$;
- la forme de $\widetilde{P}(f)$ est déterminée par un pré–calcul au début de chaque problème;
- $\phi(f)$ est tabulée pour les 1000 points du domaine d'intégration.

Afin de valider la configuration *Standard*, nous allons étudier son impact sur la précision et la rapidité de calcul en prenant l'exemple de la combustion du méthane dans l'air. Les intégrales que nous avons choisi de traiter sont celles de la densité et la

température puisque les fractions massiques ont un comportement assez monotone pour f variant de 0 à 1. Il s'agira d'évaluer l'expression (4.11) pour chaque couple $(g/g_{max}, \tilde{f})$ dans $[0,1]\times[0,1]$ ou encore pour chaque couple $(i_g, i_{\tilde{f}})$ dans $[0, n_g]\times[0, n_{\tilde{f}}]$ avec:

$$g/g_{max} = \frac{i_g}{n_g} \qquad\qquad f = \frac{i_{\tilde{f}}}{n_{\tilde{f}}} \tag{4.12}$$

Afin d'obtenir des résultats aussi précis que possible, les valeurs de n_g et $n_{\tilde{f}}$ ont été fixées respectivement à 1000 et à 100. Ainsi, pour chacune des 1000 valeurs de g/g_{max}, on effectuera le calcul de 100 intégrales. Le but est donc de déterminer le pourcentage de fois que la configuration *Standard* conduit à des résultats convergés et précis.

4.6.1 Précision de l'intégration numérique

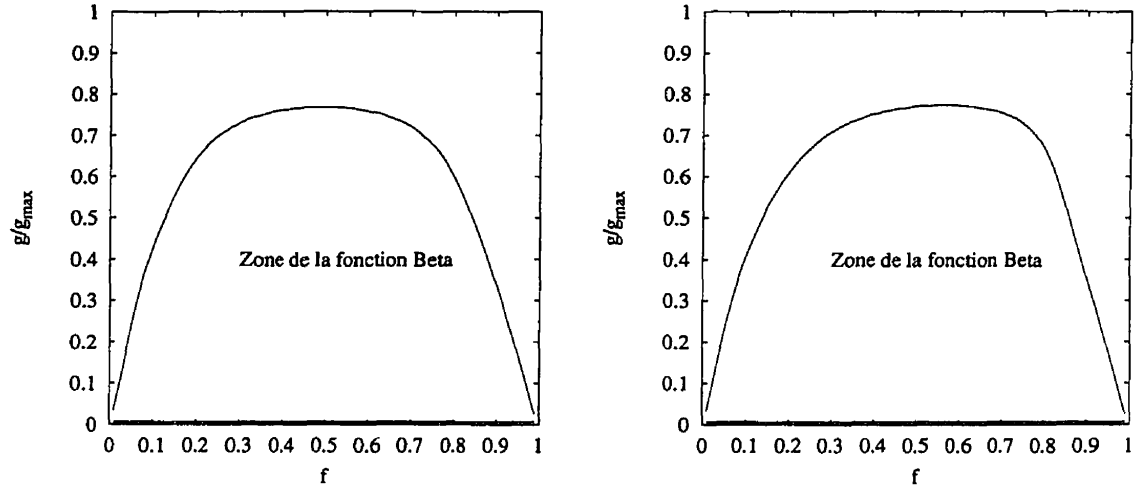
Influence de la valeur de N

Dans un premier temps nous allons étudier l'impact du nombre de points N. Pour ce faire nous allons comparer les résultats obtenus avec la méthode *Standard* à ceux calculés avec une configuration, dite *Maximale*, définie par:

- nombre de points d'intégration $N_{max} = 100000$;
- utilisation exclusive de la fonction Beta;
- $\phi(f)$ est calculée à chaque fois.

Le but est donc de vérifier si l'approche *Standard* avec ses 1000 points d'intégration est suffisante et si elle se compare bien à l'approche *Maximale*.

Tout d'abord nous allons déterminer les cas où la méthode *Maximale* converge. La figure (4.18) représente la «cloche» qui englobe tous les couples $(g/g_{max}, \tilde{f})$ permettant l'utilisation de la méthode *Maximale* et donc de la fonction Beta. À l'extérieur de cette zone, le recours à la fonction Delta ou la fonction Dirac est nécessaire car, même avec un nombre de points dépassant les 100000, il n'est pas certain d'obtenir une convergence avec la fonction Beta.

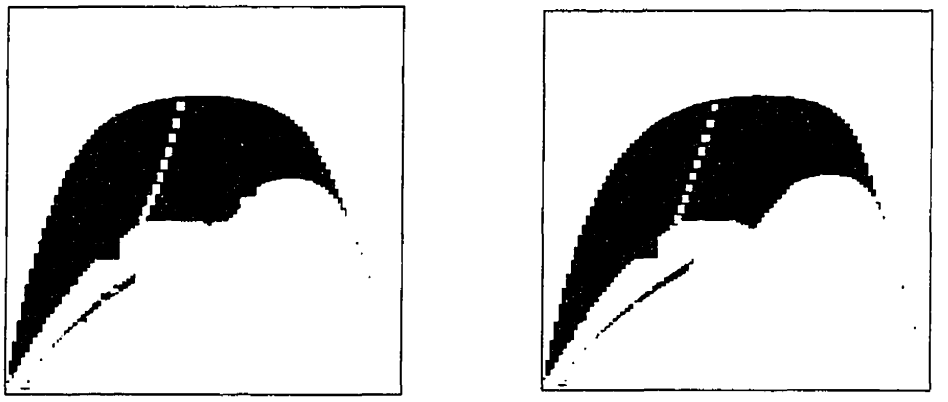


(a) Calcul de $\bar{\rho}$ *(b)* Calcul de $\tilde{T}$

Figure 4.18: Lieu des points $(g/g_{max}, \tilde{f})$ dans le carrée $[0,1] \times [0,1]$ où la fonction Beta est utilisable.

Une fois la zone **potentielle** de la fonction Beta déterminée, il serait intéressant de déterminer si la méthode *Standard* est capable de couvrir toute la cloche. Nous allons plutôt faire l'inverse et déterminer le lieu des points où la méthode *Standard* s'écarte de la méthode *Maximale*.

Les calculs effectués pour la densité et la température ont abouti à la figure (4.19). Il s'agit du carré $[0,1] \times [0,1]$ qui indique, en noir, pour chaque couple $(g/g_{max}, \tilde{f})$, les endroits où le calcul avec la méthode *Standard* diverge de celui de la méthode *Maximale* et donc le recours à N_{max} points de calcul est nécessaire. On remarque que les allures des graphes de $\bar{\rho}$ et $\tilde{T}$ sont presque identiques ce qui confère une certaine généralité aux résultats obtenus.



(a) Calcul de $\bar{\rho}$ *(b)* Calcul de $\tilde{T}$

Figure 4.19: Lieu des points $(g/g_{max}, \tilde{f})$ où la méthode *Standard* diverge de la méthode *Maximale*. Statistiques effectués pour $\bar{\rho}$ et $\tilde{T}$.

Une autre façon plus quantitative d'illustrer ces résultats est présentée dans la figure (4.20). Cette figure montre, en pourcentages, le nombre de fois qu'il est possible de se contenter de l'approche *Standard*. En d'autres termes, le nombre de fois que la différence entre les résultats obtenus avec les méthodes *Standard* et *Maximale* n'excède pas les 5% d'erreur. Les résultats sont donnés par tranches de g/g_{max}. À titre d'exemple, pour $0 < g/g_{max} < 0.1$, 98% des calculs de $\bar{\rho}$ ne nécessitent pas l'utilisation de N_{max} points d'intégration.

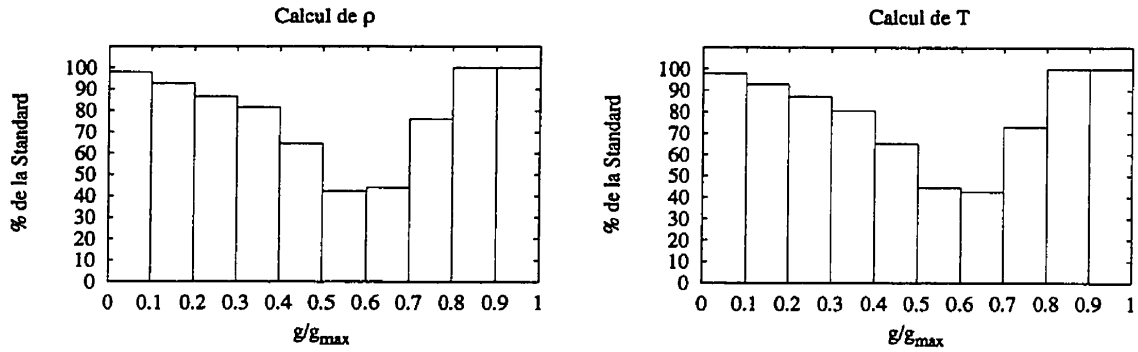


Figure 4.20: Calcul de $\bar{\rho}$ et $\widetilde{T}$, pourcentage des cas où la méthode *Standard* donne une précision satisfaisante.

En moyenne, la méthode *Standard* a donné des résultats satisfaisants dans 78,6% des cas pour la densité et 78,3% des cas pour la température. Toutefois, ces résultats ne tiennent pas compte d'un facteur très important à savoir, la distribution de g/g_{max} dans le domaine de calcul. En effet, si dans des problèmes pratiques, la valeur de g/g_{max} est concentrée dans une portion de l'intervalle $[0, 1]$, ces résultats seront biaisés et le recours à une pondération deviendra nécessaire. Ainsi, pour avoir une idée sur l'évolution de la variance dans des cas pratiques, la distribution de g/g_{max} a été évaluée pour un certain nombre de cas tests puisés dans la littérature (tableau (4.5)).

Le tableau (4.5) suggère que la probabilité d'avoir une valeur de $g/g_{max} > 10\%$ dans un point du domaine de calcul est de l'ordre de 7%. Par conséquent, la zone d'intérêt est concentrée dans l'intervalle 0–10% et plus spécifiquement 0–5%. En tenant compte de cette distribution, il est possible de pondérer les résultats de la figure (4.20) et d'aboutir à un nouveau pourcentage pour le nombre de couples (i_g, i_f) qui se contentent de la méthode *Standard*. Tous calculs fait, ce pourcentage augmente à plus de 99% pour le calcul de $\bar{\rho}$ et $\widetilde{T}$ qui présentent, par ailleurs, de très grandes similitudes (Tableau (4.6)).

Tableau 4.5: Distribution de g/g_{max} dans le domaine. Calculs effectués pour différents cas tests dans la littérature.

Référence	$g/g_{max} \times 100\%$			
	0–0,5	0,5–5	5–10	10–100
Perrin et al. (1996)	70,28	14,43	8,90	6,37
Smith et Smoot (1981)	56,08	22,63	11,15	10,13
Correa et Pope (1992)	31,64	51,57	7,28	9,50
Takagi et al. (1974)	58,47	36,58	3,16	1,78
Lockwood et al. (1974)	55,60	21,08	15,21	8,10
Moyenne	54,42	29,26	9,14	7,18

Tableau 4.6: Pourcentage des cas où la méthode *Standard* est efficace. Pourcentages établis pour $\bar{\rho}$ et $\widetilde{T}$.

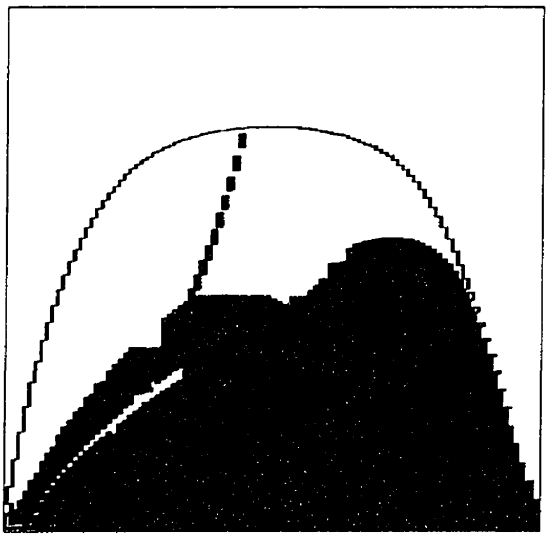
	$g/g_{max}\%$				Moyenne
	0–0,5	0,5–5	5–10	10–100	Pondérée
Cas de $\bar{\rho}$	100,00	99,30	96,64	76,41	99,01
Cas de $\widetilde{T}$	100,00	98,83	96,65	76,10	98,69

Nous remarquons qu'effectivement une grande proportion des domaines de calcul étudiés est dominée par une faible valeur de g (g/g_{max}<0,05) c'est–à–dire par des impulsions de Dirac. Ceci est normal puisque la région où il est possible d'observer des valeurs assez élevées de g/g_{max} ou encore des PDF de forme Beta se limite à la zone de flamme. Cette constatation soulève le point de la forme de la PDF et son impact sur le calcul intégral.

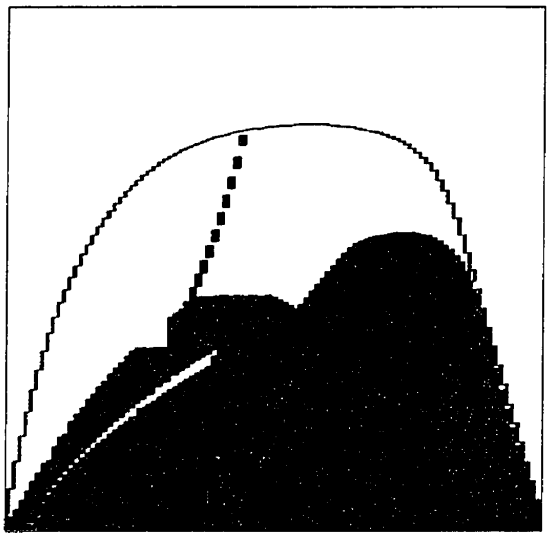
Influence de la forme de $\widetilde{P}(f)$

Les calculs effectués jusqu'à présent sont basés sur une utilisation systématique d'une fonction Beta pour le cas de l'approche *Maximale* alors que pour le cas *Standard* un pré–calcul a été effectué afin de déterminer la forme appropriée à utiliser pour $\widetilde{P}(f)$. Dans ce qui suit nous allons déterminer dans quelle mesure le recours à une fonction autre que la Beta influence la précision des calculs.

Le lieu des points (g/g_{max}, $\tilde{f}$) où la fonction Beta est potentiellement utilisable a déjà été établi dans la figure (4.18). Toutefois, comme la fonction Beta coûte cher à intégrer, il serait intéressant de déterminer les régions de la cloche où il est possible de la remplacer par des fonctions Delta ou Dirac beaucoup moins coûteuses, sans pour autant affecter la précision des résultats. La figure (4.21) montre cette partition pour le cas de la densité et de la température moyennes. Il est intéressant de remarquer que la Beta peut être remplacée par la Dirac ou la Delta dans une vaste région de la cloche.



(a) Partition pour la densité moyenne $\bar{\rho}$



(b) Partition pour la température moyenne $\widetilde{T}$

Figure 4.21: Partition du domaine de la fonction Beta pour $\bar{\rho}$ et $\widetilde{T}$. En vert: zone pour Beta uniquement, en bleu: zone où Beta $\equiv$ Delta et en rouge: zone où Beta $\equiv$ Dirac.

Maintenant que nous avons l'allure de la répartition des $\tilde{P}(f)$ pour tous les points $(g/g_{max}, \tilde{f})$, nous allons présenter des résultats plus quantitatifs. Pour ce faire nous allons comparer les résultats de la méthode *Standard* qui permet d'utiliser la forme de la PDF la plus appropriée et la moins coûteuse à ceux de la méthode *Maximale* qui utilise systématiquement une fonction Beta à 100000 points.

Les tableaux (4.7) et (4.8) présentent les pourcentages de cas où les résultats de la méthode *Standard* se comparent bien à ceux de la méthode *Maximale* avec une marge d'erreur n'excédant pas 5%. Le fait que la méthode *Maximale* (ou la fonction Beta) est parfois non applicable (N/A) est dû aux valeurs de $\tilde{f}$ et de g qui conduisent à des comportements non–réalistes de $\tilde{P}(f)$. Par contre, quand il est mentionné que la méthode *Maximale* diverge, c'est parce que les 100000 points d'intégration sont insuffisants! À titre d'exemple, dans l'intervalle où $0 < g/g_{max} < 0,2$ du tableau (4.7), la méthode *Maximale* est remplaçable par la méthode *Standard* dans 88,58% des cas (46,00+37,35+5,23). De plus, lorsque la méthode *Maximale* diverge ou n'est pas applicable (N/A), cela se fait au bénéfice de la méthode *Standard* qui la remplace encore dans 6,87% des cas (0,07+2,46+4,34) en utilisant une fonction Delta ou Dirac.

La concordance dans l'intervalle qui suscite le plus d'intérêt, en l'occurrence l'intervalle des $g/g_{max} < 0,2$, est assez convaincante et dépasse les 95%. Par exemple, dans le cas de $\bar{\rho}$ (tableau (4.7)), la fonction Beta conduit aux mêmes résultats avec 1000 et 100000 points pour 46% des cas et peut même être remplacée par une Dirac pour 37% des cas ce qui constitue un gain de temps appréciable. Cependant, plus g/g_{max} augmente plus il devient nécessaire de raffiner et, pour l'intervalle $0,4 < g/g_{max} < 0,6$, la méthode *Standard* n'est applicable que dans 53% des cas. Pour le cas improbable où $g/g_{max} > 0,8$, l'utilisation d'une Beta est inadéquate et le recours à la Delta est souvent nécessaire.

Tableau 4.7: Pourcentage des cas où la méthode *Standard* est utilisée sans altérer la précision du calcul de $\bar{\rho}$.

Configuration		$g/g_{max} \times 100\%$					Moyenne
Maximale	*Standard*	0–20	20–40	40–60	60–80	80–100	
N/A	Delta	0,07	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01
N/A	Dirac	2,46	0,00	0,00	0,00	0,00	0,48
Beta	Beta	46,00	37,26	4,96	0,00	0,00	17,62
Beta	Dirac	37,35	13,02	3,55	0,00	0,00	10,74
Beta	Delta	5,23	19,35	17,18	0,57	0,00	8,47
Diverge	Del./Dir.	4,34	14,45	27,71	59,42	100,00	41,22
Total		95,45	84,08	53,40	59,99	100,00	78,57

Tableau 4.8: Pourcentage des cas où la méthode *Standard* est utilisée sans altérer la précision du calcul de $\tilde{T}$.

Configuration		$g/g_{max} \times 100\%$					Moyenne
Maximale	*Standard*	0–20	20–40	40–60	60–80	80–100	
N/A	Delta	0,08	0,00	0,00	0,00	0,00	0,02
N/A	Dirac	2,45	0,00	0,00	0,00	0,00	0,48
Beta	Beta	59,07	46,96	4,81	0,00	0,00	22,14
Beta	Dirac	28,63	12,02	1,14	0,00	0,00	8,33
Beta	Delta	0,67	10,19	21,41	0,47	0,00	6,55
Diverge	Del./Dir.	4,40	14,50	27,25	57,42	100,00	40,75
Total		95,30	83,67	38,01	57,89	100,00	78,28

Toutefois, comme cela a été cité auparavant, ces résultats ne tiennent pas compte de la distribution de g/g_{max} dans le domaine et considèrent que tous les intervalles sont de même importance. Ainsi, si on considère la distribution du tableau (4.5), basée sur des cas tests pratiques, où le cas des $g/g_{max} < 0,1$ est le plus répandu, il est possible de déterminer la forme prédominante de la PDF. Les tableaux (4.9) et (4.10) présentent les résultats pondérés pour $\bar{\rho}$ et $\widetilde{T}$. Dans les deux cas, la concordance entre la méthode *Standard* et *Maximale* est bonne. Il est possible d'avoir les mêmes valeurs avec 1000 et 100000 points d'intégration pour plus de 80% des cas (moyenne pondérée) et, dans une large proportion, la forme de la PDF s'apparente à une impulsion de Dirac ce qui permet un gain de temps important compte tenu du nombre d'intégrales impliqué.

Tableau 4.9: Pourcentage des cas où la méthode *Standard* est efficace pour le calcul de $\bar{\rho}$. Résultats pondérés.

Configuration		$g/g_{max} \times 100\%$				Moyenne
Maximale	*Standard*	0–0,5	0,5–5	5–10	10–100	Pondérée
N/A	Delta	2,63	0,00	0,00	0,00	0,37
N/A	Dirac	97,37	0,00	0,00	0,00	13,89
Beta	Beta	0,00	16,83	52,34	15,84	20,89
Beta	Dirac	0,00	78,72	39,21	5,81	60,39
Beta	Delta	0,00	2,89	1,91	9,16	2,30
Diverge	Del./Dir.	0,00	0,85	3,17	45,59	1,15
Total		100,00	99,30	96,64	76,41	99,01

Tableau 4.10: Pourcentage des cas où la méthode *Standard* est efficace pour le calcul de $\widetilde{T}$. Résultats pondérés.

Configuration		$g/g_{max} \times 100\%$				Moyenne
Maximale	*Standard*	0–0,5	0,5–5	5–10	10–100	Pondérée
N/A	Delta	3,03	0,00	0,00	0,00	0,43
N/A	Dirac	96,97	0,00	0,00	0,00	13,83
Beta	Beta	0,00	35,91	65,84	19,14	36,26
Beta	Dirac	0,00	59,12	27,58	4,76	45,02
Beta	Delta	0,00	2,91	0,02	7,13	1,98
Diverge	Del./Dir.	0,00	0,87	3,21	45,06	1,17
Total		100,00	98,83	96,65	76,10	98,69

4.6.2 Rapidité de calcul

Maintenant qu'il est possible de se limiter à $N = 1000$ points d'intégrations sans affecter la précision de la solution, une série de tests est effectuée pour mettre en valeur les gains en temps de calcul qu'offre la méthode *Standard*. Pour ce faire, Nous avons comparé plusieurs configurations en partant de la plus coûteuse (*Maximale*) à la plus rapide (*Standard*) en changeant à chaque fois un seul paramètre. Cette progression résume le parcours suivi pour aboutir à la configuration *Standard*:

Configuration *Maximale*:

- nombre de points d'intégration $N = 100000$;
- utilisation systématique de la fonction Beta et recours à la fonction Delta en cas de non convergence;
- $\phi(f)$ est calculée à chaque fois.

Configuration 2:

- nombre de points d'intégration $N = 1000$;
- utilisation systématique de la fonction Beta et recours à la fonction Delta en cas de non convergence;
- $\phi(f)$ est calculée à chaque fois.

Configuration 3:

- nombre de points d'intégration $N = 1000$;
- utilisation systématique de la fonction Beta et recours à la fonction Delta en cas de non convergence;
- $\phi(f)$ est tabulée pour les 1000 points d'intégration.

Configuration *Standard*:

- nombre de points d'intégration $N = 1000$;
- La forme de $\tilde{P}(f)$ est déterminée par un pré–calcul initial;
- $\phi(f)$ est tabulée pour les 1000 points d'intégration.

Les calculs ont encore été effectués pour $n_g = 1000$ et $n_{\tilde{f}} = 100$. Ainsi, pour chacun des 1000 g/g_{max}, le temps de calcul de 100 intégrales a été évalué pour chacune des quatre configurations. La figure (4.22) présente l'évolution de ces temps de calcul en fonction de g/g_{max} sur une base logarithmique.

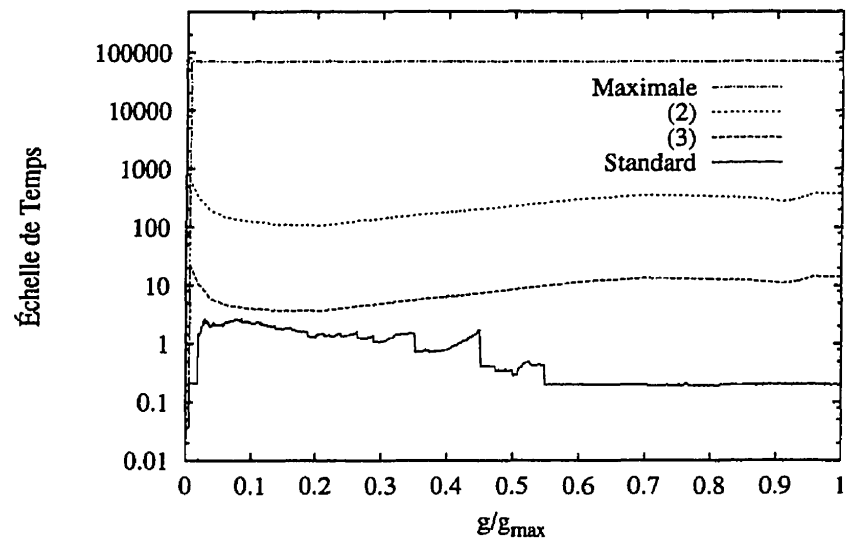


Figure 4.22: Temps de calcul des intégrales de $\bar{\rho}$ pour quatre configurations de (N, $\tilde{P}(f)$, $\phi(f)$) en fonction de g/g_{max}. Pour chaque g/g_{max}, le temps de calcul de 100 intégrales est représenté.

Entre les configurations (*Maximale*) et (2) le nombre de points d'intégrations a été réduit de 100000 à 1000. Comme cela a été établi auparavant, ce changement n'affecte pas la précision des calculs; par contre le temps de calcul est réduit en moyenne par un facteur de 200. Ensuite, dans la configuration (3), en tabulant $\phi(f)$ au lieu de la calculer à chaque fois, il a été possible de réduire encore le temps de calcul dans un rapport de 30. Enfin, avec la configuration *Standard*, le fait d'effectuer un pré–calcul au début de chaque cas traité pour déterminer la forme de $\tilde{P}(f)$ à utiliser, le temps a été diminué dans un facteur allant de 2 jusqu'à 70.

Somme toute, si on ne tient pas compte de la configuration (*Maximale*) qui contient un nombre exagéré de points d'intégration ($N = 100000$), le temps de calcul a été pratiquement réduit par un minimum de 60 (dans la zone Beta) à un maximum de 2000 (dans la zone Delta).

Dans le voisinage de zéro, on remarque un pic pour toutes les configurations. Ce comportement est dû au fait qu'il a été déterminé d'avance que la fonction Beta ne peut être utilisée parce que la combinaison (g/g_{max}, $\tilde{f}$) conduit à des valeurs non réalistes pour $\tilde{P}(f)$. Dans ce cas, le recours à une fonction Delta ou Dirac est inéluctable comme en témoignent les tableaux (4.7) à (4.10) avec la mention «N/A».

Chapitre 5

Résultats

Une procédure de calcul a été établie au chapitre précédant pour les écoulements turbulents réactifs. L'ordre du schéma a été établi à un et la procédure a été validée pour le cas typique d'un écoulement dans un combusteur axisymétrique. Plusieurs autres validations de ce schéma ont été réalisées (Rida (1993) et Rida et al. (1997)) dans le contexte d'écoulements turbulents isothermes.

Ce chapitre présente les résultats numériques obtenus lors de la simulation de cas tests expérimentaux disponibles dans la littérature. Ces cas sont présentés dans un ordre logique de difficulté croissante:

- flamme de diffusion laminaire;
- flamme de diffusion turbulente dans un tunnel avec un *bluff-body*;
- écoulement turbulent réactif: problème de méthanation;
- flamme de diffusion turbulente dans un combusteur axisymétrique;
- combusteur industriel aux parois non-adiabatiques.

5.1 Flamme de diffusion laminaire

Le recours à un écoulement laminaire est nécessaire pour tester les modèles de combustion avec le nouveau schéma de volumes finis. En effet, les effets de la turbulence sont absents ce qui permet de mieux cerner les effets couplés du transport et de la réaction chimique.

Dans ce cas test, on étudie le problème de la flamme de diffusion laminaire confinée de Mitchell et al. (1980). Le combustible (méthane) et le comburant (air) pénètrent séparément dans une enceinte cylindrique où ils brûlent en flamme de diffusion (figure (5.1)). Le méthane et l'air sont injectés respectivement à des débits volumiques de $5,77\,cm^3/s$ et $187,7\,cm^3/s$ et à une même température de 298 K.

Afin de comparer nos prédictions numériques aux mesures expérimentales de Mitchell et al. (1980), on cherche à calculer la distribution de la vitesse axiale, de la température et des concentration molaires des espèces à deux sections se trouvant à $x = 1,2\,cm$ et $x = 2,4\,cm$. On compare aussi nos résultats en volumes finis (VF) à ceux de Farinas (1997) qui a aussi traité ce problème numériquement dans le cas du modèle de chimie infiniment rapide avec une méthode d'éléments finis (EF).

Dans la simulation numérique de cette flamme de diffusion laminaire, les forces de gravitation ne sont pas négligeables et contribuent de manière significative à l'accélération de l'écoulement et au mélange des réactifs. Par ailleurs, la viscosité laminaire n'est pas constante puisque la température du mélange atteint jusqu'à 10 fois sa valeur d'entrée. Pour en tenir compte, une fonction $\mu(T)$ basée sur des corrélations empiriques a été utilisée.

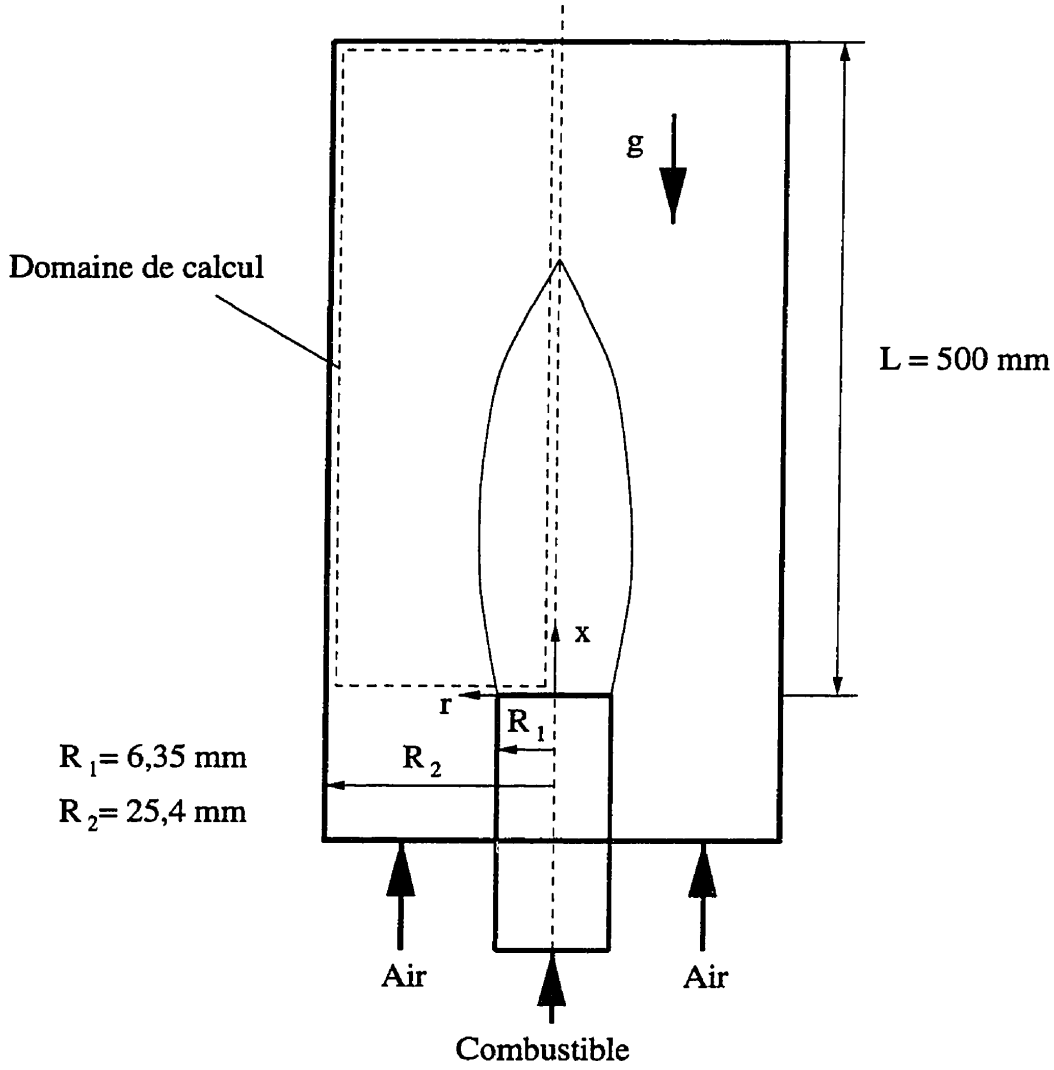


Figure 5.1: Flamme de diffusion laminaire, géométrie utilisée dans l'expérience de Mitchell et al. (1980).

Les figures (5.2) et (5.3) montrent les lignes iso–vitesse axiale et iso–température. Ces figures ont été obtenues avec le modèle de combustion à chimie infiniment rapide, mais elles sont quasiment identiques à celles obtenues avec les autres modèles de combustion. On remarque une large recirculation dans la partie supérieure du domaine et de forts gradients de température de part et d'autre du front de flamme surtout au niveau de l'entrée.

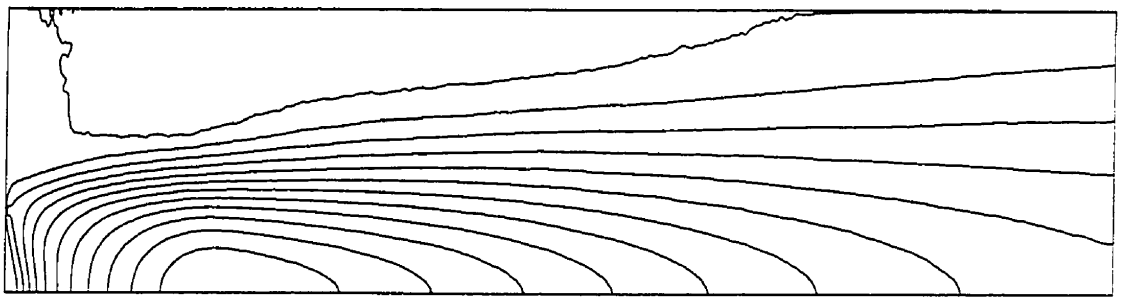


Figure 5.2: Flamme de diffusion laminaire, lignes iso–vitesse axiale pour le modèle à chimie infiniment rapide. Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 5,35).

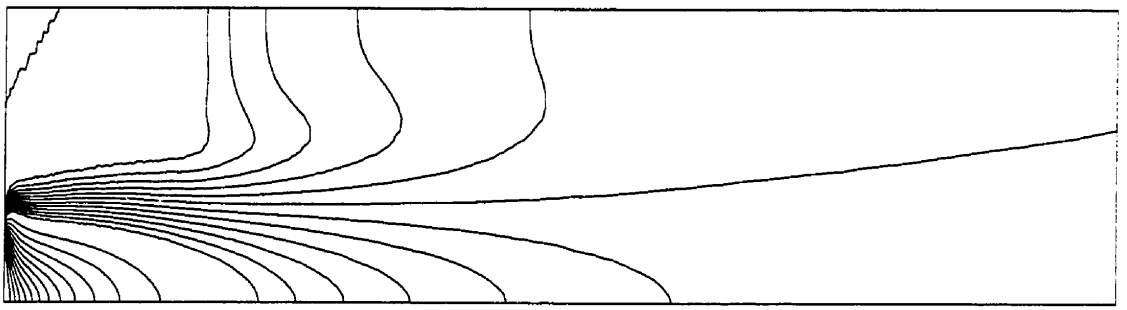


Figure 5.3: Flamme de diffusion laminaire, lignes iso–température pour le modèle à chimie infiniment rapide. Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 5,35).

5.1.1 Influence du maillage

Afin d'étudier la dépendance de la solution vis–à–vis du maillage, des calculs ont été effectués sur quatre maillages non structurés (tableau(5.1)). D'un maillage à l'autre, la taille des triangles a été réduite uniformément dans le domaine de calcul jusqu'à atteindre un rapport final de taille de maille $h_1/h_4 = 2,70$. Pour plus de clarté, nous présentons à la figure (5.4) le maillage le moins dense, en l'occurrence le Maillage 1. De plus, étant donné un rapport de $19,7$ entre la longueur et le rayon du domaine, l'image a été comprimée suivant la direction axiale ce qui donne l'impression que le maillage est élancé dans la direction radiale. Le maillage a été raffiné le long de la paroi pour mieux capter la couche limite ainsi qu'au niveau de l'entrée et de la couche de cisaillement où les gradients sont relativement forts. Les trois autres maillages ont la même allure mais avec une taille moyenne de maille qui diminue graduellement du Maillage 1 au Maillage 4.

Tableau 5.1: Détails des quatre maillages utilisés dans la simulation de l'expérience de Mitchell et al. (1980)

Maillage	# de triangles	taille moyenne h des triangles
1	2636	1,00
2	8602	0,55
3	13011	0,45
4	18958	0,37

La convergence sur ces maillages n'est pas facile. Malgré l'absence de turbulence, l'écoulement présente de forts gradients de densité et de grandes variations de vitesse largement accentués par les forces gravitationnelles ce qui nécessite des facteurs de relaxation assez petits ($\omega < 0.2$). D'ailleurs, l'omission des forces gravitationnelles change complètement l'allure de l'écoulement et ne permet pas d'obtenir une solution qui concorde avec les mesures expérimentales.

La réponse du schéma aux raffinements du maillage est présentée à la figure (5.5) dans le cas du modèle à chimie infiniment rapide. La solution devient quasiment indépendante du maillage à partir du Maillage 3 et les prédictions de la température et de la vitesse u convergent vers un profil optimal que nous pouvons qualifier d'indépendant du maillage. Il devient clair que tout raffinement supplémentaire ne pourra amener qu'une amélioration marginale à la solution. Afin de comparer les différents modèles de combustion nous pourrions nous baser sur le Maillage 3, mais nous utiliserons quand même les résultats du Maillage 4 pour une meilleure précision.

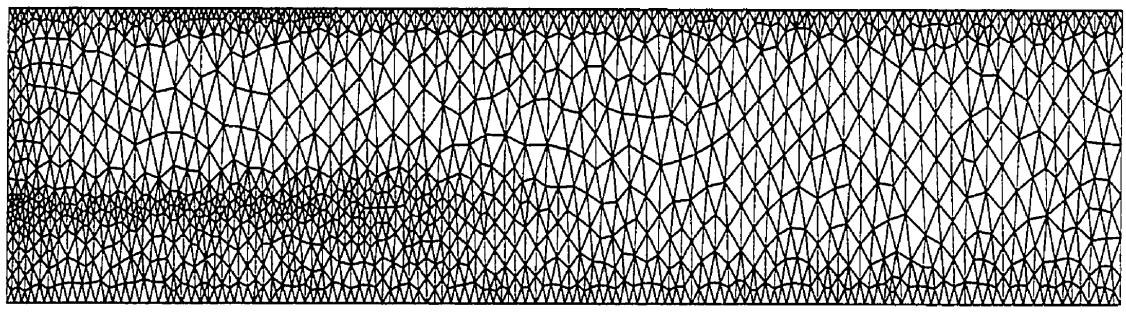


Figure 5.4: Flamme de diffusion laminaire, Maillage 1. Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 5,35).

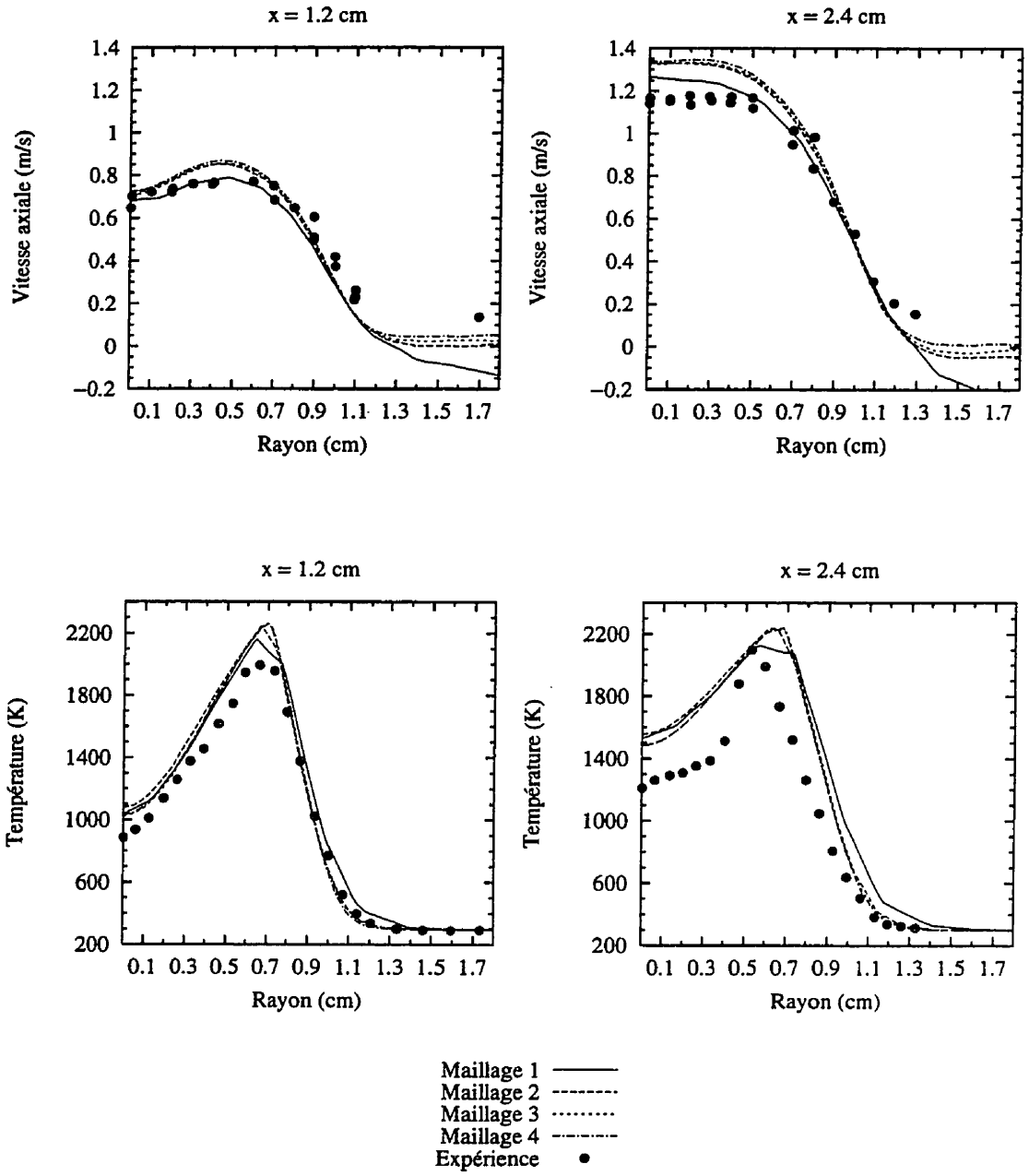


Figure 5.5: Influence du maillage sur la vitesse axiale et la température. Comparaison des prédictions du modèle à chimie infiniment rapide avec les mesures de Mitchell et al. (1980).

5.1.2 Comparaison avec un schéma d'éléments finis

Dans le cas du modèle de chimie infiniment rapide, des comparaisons ont été effectuées entre nos résultats par volumes finis et les simulations par éléments finis effectuées par Farinas (1997). Les calculs ont été réalisés sur les Maillages 2 et 3. La procédure et les détails de calculs ont été identiques dans les deux approches à savoir, le processus itératif, la prise en compte des forces de gravité et le recours à une fonction $\mu(T)$. Il y a cependant une différence dans le choix de l'élément de discrétisation: l'approche EF utilise l'élément Taylor–Hood qui est quadratique en vitesse et linéaire en pression alors que l'approche VF utilise un élément linéaire discontinu en vitesse et constant en pression. Cette différence est intentionnelle dans la mesure où elle permettra de comparer le schéma VF, dont l'ordre a déjà été établi à 1, à des schémas de second ordre.

La figure (5.6) montre l'évolution de la vitesse axiale u et de la température à deux stations de mesure $x = 1,2\,cm$ et $x = 2,4\,cm$. A prime abord, les deux schémas ont globalement le même comportement. Les profils de température sont presque confondus et leurs pics de température sont tous les deux décalés à la station $x = 2,4\,cm$. Cela prouve que les prédictions du taux de mélange pour les deux schémas sont semblables puisqu'il s'agit d'un écoulement adiabatique. Si les profils de la vitesse u ont la même allure, ils présentent des différences de comportement de part et d'autre de la couche de cisaillement. En effet, le schéma VF a tendance à se rapprocher des points expérimentaux du côté de l'axe de symétrie alors que le schéma EF à un meilleur comportement proche de la paroi. Toutefois, les deux schémas captent bien la couche de cisaillement.

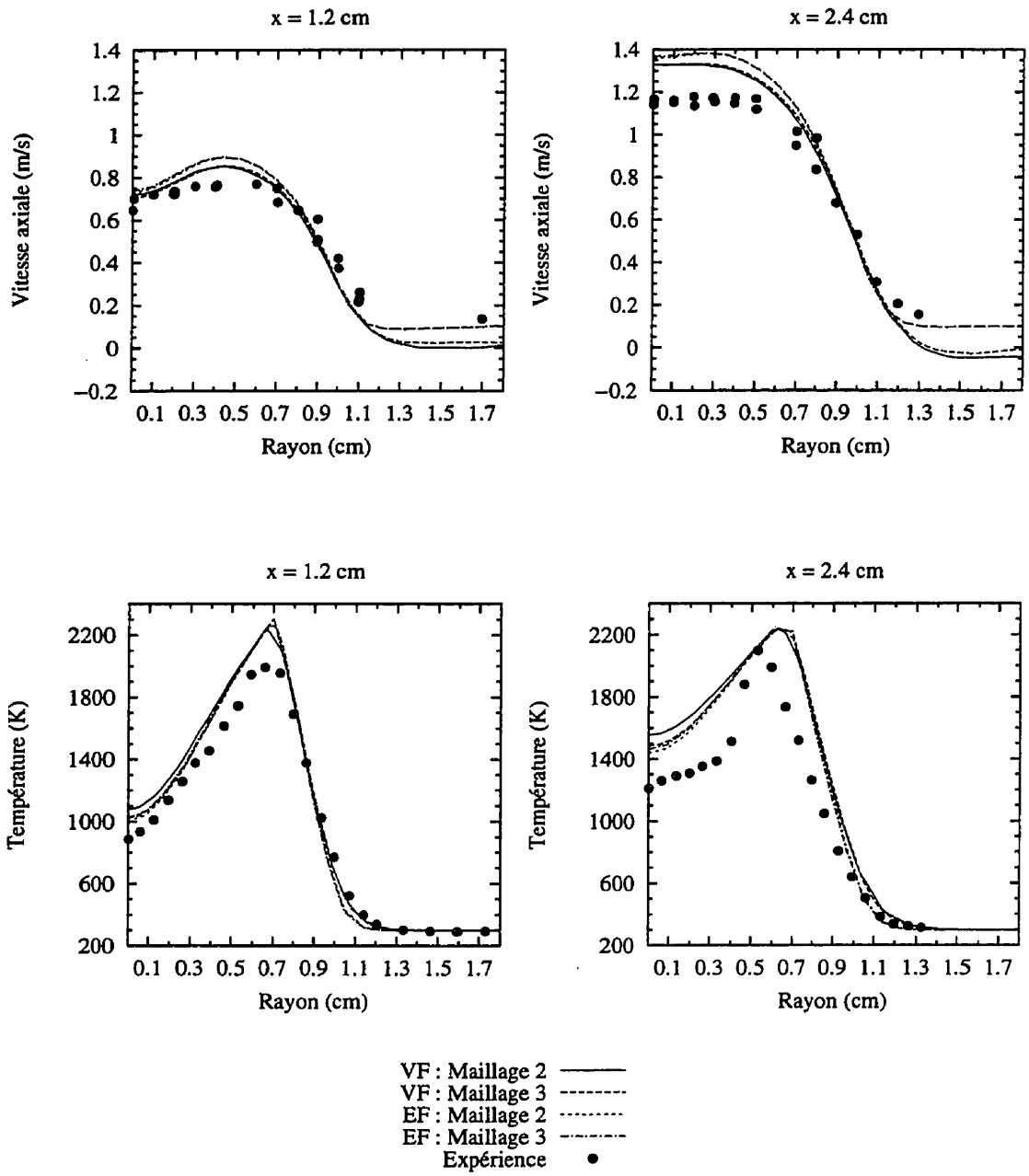


Figure 5.6: Comparaison des résultats VF et EF dans le cas du modèle à chimie infiniment rapide. Mesures de Mitchell et al. (1980).

En ce qui concerne la dépendance du maillage, la méthode EF aboutit à des profils confondus dans le cas des Maillages 2 et 3 alors que la méthode VF présente une légère différence; différence qui s'estompe d'ailleurs entre les Maillages 3 et 4. Cette performance du schéma EF est prévisible étant donné son ordre plus élevé. Pour la longueur de flamme, elle atteint la convergence entre les Maillages 3 et 4 dans le cas du schéma VF alors qu'elle diminue graduellement dans le cas du schéma EF (tableau (5.2)). Toutefois, les deux schémas ne parviennent pas à se rapprocher de la valeur expérimentale de $6,8\,cm$ mesurée par Mitchell et al. (1980).

Somme toute, malgré son ordre 1, le schéma de volumes finis se compare bien à des schémas de second ordre et de surcroît des méthodes d'éléments finis. Avec un coût nettement moins élevé, le schéma VF permet de prédire adéquatement des écoulements réactifs et demeure capable d'une précision semblable à celle des schémas d'ordre 2.

Tableau 5.2: Longueur de flamme pour différents maillages. Prédictions des schémas VF et EF dans le cas de l'expérience de Mitchell et al. (1980).

	Longueur de flamme (cm)	
Maillage	Schéma EF	Schéma VF
1	12,31	9,49
2	11,52	9,52
3	11,13	10,22
4	N/A	10,26

5.1.3 Comparaison des modèles de combustion

La simulation de l'expérience de Mitchell et al. (1980) permet de mettre en évidence, de manière systématique et claire, les lacunes et les avantages de chacun des quatre modèles étudiés. Nous pouvons donc justifier à travers des graphes ce qui a été expliqué par écrit au paragraphe (2.3.6). Pour ce faire, nous allons présenter les résultats obtenus avec le maillage le plus fin pour les quatre modèles étudiés en l'occurrence, les modèles à chimie infiniment rapide, de micro–flammes, d'équilibre chimique et hybride.

La figure (5.7) montre l'évolution de la vitesse u et de la température aux stations $x = 1,2\,cm$ et $x = 2,4\,cm$. Nous remarquons que hormis le modèle d'équilibre chimique, les autres modèles donnent des profils semblables et se rapprochent bien des mesures expérimentales. Le problème avec le modèle d'équilibre chimique réside dans une sous–prédiction de la température proche de l'axe qui réduit la densité et contribue à décélérer le fluide. Cette diminution de température est due à une perte d'énergie importante causée par une sur–prédiction significative de CO et donc une sous–prédiction de CO_2 comme on le voit clairement sur les figures (5.8) et (5.9).

En ce qui concerne la prédiction des concentrations des produits (figures (5.8) et (5.9)), tous les modèles sous–estiment la consommation de CH_4 mais cela peut être imputé à la mauvaise prédiction du taux de mélange. Là encore le modèle d'équilibre chimique se distingue des trois autres modèles en présentant une pente plus raide pour les profils de CH_4 que l'on peut expliquer par la surévaluation de la concentration de CO. Nous remarquons aussi une sur–prédiction de la concentration de H_2 et donc une sous–prédiction de H_2O pour le modèle d'équilibre chimique qui sont dues à l'absence de O_2 principalement absorbé par la production de CO et CO_2.

Si ce cas test confirme la surévaluation de CO par le modèle d'équilibre chimique, il montre bien l'absence de H_2 et de CO dans le cas du modèle à chimie infiniment rapide. Quant au modèle de micro–flammes, dont la distribution des concentrations en fonction de f a été déduite des mesures de Mitchell et al. (1980), il est censé reproduire fidèlement les résultats expérimentaux. Cela est vrai pour de nombreux produits (H_2O, H_2, CO et O_2) mais comme les concentrations sont tabulées en fonction du taux de mélange, la précision des résultats demeure tributaire de celle de f.

Dans le cas du modèle hybride, pour rompre la chaîne de CH_4 nous avons eu recours au modèle de micro–flammes afin de connaître la concentration et le taux de réaction de CH_4 pour ensuite déduire la production initiale de CO. Le reste des calculs a été effectué suivant la procédure présentée au §(2.3.5). Les résultats sont concluants puisqu'ils sont proches des données expérimentales et des prédictions du modèle de micro–flammes. Cela prouve qu'une fois la molécule de combustible cassée en CO et H_2, la procédure envisagée est capable de produire de bons résultats. En particulier, le taux de réaction de CO déduit à partir du modèle d'Arrhenius (équation (2.69)) semble adéquat pour la prédiction de CO dans des flammes de diffusion laminaires.

Le problème de rupture de chaîne du combustible demeure aussi problématique que critique pour la performance du modèle hybride. Dans le cas du méthane, nous disposons de données empiriques sur l'évolution du CH_4 en fonction du taux de mélange qui nous permettent de calculer son taux de réaction et en déduire la production initiale de CO. Toutefois, lorsque le combustible est composé de plusieurs hydrocarbures ou lorsque l'écoulement est turbulent, les taux de réaction de combustibles basés sur le modèle d'Arrhenius deviennent inadéquats. Nous préconisons alors le recours au modèle d'équilibre chimique ou à chimie infiniment rapide ou encore à une combinaison des deux pour déterminer la concentration du combustible brûlé.

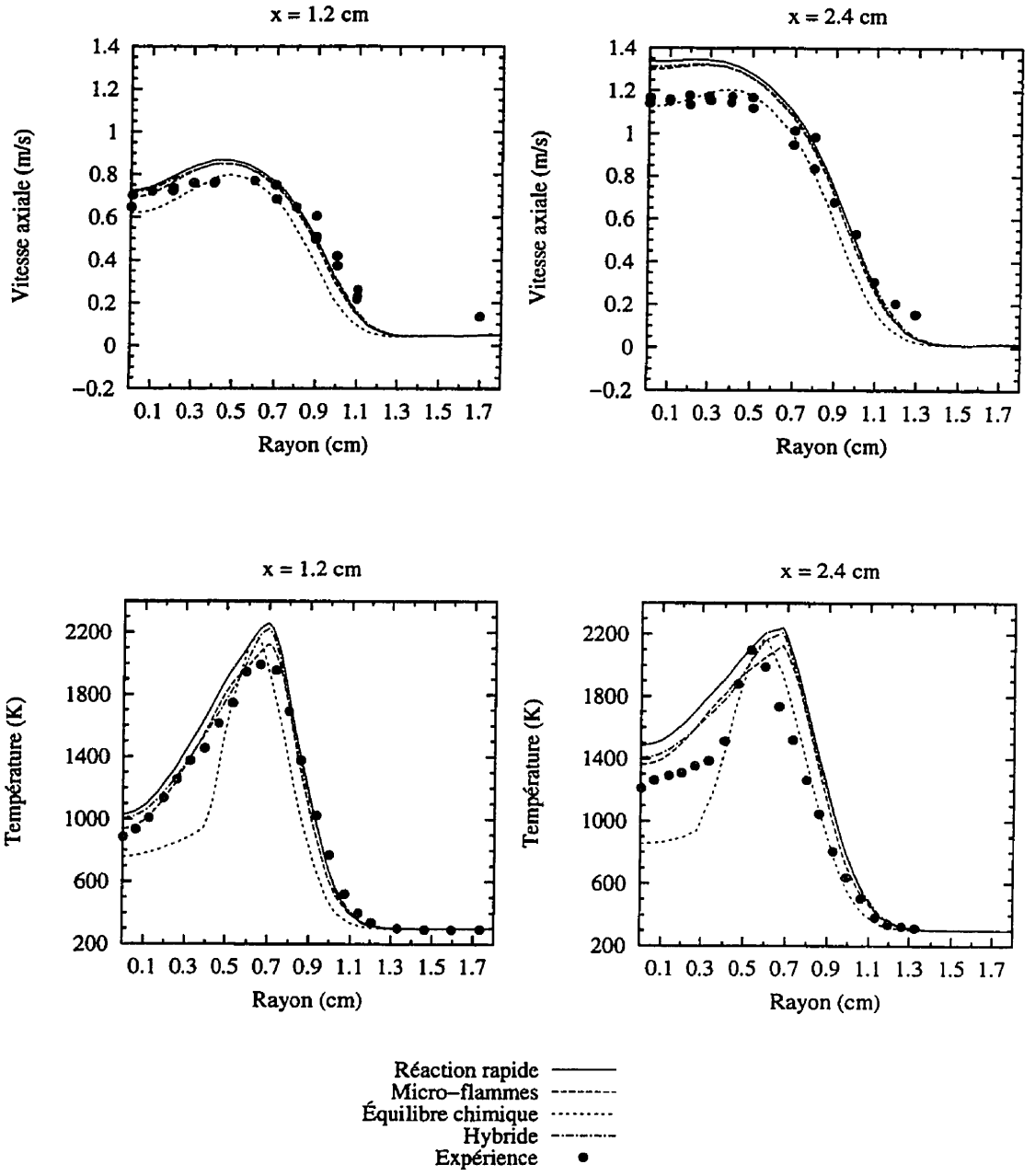


Figure 5.7: Comparaison des prédictions des modèles de combustion pour la vitesse axiale et la température avec les mesures de Mitchell et al. (1980).

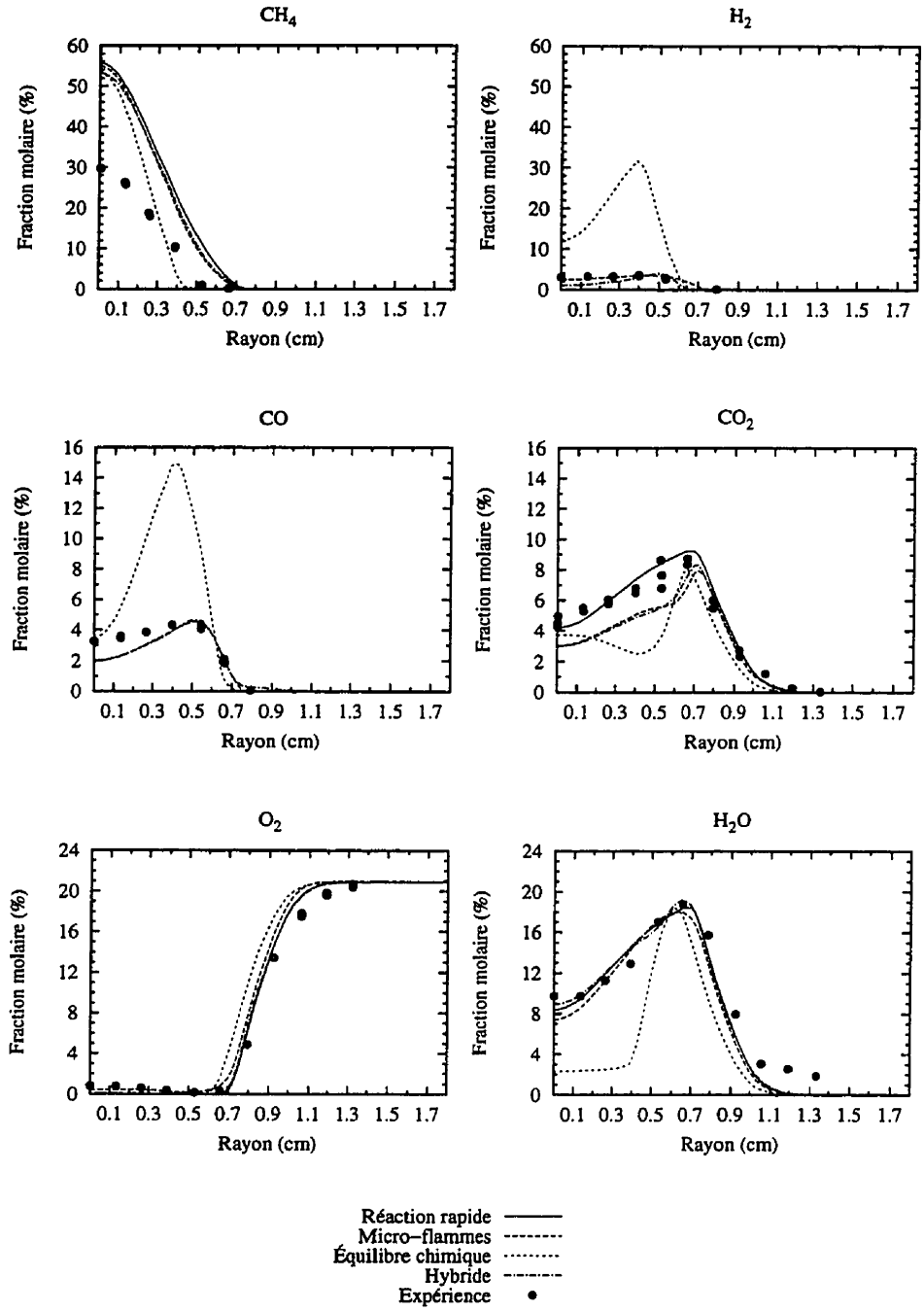


Figure 5.8: Comparaison des prédictions des modèles de combustion pour les fractions molaires avec les mesures de Mitchell et al. (1980) à $x = 1,2$ cm.

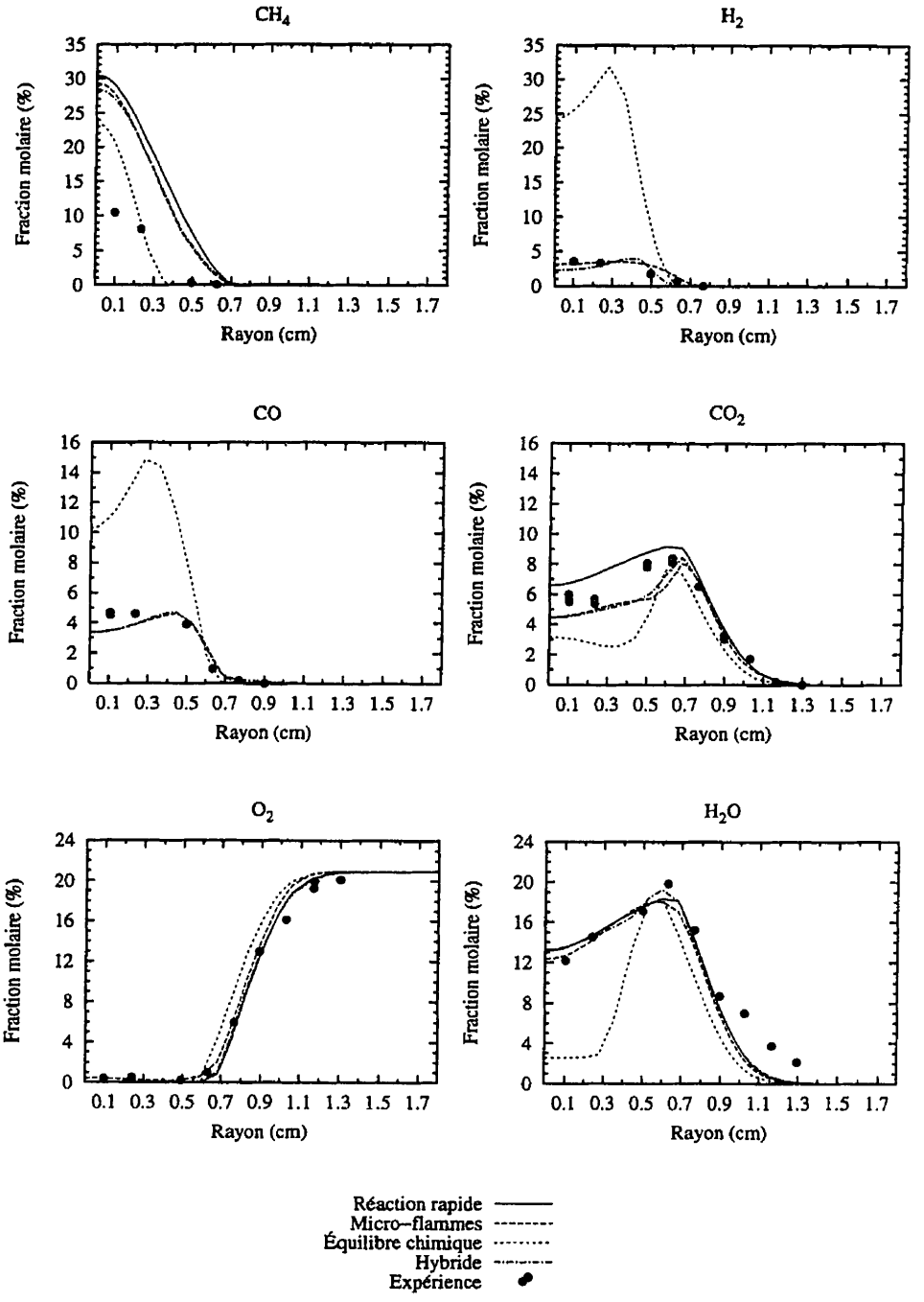


Figure 5.9: Comparaison des prédictions des modèles de combustion pour les fractions molaires avec les mesures de Mitchell et al. (1980) à $x = 2,4$ cm.

5.2 Flamme de diffusion turbulente dans un tunnel avec un bluff–body

L'aptitude du schéma à simuler l'interaction entre deux jets turbulents isothermes ou deux jets laminaires réactifs a déjà été évaluée. L'étape suivante consiste à étudier un écoulement qui combine ces deux aspects à savoir, un écoulement turbulent avec réaction chimique. Pour ce faire, nous allons simuler l'expérience de Correa et Gullati (1992) qui consiste en une flamme de diffusion turbulente.

L'expérience a été effectuée dans un tunnel avec un *bluff–body* pour stabiliser la flamme. Le tunnel a une section transversale carrée de 15,2 cm $\times$ 15,2 cm mais Correa et Pope (1992) soutiennent qu'une géométrie axisymétrique avec une section d'égale surface peut être utilisée sans commettre d'erreur appréciable (figure (5.10)). En effet, les dimensions du tunnel étant beaucoup plus grandes que celles du diamètre du *bluff–body* ($\times$4), l'approximation demeure valable.

L'expérience a été réalisée à pression atmosphérique avec une température à l'entrée de 300 K et des vitesses d'injection de 80 m/s pour le combustible et 6,5 m/s pour l'air. Les paramètres à l'entrée pour k et ϵ sont identiques à ceux recommandés par Correa et Gullati (1992), à savoir $\lambda = 0.005$ et $\alpha = 0.03$ dans l'équation (2.82). Le combustible a une composition volumétrique de $27,5\%$ CO, $32,3\%$ H_2 et $40,2\%$ N_2. Dans ce cas, il n'est pas possible d'utiliser le modèle de micro–flammes puisqu'il n'est valable que dans le cas du méthane pur. Les modèles utilisés sont ceux à chimie infiniment rapide, d'équilibre chimique et hybride.

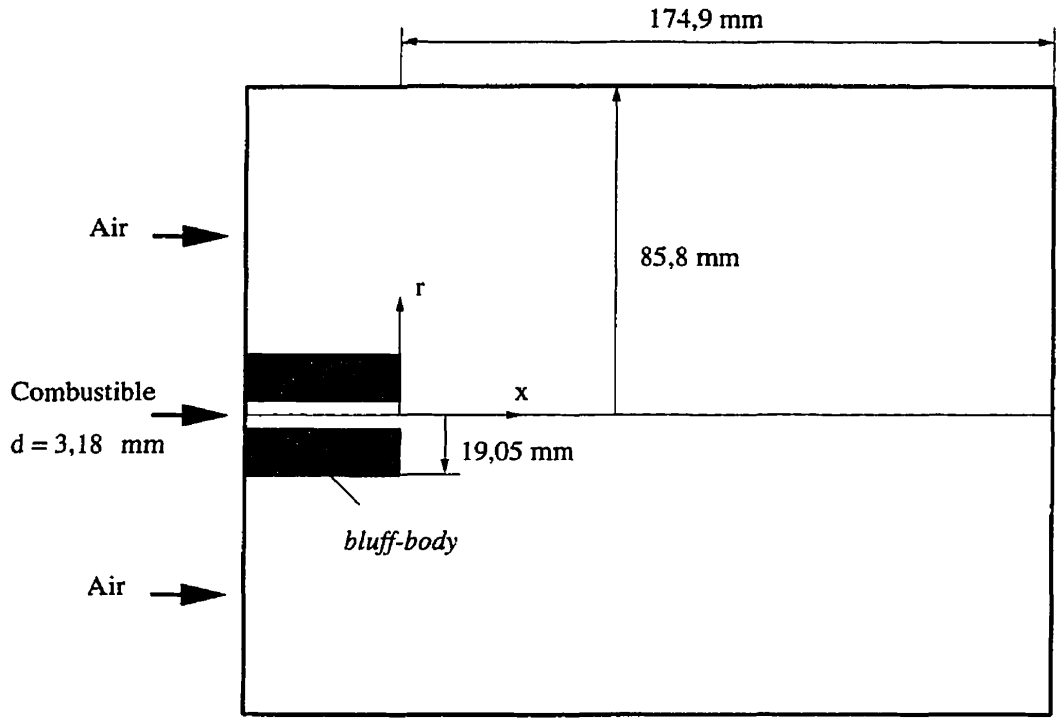


Figure 5.10: Géométrie utilisée dans l'expérience de Correa et Gullati (1992).

Une étude de l'effet du maillage sur la solution a été effectuée avec le modèle d'équilibre chimique. En partant d'une taille moyenne de triangle $h_1 = 1$ pour le Maillage 1 (3463 triangles), le maillage a été raffiné jusqu'à atteindre $h_3 = 0,55$ pour le Maillage 3 (10591 triangles) en passant par $h_2 = 0,7$ pour le Maillage 2 (7371 triangles). Pour plus de clarté, on présente à la figure (5.11) le maillage le moins dense, en l'occurrence le Maillage 1. Le maillage a été raffiné au niveaux du *bluff-body* pour mieux capter la zone de recirculation. La figure (5.12) montre l'évolution du taux de mélange moyen sur l'axe de symétrie et on remarque que la différence entre les Maillages 2 et 3 n'est pas très significative. Par conséquent, tous les résultats qui vont suivre seront extraits du Maillage 3, le plus fin.

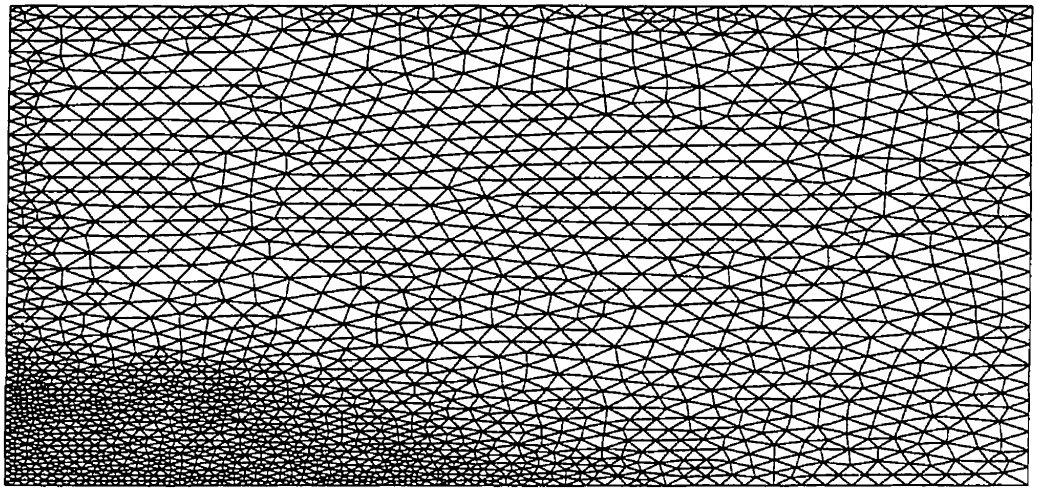


Figure 5.11: Flamme de diffusion turbulente dans un tunnel: maillage.

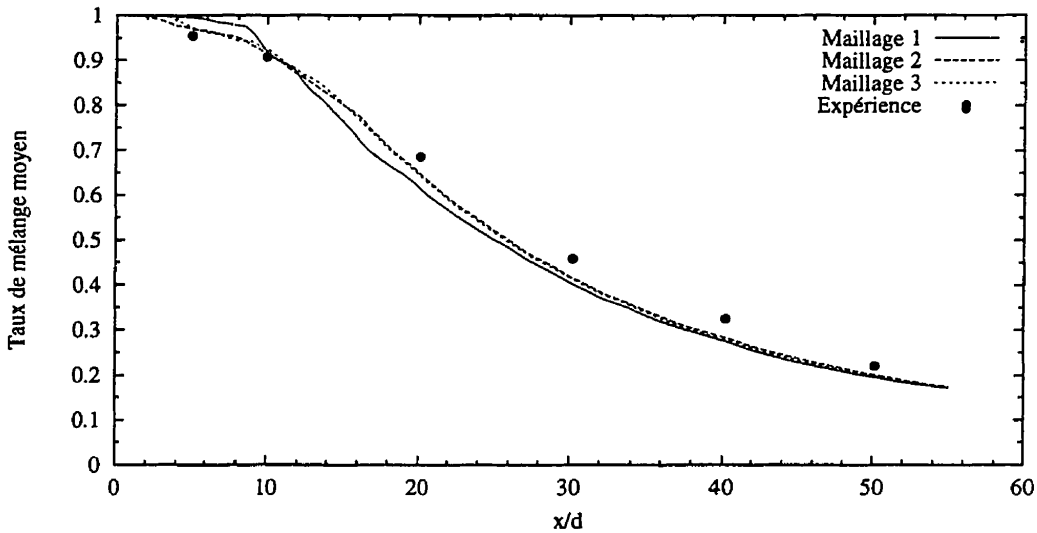


Figure 5.12: Profil de $\tilde{f}$ sur l'axe de symétrie calculé avec la méthode d'équilibre chimique pour les trois maillages étudiés.

La figure (5.13) montre les vecteurs vitesse moyens à l'embouchure des jets. La zone de stagnation et la région à haut taux de cisaillement situées à $x/d \leq 10$ sont bien mises en évidence (d étant le diamètre de l'injecteur de combustible). La recirculation d'air chaud permet d'alimenter la flamme dont le front coïncide avec la couche de cisaillement combustible/air où l'inter–diffusion moléculaire et turbulente est à son paroxysme. Les comparaisons avec les mesures de Correa et Gullati (1992) sont d'ailleurs effectuées aux stations $x/d = 10$ et $x/d = 20$ pour mieux refléter le comportement du schéma à proximité de cette zone critique.

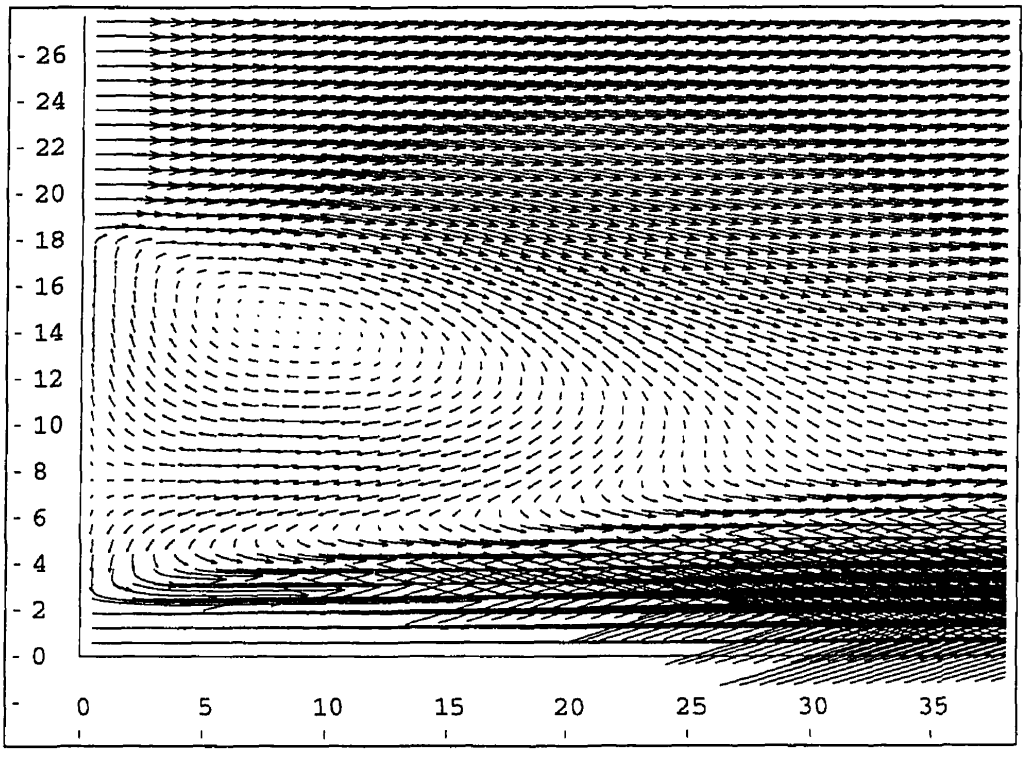


Figure 5.13: Flamme de diffusion turbulente dans un tunnel: champs des vecteurs vitesse à l'embouchure des jets (distances en mm).

5.2.1 Modèle hybride: cas particulier

L'utilisation du modèle hybride dans ce cas test est particulière. En effet, l'essence même du modèle réside dans l'amélioration de la prédiction du CO une fois que le combustible, généralement un hydrocarbure, est transformé en CO et en H_2 (cf. §(2.3.5)). Or, précisément dans ce cas le combustible est composé exclusivement de CO, de H_2 et de N_2 ce qui rend l'étape de rupture de chaîne du combustible caduc. Le modèle hybride se réduit donc à la combustion de H_2 par équilibre chimique et à la consommation de CO par le modèle à taux de réaction fini puisque le taux de réaction de CO est basé sur celui de l'*Eddy Break-Up* suivant la relation:

$$R_{CO}^{EBM} = -\frac{\widetilde{m}_{CO}^{0} - \widetilde{m}_{CO}}{\widetilde{m}_{CO}^{0}} A_{R_{fu}} \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} \cdot min|\widetilde{m}_{CO}, \frac{\widetilde{m}_{O_2}}{s}| \tag{5.1}$$

Cette formule donne des résultats qualitativement réalistes, pourvu que la constante empirique $A_{R_{fu}}$ ait été bien choisie (Borghi et Destriau (1995)). $A_{R_{fu}}$ peut dépendre de la structure de la flamme, du plissement des flammelettes ou de l'interaction combustible–oxygène. Magnussen (1975) qui a proposé le modèle à taux de réaction fini pour les flammes de diffusion en s'inspirant du modèle d'*Eddy Break-Up* pour les flammes de pré–mélange préconise la valeur $A_{R_{fu}} = 4$. Toutefois, pour obtenir de bonnes prédictions, Magnussen et Hjertager (1976) n'hésitent pas à multiplier cette «constante» par un facteur 8.

Cette dépendance de $A_{R_{fu}}$ nous a conduit à ne pas utiliser le modèle à taux de réaction fini dans l'ensemble des cas tests étudiés (McKenty (1992) et Meng (1994) ont déjà testé les limites de ce modèle au sein de la librairie CMBLIB et ont conclu à une différence marginale avec le modèle à chimie infiniment rapide).

Par conséquent, comme pour les cas turbulents le taux de réaction de CO dans le modèle hybride est basé sur la relation (5.1), nous avons étudié l'impact de la variation de $A_{R_{fu}}$ sur la qualité des résultats. Ainsi, nous avons effectué des calculs avec le modèle hybride pour des valeurs de $A_{R_{fu}}$ allant de $0,1$ à 40.

La variation de $A_{R_{fu}}$ n'a pas d'impact significatif sur les composés non carbonés ou sur le taux de mélange (figures (5.14) et (5.15)). La valeur optimale pour $A_{R_{fu}}$ se situe au voisinage de $0,2$. Elle permet d'obtenir un bon profil de température ainsi que des niveaux de concentration pour le CO et le CO_2 qui sont satisfaisants. Par ailleurs, on remarque qu'à partir d'une valeur seuil de $A_{R_{fu}}$, la dépendance s'estompe et les profils de température et des concentrations commencent à se superposer. Cette valeur se situe au voisinage de 4. La valeur préconisée par Magnussen (1975) constitue une limite supérieure pour ce cas test particulier. Toutefois, les résultats obtenus avec $A_{R_{fu}} = 4$ présentent des pics en température et en CO_2 pour $r = 0,005\,m$ causés par une sous–prédiction de CO à cet endroit.

Si nous voulons donc utiliser la valeur proposée par Magnussen (1975), il faudrait trouver un autre moyen d'atténuer les pics de température et cela est généralement l'apanage de la pondération. Dans le cas du modèle hybride, il n'est actuellement pas possible de pondérer les résultats étant donné le caractère bimodal de la fonction de densité de probabilité $\tilde{P}(f, m_{CO})$ qui serait nécessaire, mais dont la forme est inconnue. Toutefois, il est possible de comparer les résultats avec et sans pondération pour les autres modèles de combustion et faire une analogie avec le modèle hybride.

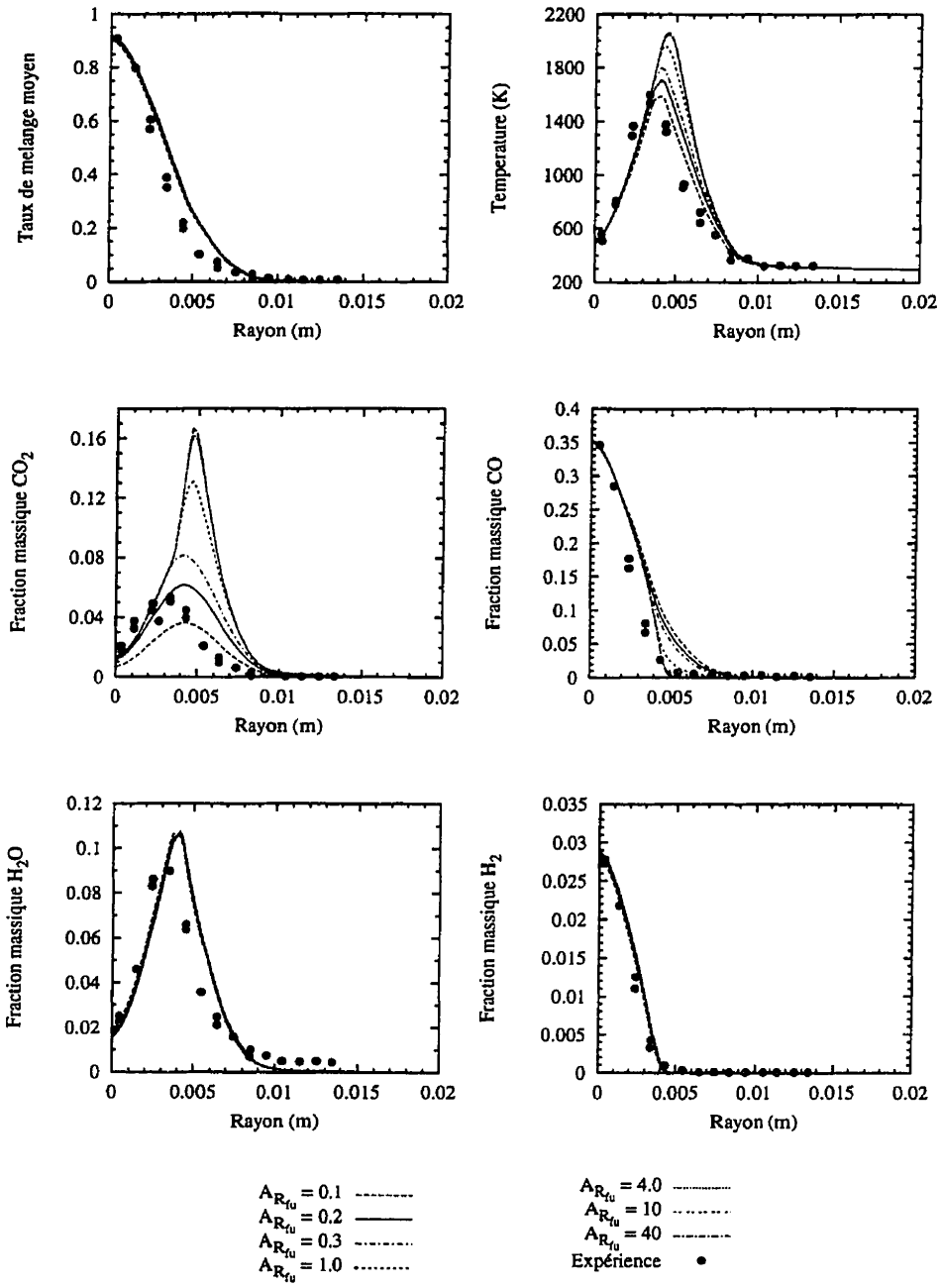


Figure 5.14: Station $x/d = 10$. Comparaison des profils de f, T et des fractions massiques pour des valeurs de $A_{R_{fu}}$ allant de $0,1$ à 40.

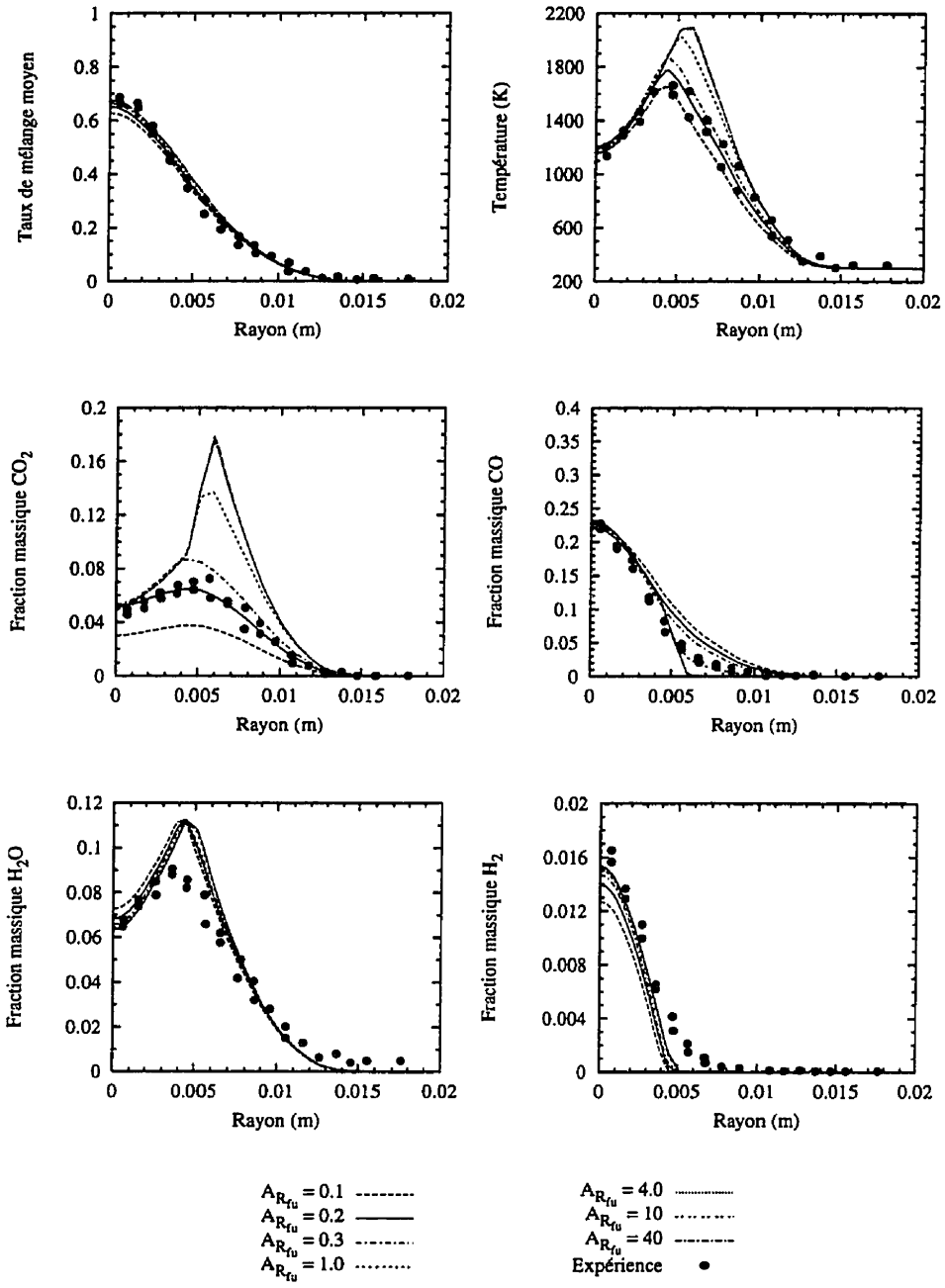


Figure 5.15: Station $x/d = 20$. Comparaison des profils de f, T et des fractions massiques pour des valeurs de $A_{R_{fu}}$ allant de $0,1$ à 40.

5.2.2 Utilisation de la pondération

La pondération par fonction de densité de probabilité est utilisée dans tous les cas tests turbulents à travers la procédure de calcul validée au paragraphe (4.6). Nous proposons ici de comparer notre méthode de pondération qu'on appellera communément $k-\epsilon$/PDF à celle de Correa et Pope (1992) basée sur une méthode hybride Monte Carlo PDF/volumes finis.

La méthode Monte Carlo PDF consiste à résoudre les équations de Navier–Stokes couplées à une équations de transport de PDF multidimensionnelle ($P(\mathbf{U}, f, m_i)$) par une méthode Lagrangienne explicite (Pope (1981) et Pope (1990)). C'est une méthode où les handicaps reliés à une connaissance *a priori* de la forme de la PDF et au recours à des moyennes statistiques sont éliminés. La méthode Monte Carlo est capable d'une grande précision mais requiert des temps de calcul relativement importants qui augmentent linéairement avec la dimension de la PDF à transporter (Kuo (1986)).

L'effet de la pondération par fonction de densité de probabilité apparaît dans les figures (5.16) et (5.17) représentant les isothermes obtenues avec le modèle d'équilibre chimique. Les isolignes obtenues avec le modèle de chimie infiniment rapide sont quasiment les mêmes et ne sont donc pas présentées. On remarque que les résultats non–pondérés (figure (5.16)) ont une distribution beaucoup plus régulière que les résultats pondérés (figure (5.17)). La pondération a pour effet de générer des discontinuités surtout au voisinage du mélange stoechiométrique où le caractère intermittent de la turbulence se fait de plus en plus sentir. D'ailleurs on remarque que l'allure des isothermes le long du front de flamme est différente d'une figure à l'autre.

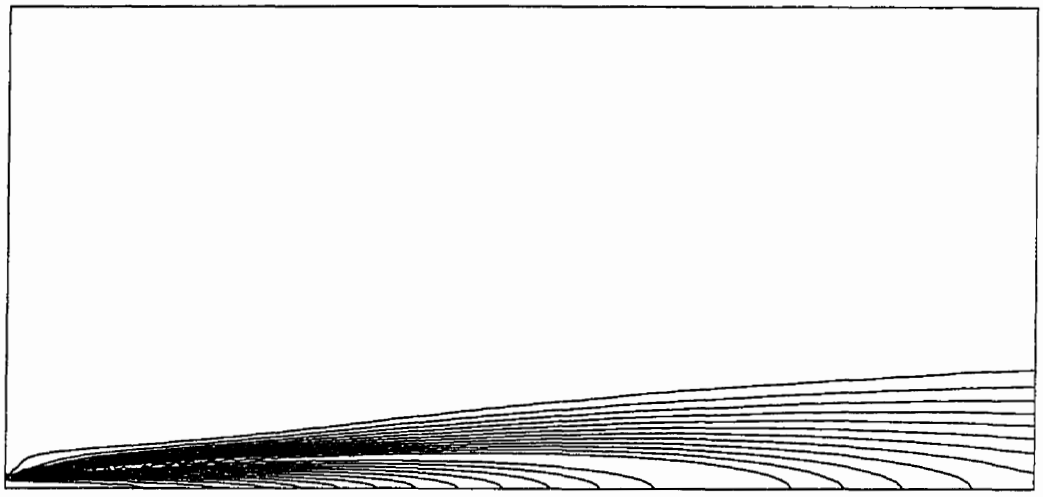


Figure 5.16: Flamme de diffusion turbulente dans un tunnel: lignes isothermes sans pondération obtenus avec le modèle d'équilibre chimique.

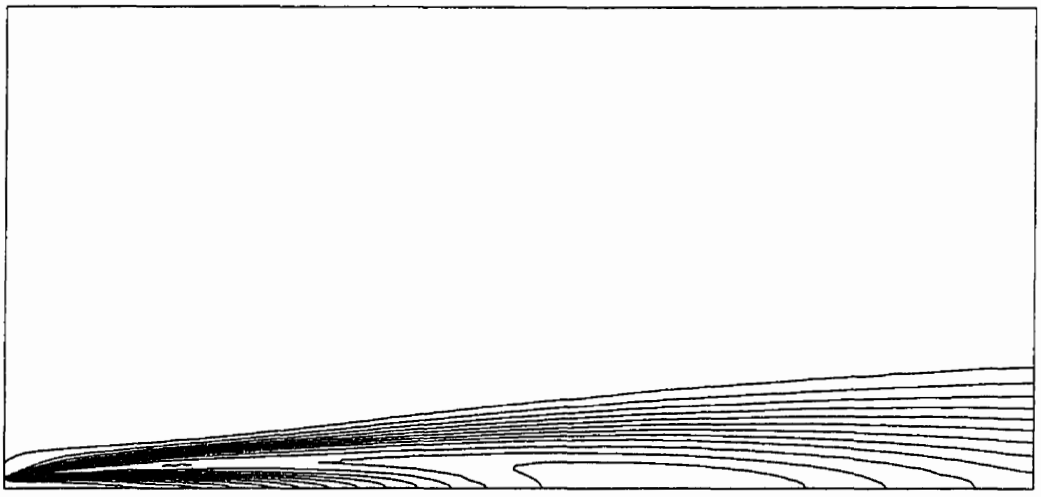


Figure 5.17: Flamme de diffusion turbulente dans un tunnel: lignes isothermes avec pondération obtenus avec le modèle d'équilibre chimique.

La figure (5.18) montre l'effet de la pondération sur le taux de mélange et sur la température dans le cas des modèles d'équilibre chimique et de chimie infiniment rapide. Il n'y a pas de différence notable entre les prédictions des deux modèles mais, par contre, la pondération donne les meilleurs résultats.

La différence entre les résultats pondérés et non–pondérés apparaît dans la zone de flamme (proche de l'axe de symétrie) et particulièrement au niveau du front de flamme là où les fluctuations sont les plus importantes. En effet, on remarque une différence de presque 25% dans le pic de température entre les résultats pondérés et non–pondérés, et ce aux deux stations $x/d = 10$ et $x/d = 20$. Cette différence s'estompe rapidement quand on s'éloigne du front de flamme puisque les fluctuations deviennent négligeables devant les grandeurs moyennes $\widetilde{f''^2} \ll \tilde{f}$ (cf. §(3.2.1) pour plus de détails sur l'importance relative des fluctuations dans différents endroits du domaine). La pondération permet de réduire les pics de température pour les modèles à chimie infiniment rapide et d'équilibre chimique et il devrait en être de même pour le modèle hybride si la fonction de pondération bimodale $\tilde{P}(f, m_{co})$ était connue.

En effet, la distribution de la température dans le cas du modèle hybride est identique à celle des deux autres modèles sans pondération et il en est implicitement de même pour les concentrations. Nous pouvons donc conclure, sans généraliser, que la valeur de $A_{R_{fu}} = 4$ semble adéquate et que pour atténuer les pics de température, nous pourrions utiliser une valeur plus petite pour $A_{R_{fu}}$ en l'occurrence $0,2$ et ce, à défaut d'une fonction de pondération bimodale connue.

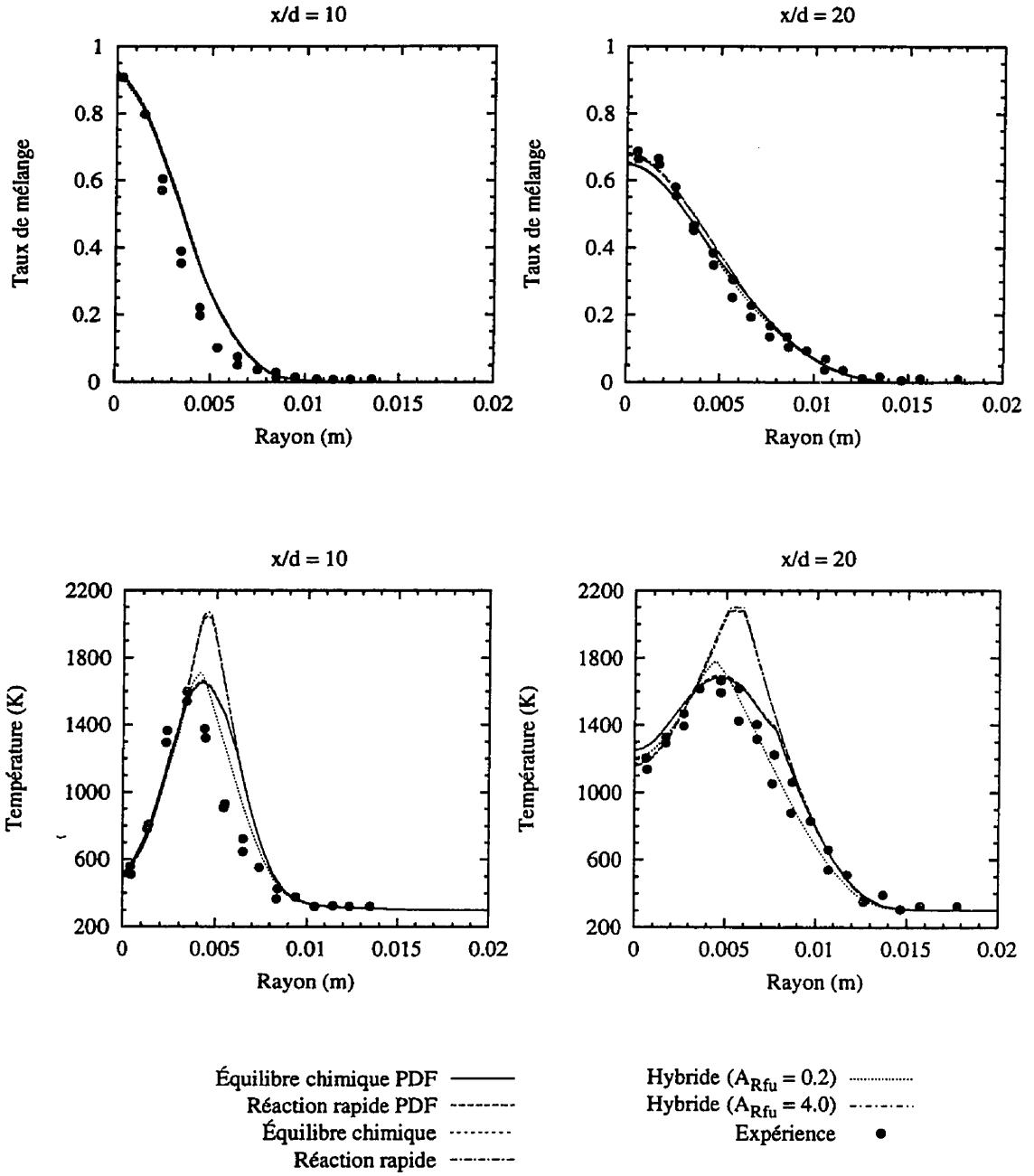


Figure 5.18: Comparaison des profils de f et T avec et sans pondération dans le cas des modèles d'équilibre chimique et de chimie infiniment rapide.

5.2.3 Comparaison des modèles

Dans la figure (5.19), on compare les profils de $\tilde{f}$ obtenus avec notre méthode $k-\epsilon$/PDF à ceux de la méthode Monte Carlo PDF utilisée par Correa et Pope (1992). L'évolution de $\tilde{f}$ sur l'axe de symétrie est en accord avec les mesures expérimentales dans la région de stagnation $x/d \leq 20$ là où les niveaux de turbulence sont faibles. Toutefois, à partir de $x/d = 20$, les deux méthodes ont des comportements contraires. En effet, avec le modèle k–ϵ le jet dégénère rapidement alors qu'avec la méthode Monte Carlo c'est l'inverse qui se produit. Par ailleurs, les conditions d'entrée pour k et ϵ ne semblent pas affecter l'écoulement puisqu'elles sont négligeables devant la turbulence générée dans la couche de cisaillement.

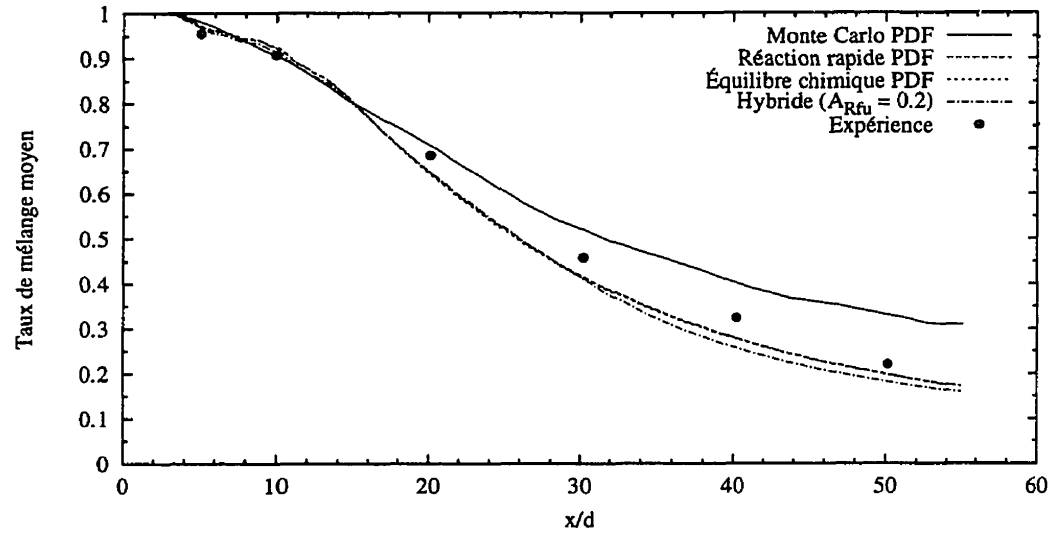


Figure 5.19: Profils du taux de mélange sur l'axe de symétrie. Comparaison avec les calculs de Correa et Pope (1992).

Les figures (5.20) et (5.21) montrent les profils de $\tilde{f}$ et $\tilde{T}$. Les maximums et l'allure des courbes épousent bien les points expérimentaux et la méthode $k-\epsilon$/PDF se comporte mieux que la méthode Monte Carlo PDF à la station $x/d = 20$ en étant moins diffusive. Toutefois, à la station $x/d = 10$ et pour les deux approches, on assiste à une différence entre le taux de mélange moyen et les mesures dans la couche de cisaillement; écart qui passe d'ailleurs inaperçu compte tenu de la forte pente du profil dans cette zone. Cette différence a des répercussions sur la précision du profil de température à la même station.

Les figures (5.20) et (5.21) montrent aussi les calculs à respectivement $x/d = 10$ et $x/d = 20$ pour les valeurs moyennes des fractions massiques de CO_2, CO, H_2O et H_2. Les prédictions pour CO et H_2 sont très bonnes. Pour le H_2O, il existe une concordance dans l'allure de la courbe avec un bon emplacement du maximum, mais dans la zone de mélange riche ($r \leq 0,01m$) le désaccord avec l'expérience est très apparent. Correa et Pope (1992) attribuent cet écart dans leur modèle à l'hypothèse d'équilibre partiel qui n'est pas très justifiée dans cette région. On pourrait, dans notre cas, évoquer la même raison pour le cas du modèle d'équilibre chimique alors que dans le cas du modèle à chimie infiniment rapide, l'hypothèse d'une réaction irréversible sans dissociation peut être à l'origine des différences. Les comparaisons pour le CO_2 moyen sont plus problématiques et peuvent être expliqués par les mêmes raison évoquées pour le H_2O. En outre, un autre facteur cité par Correa et Gullati (1992) réside dans la difficulté à mesurer ces espèces dans le cadre du *Laser Raman Scattering System.*

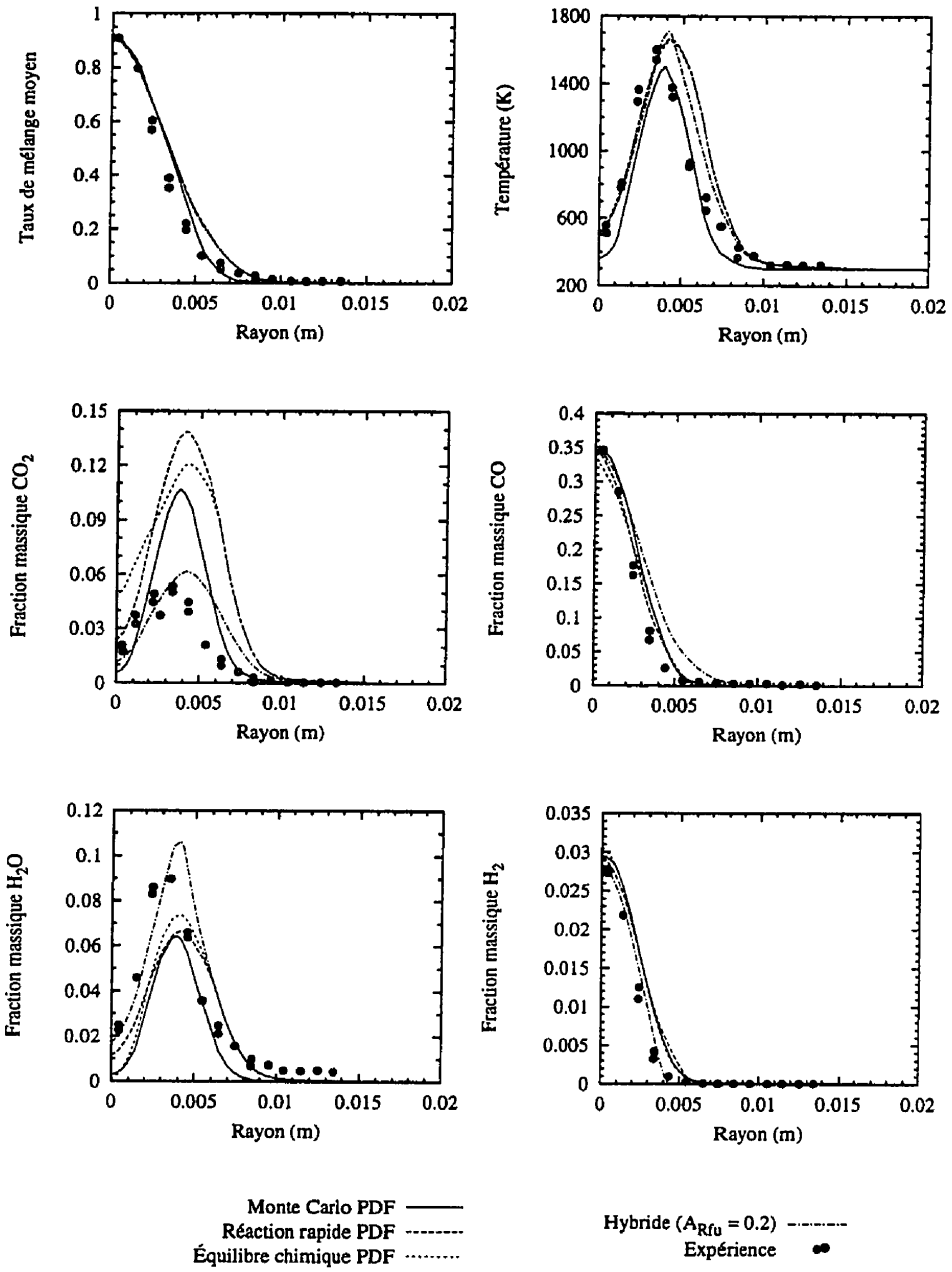


Figure 5.20: Station $x/d = 10$. Comparaison des profils de $\tilde{f}$, $\tilde{T}$ et des fractions massiques moyennes avec ceux de Correa et Pope (1992).

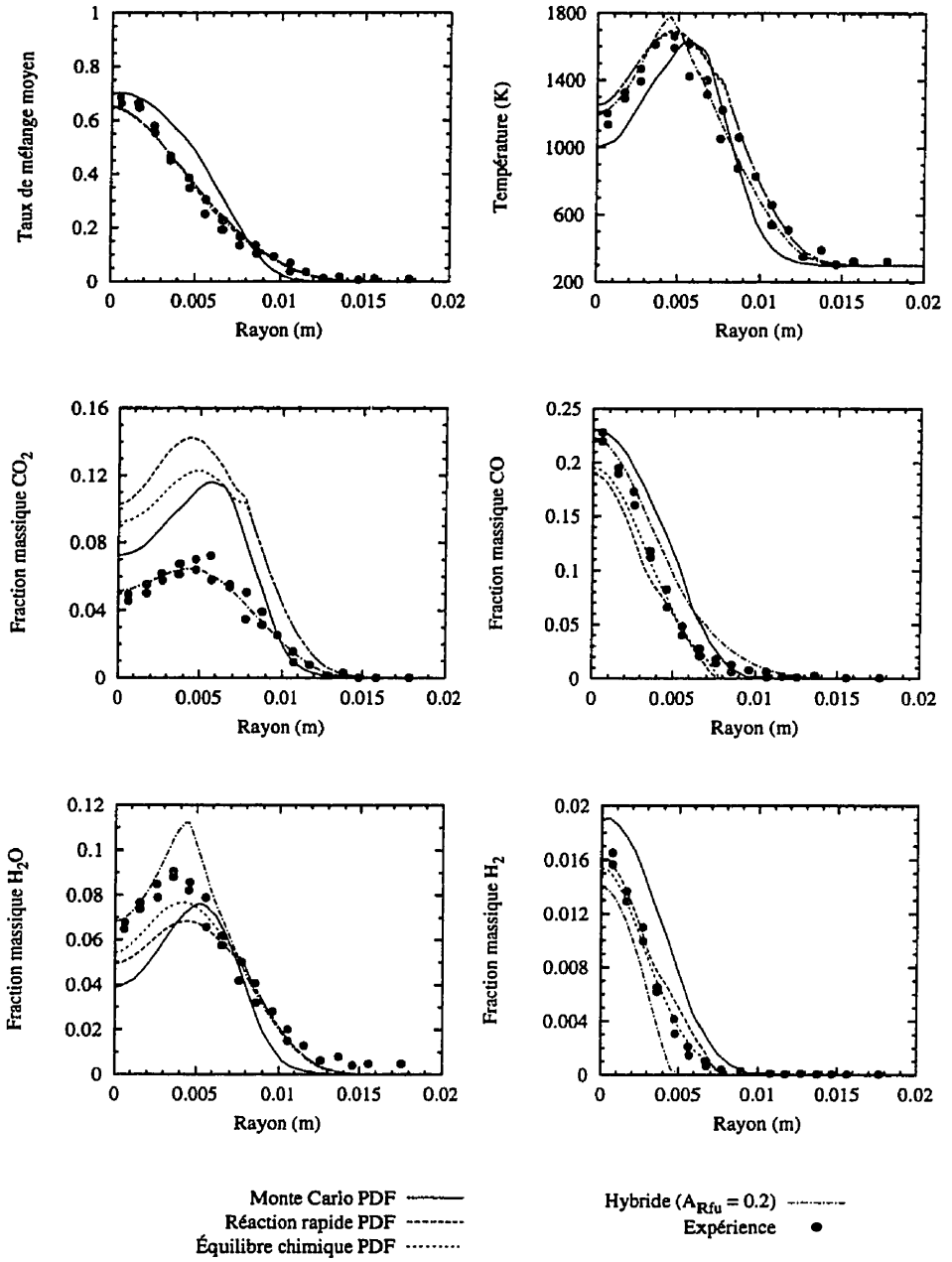


Figure 5.21: Station $x/d = 20$. Comparaison des profils de $\tilde{f}$, $\tilde{T}$ et des fractions massiques moyennes avec ceux de Correa et Pope (1992).

5.2.4 Nécessité de la pondération

Avec la valeur $A_{R_{fu}} = 4$, le modèle hybride donne de bonnes prédictions pour la concentration de CO mais présente un pic pour celle de CO_2 (figures (5.14) et (5.15)). Avec la valeur $A_{R_{fu}} = 0,2$, on arrive à améliorer la prédiction de CO_2 et de la température mais le profil de CO s'écarte des points expérimentaux au front de flamme ($r \approx 0,005\,m$). La variation de la valeur de $A_{R_{fu}}$ ne fait donc que diminuer ou augmenter la production de CO_2 (et donc de la chaleur) et parallèlement atténuer ou accentuer le pic de température. L'effet de sa réduction qui semble s'apparenter à celui d'une pondération n'est en fin de compte qu'un moyen de contrôler la concentrations de CO et donc de CO_2 via le taux de réaction de CO. En effet, quelle que soit sa signification physique, $A_{R_{fu}}$ demeure un facteur multiplicatif permettant de diminuer ou d'augmenter le taux de réaction de CO. Ainsi, le fait de s'écarter de la valeur $4,0$ calée pour les flammes de diffusion par Magnussen (1975) dans le but d'obtenir de meilleurs résultats suggère une connaissance *a priori* de la solution ce qui est paradoxal. Par conséquent, la précision du modèle hybride réside principalement dans la détermination et l'utilisation d'une PDF bimodale.

Sommes toute, le niveau de concordance avec les mesures expérimentales obtenu avec la méthode $k-\epsilon$/PDF est similaire à celui de la méthode Monte Carlo PDF. Toutefois, pour être précise, la méthode Monte Carlo PDF nécessite un grand nombre de particules à tel point que 85% du temps de calcul est affecté à l'algorithme des particules ce qui la rend nettement plus lente que la méthode $k-\epsilon$/PDF (Correa et Pope (1992)). Même si la méthode $k-\epsilon$/PDF présente des limitations attribuables au modèle $k-\epsilon$ où à l'utilisation de fonctions de densité de probabilité pré–déterminées, elle demeure capable d'une précision et d'une rapidité appréciables et concurrentielles.

5.3 Écoulement turbulent réactif: problème de méthanation

Le modèle d'équilibre chimique peut traiter des combustibles de composition très variée (55 espèces). Dans cet éventail de choix, il arrive que le modèle aboutisse à des solutions non–réalistes telle la méthanation (formation de CH_4 à partir de C et H). Ce comportement ne constitue pas une erreur du modèle mais plutôt une alternative qui n'est pas réalisable dans le contexte actuel. En effet, la formation de méthane est tout à fait possible moyennant un laps de temps important et c'est d'ailleurs un des principes de l'équilibre thermodynamique. Toutefois, les réactions chimiques à l'origine de ce phénomène n'ont pas le temps d'entrer en jeu ici puisqu'elles sont relativement lentes.

Pour mettre en évidence cette anomalie, nous avons choisi une simulation basée sur les expériences de Lockwood et al. (1974). Le combustible utilisé est le gaz de ville dont la composition volumétrique est H_2 55%, CH_4 27%, CO_2 8%, N_2 4%, CO 4% et C_2H_6 2%. Le combustible est injecté à une vitesse de 21,57 m/s et une température de 344 K alors que l'air pénètre par l'injecteur annulaire à 13,46 m/s et 301 K (figure (5.22)). Le rapport combustible–air est $F/A = 0,0635$ et le nombre de Reynolds qui vaut 16030 est défini par:

$$Re = \frac{4\left(\dot{m}_{fu} + \dot{m}_A\right)}{\pi \mu_A D} \tag{5.2}$$

où μ_A est une viscosité de référence prise dans le jet d'air et D est le diamètre de la chambre de combustion.

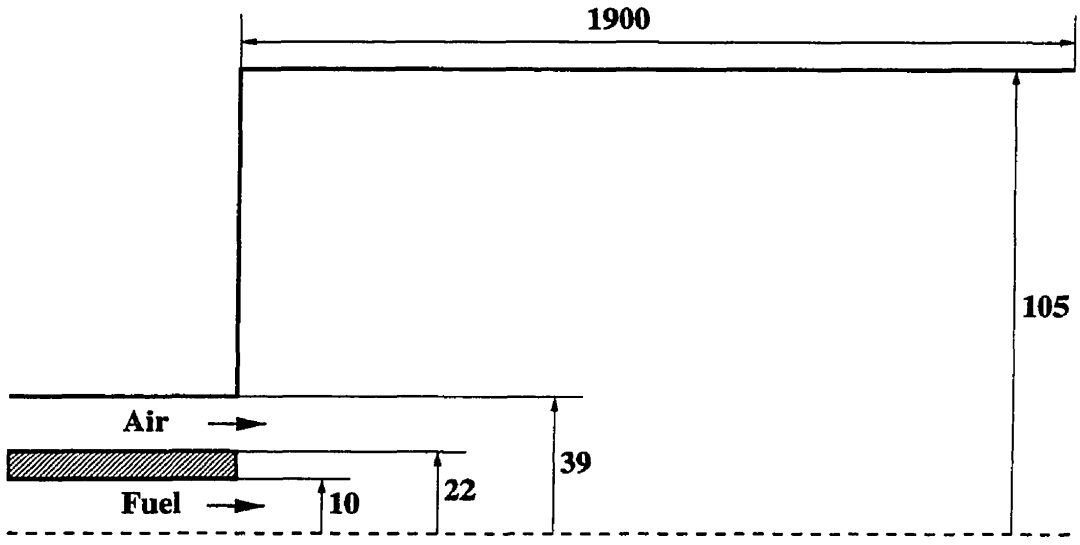


Figure 5.22: Géométrie utilisée dans l'expérience de Lockwood et al. (1974). Distances en mm.

5.3.1 Mise en évidence de la méthanation

Avant de simuler l'expérience de Lockwood et al. (1974), nous allons calculer la distribution des concentrations des espèces en fonction du taux de mélange dans les conditions de combustion décrites ci–dessus afin de mettre en évidence le problème de la méthanation. La figure (5.23) montre l'évolution des nombres de moles de CH_4 avec et sans réaction chimique en fonction du taux de mélange. On remarque qu'à partir de $f = 0,56$, il y a formation de méthane puisque la fraction molaire de CH_4 dépasse sa valeur initiale c'est–à–dire la valeur sans réaction chimique. De même, on voit à la figure (5.24) que le CO_2 tend à se dissocier et que le nombre de moles de CO_2 tend à aller en deçà de sa valeur initiale à partir de $f = 0,20$. Tous ces dépassements ont lieu loin de la stoechiométrie $f_{st} = 0,0863$, là où le mélange est riche. Comment cela se produit–il?

Pour répondre à cette question, il faut se rappeler que le modèle d'équilibre chimique se réduit en fin de compte à la résolution d'un système d'équations pour la conservation des atomes et des nombres de moles avec d'un côté les réactifs et de l'autre les produits de la réaction. Dans le cas de la méthanation, par exemple, étant donné que le combustible est constitué de plusieurs espèces à base de carbone (CH_4, CO, CO_2 et C_2H_6), les atomes de carbones issus de l'oxydation de CO ou de C_2H_6 ont tendance à former du CH_4 au lieu du CO_2. Il arrive même que le CO_2 se dissocie pour former du CH_4.

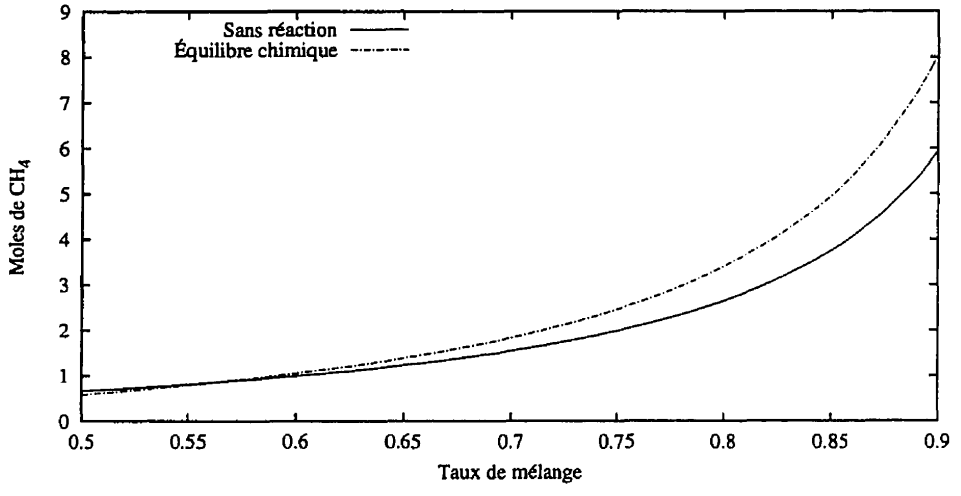


Figure 5.23: Méthanation: évolution du nombre de moles de CH_4 avec et sans réaction chimique. Nombre de moles basé sur une mole d'air.

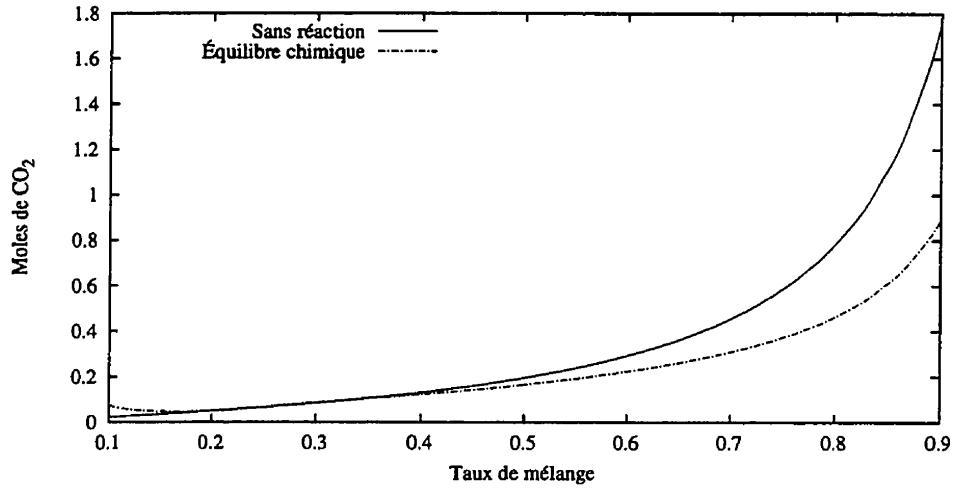


Figure 5.24: Dissociation: évolution du nombre de moles de CO_2 avec et sans réaction chimique. Nombre de moles basé sur une mole d'air.

Pour pallier ce problème, nous avons introduit des contraintes sur les espèces qui sont susceptibles d'avoir de tels comportement. Nous avons imposé des bornes supérieures pour les nombres de moles de CH_4 et de C_2H_6 et une borne inférieure pour le nombre de moles de CO_2 de manière à ce qu'ils restent dans les limites établies par la composition molaire sans réaction chimique.

Les figures (5.25), (5.26) et (5.27) présentent respectivement les distributions des nombres de moles de CH_4, C_2H_6 et CO_2 calculés avec le modèle d'équilibre chimique avec et sans contraintes (cf. §(2.3.3)). Nous remarquons que le modèle sans contrainte permet la combustion de C_2H_6 pour $f > 0,8$, ce qui est absurde. Le fait est que pour ces valeurs du taux de mélange, le modèle d'équilibre sans contrainte a recours, de manière non physique, à la décomposition de l'éthane pour créer du méthane. Parallèlement, nous assistons à la méthanation par dissociation de CO_2. Elle commence à $f = 0,2$ mais ne devient apparente que vers $f = 0,56$ pour s'accentuer au voisinage de $f = 1$.

Le modèle d'équilibre avec contraintes permet de freiner la dissociation irréaliste et la méthanation (Les courbes des nombres de moles de CH_4 sans réaction et avec contraintes sont d'ailleurs confondues à la figure (5.25)). La distribution de C_2H_6 prend une allure plus réaliste lorsque le mélange est riche. Les contraintes sur ces trois espèces permettent d'imposer des limites physiques au calcul d'équilibre chimique. Certes, les deux variantes du modèle d'équilibre chimique respectent la conservation des atomes mais le modèle avec contrainte permet d'orienter l'équilibre vers des solutions réalistes qui, étant donné les conditions de réaction, ne permettent pas la production d'hydrocarbures comme le méthane ou l'éthane.

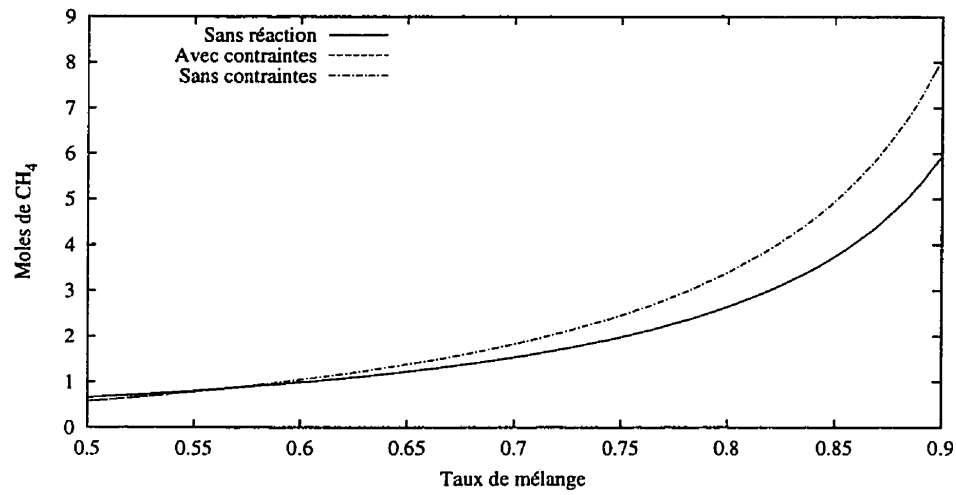


Figure 5.25: Méthanation : Évolution du nombre de moles de CH_4. Calculs du modèle d'équilibre chimique avec et sans contraintes. Nombre de moles basé sur une mole d'air.

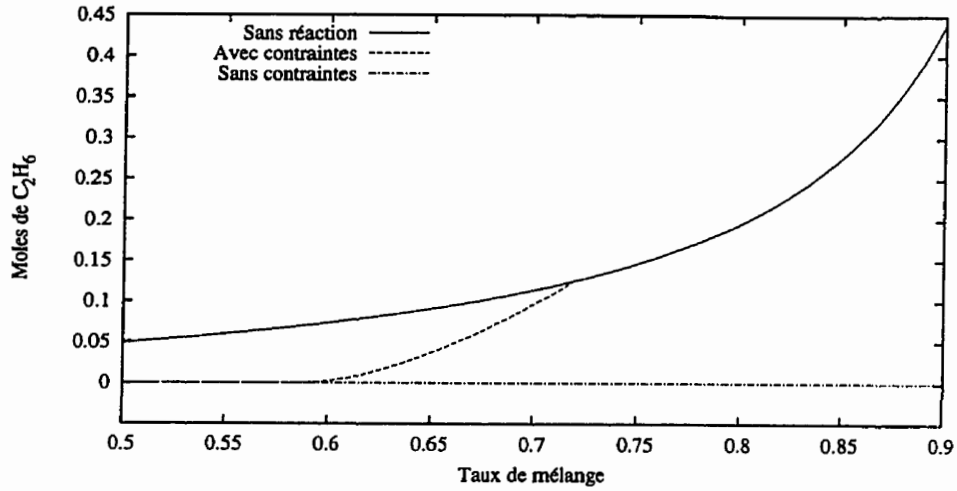


Figure 5.26: Évolution du nombre de moles de C_2H_6. Calculs du modèle d'équilibre chimique avec et sans contrainte. Nombre de moles basé sur une mole d'air.

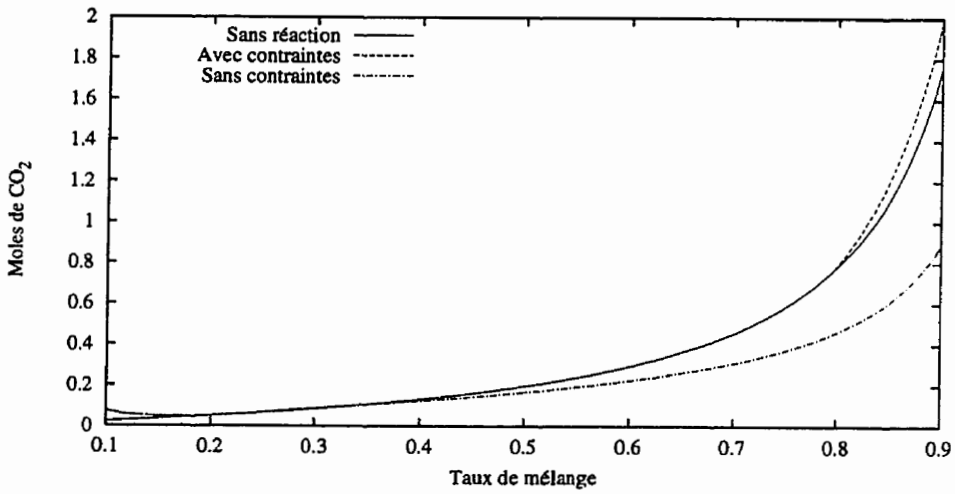


Figure 5.27: Dissociation: évolution du nombre de moles de CO_2. Calculs du modèle d'équilibre chimique avec et sans contrainte. Nombre de moles basé sur une mole d'air.

Les problèmes du modèle d'équilibre chimique ont lieu pour des mélanges riches généralement localisés dans une infime partie du domaine de calcul située au voisinage de l'embouchure du jet de combustible. Ils ne semblent donc pas affecter la température de la flamme (figure (5.28)). Néanmoins, la combustion de l'éthane à des taux de mélange élevés et la dissociation de CO_2 constituent des comportements non réalistes qu'il faut corriger. La combustion de C_2H_6 dans ces plages de taux de mélange s'accompagne d'une génération de chaleur qui affecte le profil de température. On remarque, en effet, une convergence asymptotique de la température vers 770 K lorsque f tend vers 1, ce qui est loin de la valeur d'injection de combustible fixée à 344 K. Cet écart pourrait engendrer une variation de densité qui aura pour effet d'accélérer le fluide faussant ainsi les profils de vitesse et le cisaillement entre les deux jets. D'ailleurs, cette lacune constitue une des principales raisons qui nous ont poussé à recourir au modèle d'équilibre chimique avec contraintes.

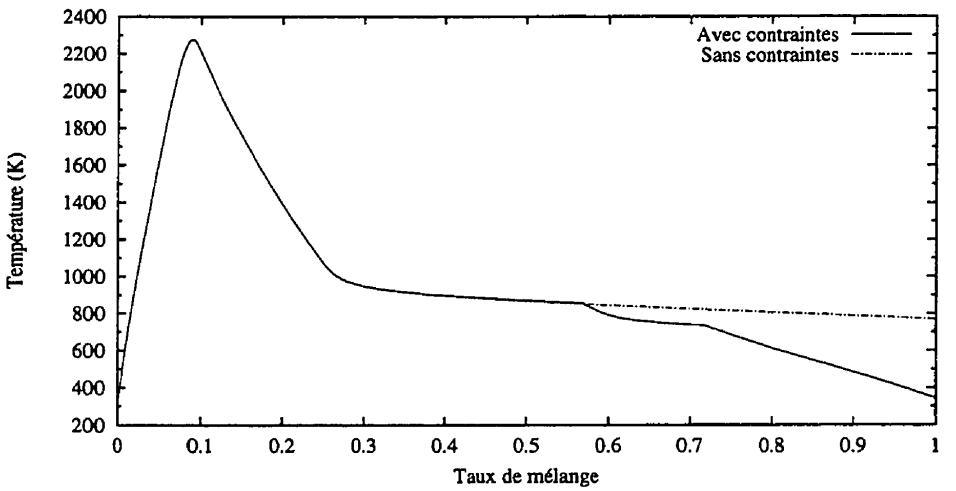


Figure 5.28: Évolution de la température dans le cas du modèle d'équilibre chimique avec et sans contraintes.

5.3.2 Simulation de l'expérience de Lockwood et al. (1974)

Une étude de maillage a été effectuée sur quatre maillages non structurés. En partant d'une taille de maille moyenne h_1 pour le Maillage 1 (4829 triangles), on raffine graduellement et uniformément dans tout le domaine pour arriver au Maillage 4 (16304 triangles) avec une rapport final $h_1/h_4 = 2$. La figure (5.30) présente l'évolution des profils de $\tilde{f}$ à quatre stations dans le cas du modèle à chimie infiniment rapide avec PDF et on peut considérer qu'à partir du Maillage 4 la solution devient indépendante du maillage. Les résultats présentés dans cette analyse sont extraits du Maillage 4. Toutefois, dans un soucis de clarté, nous présentons à la figure (5.29) le Maillage 1 qui a été comprimé dans la direction axiale étant donné un rapport de 19 entre la longueur et le rayon du domaine.

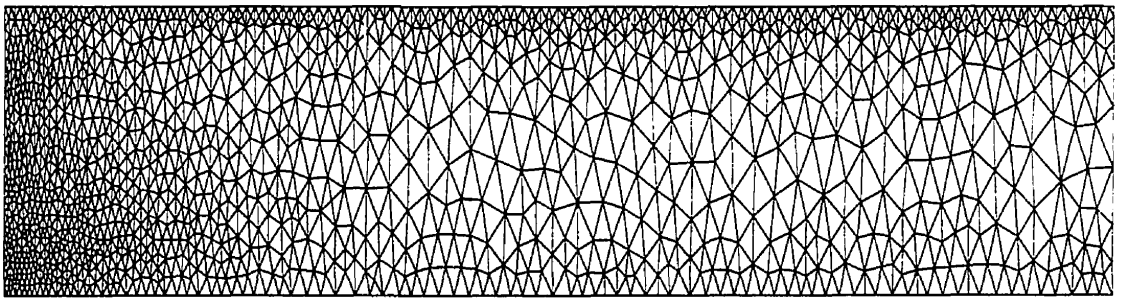


Figure 5.29: Type du maillage utilisé dans la simulation numérique de l'expérience de Lockwood et al. (1974). Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 4,92).

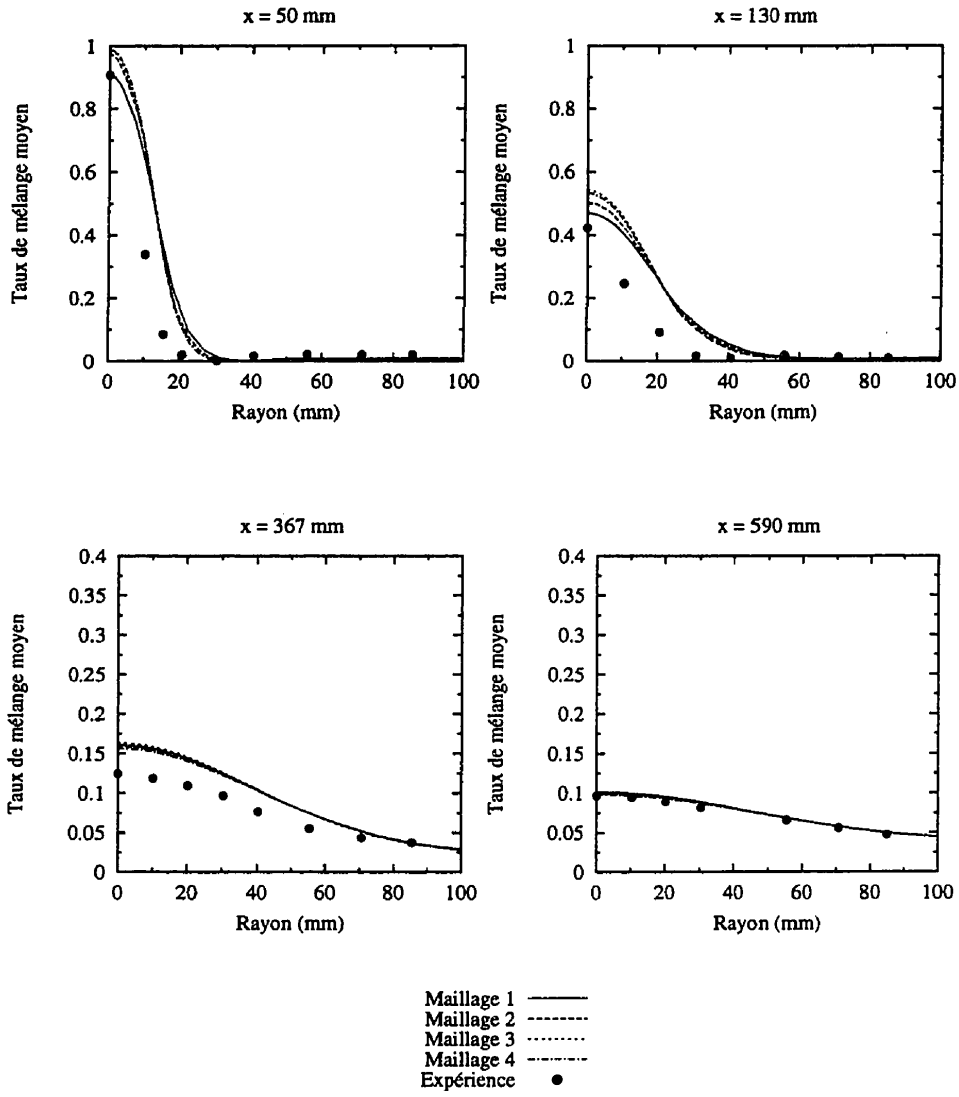


Figure 5.30: Influence du maillage sur le taux de mélange moyen à différentes stations en aval du brûleur. Expérience de Lockwood et al. (1974).

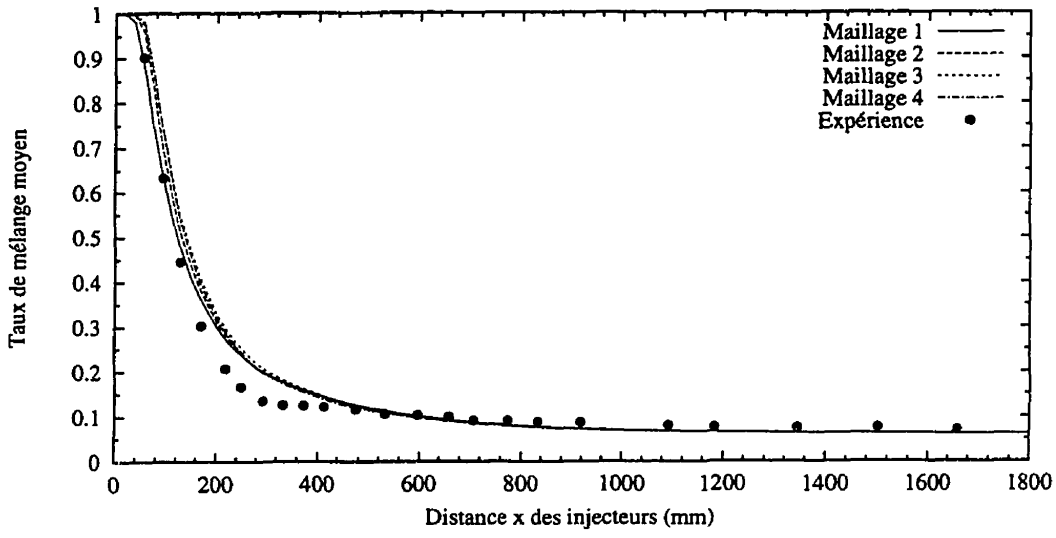


Figure 5.31: Influence du maillage sur la distribution du taux de mélange moyen sur l'axe. Expérience de Lockwood et al. (1974).

Les seules mesures disponibles pour ce cas test sont celles du taux de mélange. Il ne sera donc pas possible de se comparer aux mesures expérimentales pour quantifier l'impact des contraintes imposées au modèle d'équilibre chimique sur les concentrations des produits et juger la performance du modèle hybride quant à la prédiction du CO. Toutefois, nous présentons l'évolution des taux de mélange suivant l'axe du combusteur (figure (5.32)) et à différentes stations de mesure radiales (figure (5.33)).

La distibution sur l'axe montre qu'à partir de $x = 400\,mm$ les variations de f sont très faibles et se font de manière asymptotique aux alentours de la stoechiométrie ($f_{st} = 0,087$). Il devient donc très difficile de bien prédire la longueur de la flamme qui devient tributaire de la précision du schéma et peut facilement être décalée de sa valeur expérimentale $x_{st} \approx 700\,mm$. Le modèle d'équilibre chimique avec PDF donne une longueur de $735\,mm$, le modèle à chimie infiniment rapide avec PDF prévoit une longueur de $680\,mm$. Quant au modèle hybride, il aboutit à une flamme courte

de $550\,mm$ mais, en revanche, son taux de mélange se rapproche mieux des points expérimentaux pour $x < 400\,mm$. Cela est d'ailleurs confirmé par les graphes du taux de mélange présentés à la figure (5.33).

Ce comportement du modèle hybride n'est pas dû au modèle même, mais plutôt à l'absence de pondération. En effet, les modèles d'équilibre chimique et à chimie infiniment rapide sans PDF prévoient des longueurs de flamme similaires à celle du modèle hybride puisqu'elles sont respectivement de $545\,mm$ et $570\,mm$. D'ailleurs, l'évolution de f sur l'axe avec des calculs sans pondération en témoigne (figure (5.34)). Ceci confirme encore la bonne performance du modèle hybride mais soulève la nécessité de recourir à la pondération pour améliorer ses prédictions. Pour ce faire, il faudra déterminer une fonction de densité de probabilité bimodale qui dépend de f et de m_{CO}.

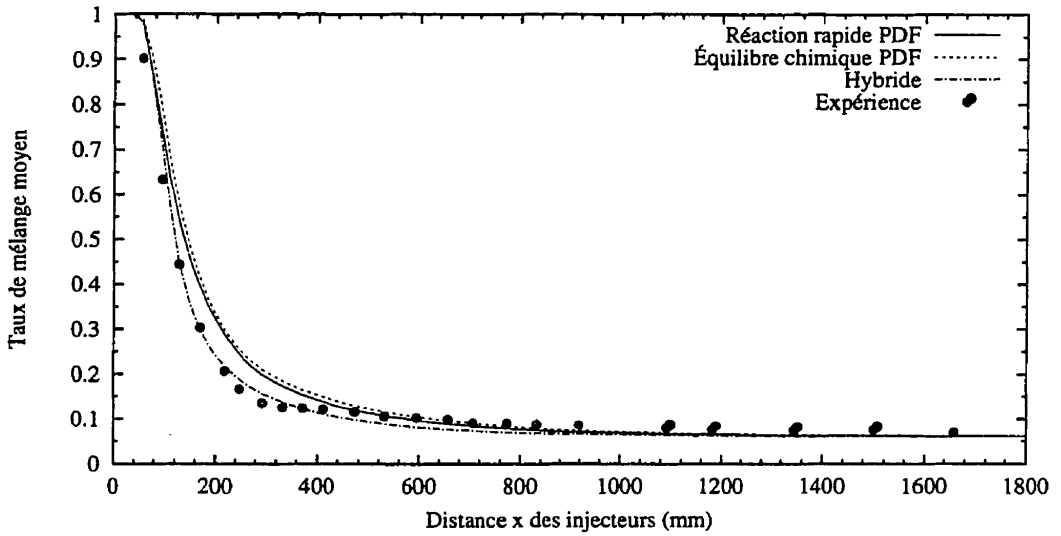


Figure 5.32: Distribution du taux de mélange moyen sur l'axe pour trois modèles de combustion. Calculs avec pondération pour la simulation de l'expérience de Lockwood et al. (1974).

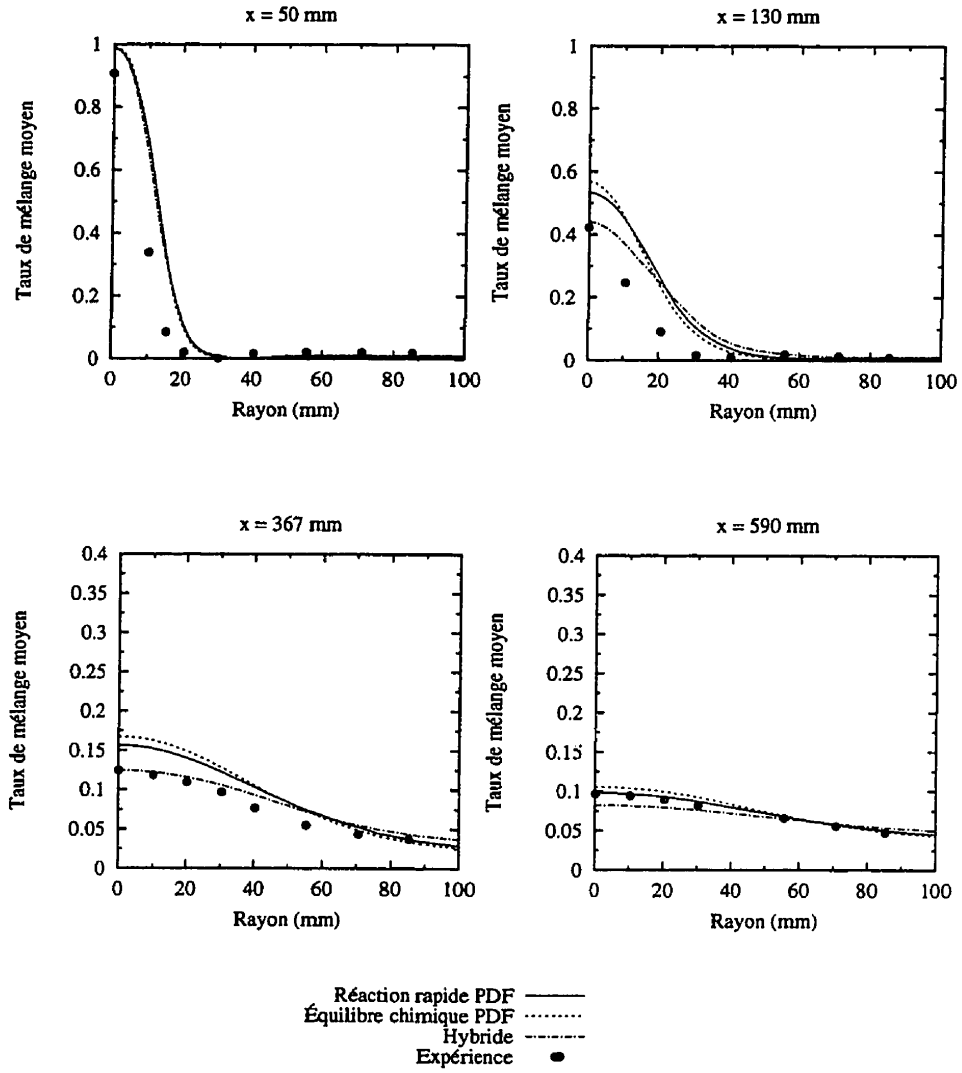


Figure 5.33: Distribution du taux de mélange moyen à différentes stations en aval du brûleur. Calculs avec pondération pour la simulation de l'expérience de Lockwood et al. (1974).

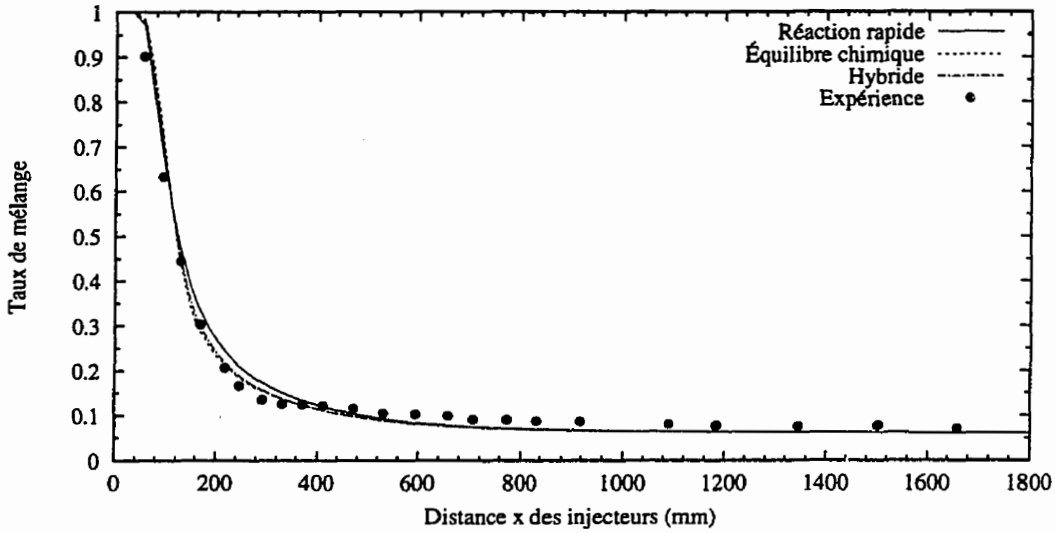


Figure 5.34: Distribution du taux de mélange sur l'axe. Calculs sans pondération pour la simulation de l'expérience de Lockwood et al. (1974).

5.4 Flamme de diffusion turbulente dans un combusteur axisymétrique

Dans ce cas test nous allons comparer les prédictions des quatre modèles de combustion dans le cas d'un écoulement turbulent réactif. Pour ce faire, nous allons analyser la simulation d'une flamme de diffusion confinée à l'intérieur d'un combusteur axisymétrique (figure 5.35). Les prédictions seront ensuite confrontées aux mesures expérimentales de Lewis et Smoot (1981). La composition volumétrique du combustible est CH_4 88,53%, C_2H_6 7,44%, N_2 2,55%, CO_2 1,39% et H_2 0,09%. Le combustible et le comburant sont injectés respectivement à des débits massiques de 2,84 g/s et 36,3 g/s et à des températures de 300 K et 589 K dans une enceinte où règne une pression de 94 KPa.

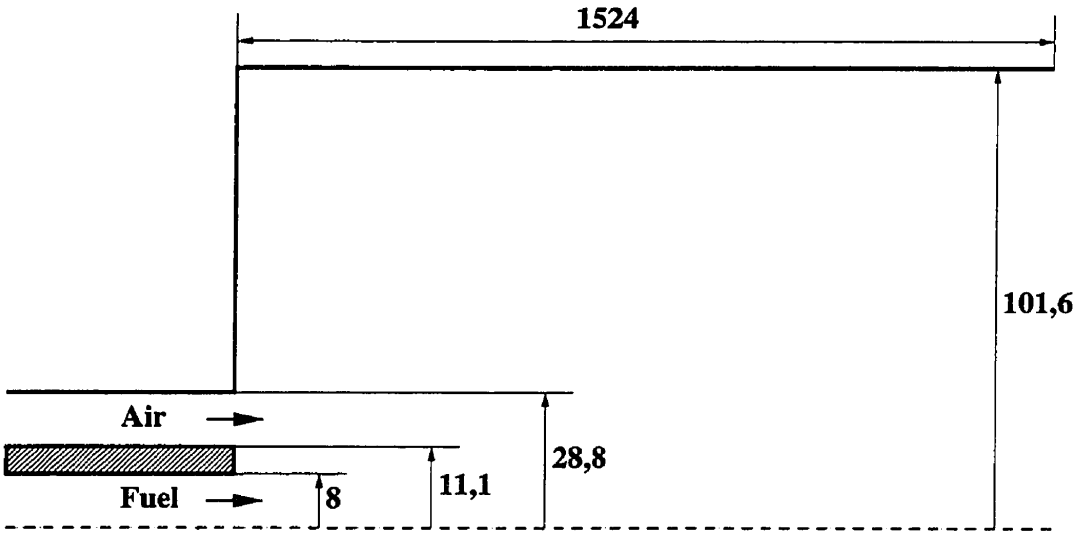


Figure 5.35: Géométrie utilisée dans l'expérience de Lewis et Smoot (1981).

5.4.1 Problème de méthanation

L'étude de ce cas a de nouveau mis en évidence le problème de méthanation avec le modèle d'équilibre chimique (figure (5.36)). La composition du combustible est telle que ce comportement n'apparaît que pour les mélanges riches. Ainsi, à partir de $f \approx 0,55$, il y a création de méthane à partir d'atomes de carbone et d'hydrogène qui émanent de la dissociation de CO_2 (figure (5.37)) et de la combustion du C_2H_6. D'ailleurs, la combustion complète de l'éthane se poursuit jusqu'à des taux de mélange supérieurs à $0,8$, ce qui est absurde (figure (5.38)). En outre, la courbe des nombres de moles de CO_2 présente des inflexions anormales au voisinage de $f = 0,85$ pour compenser la création de méthane.

Pour pallier ce problème, nous avons imposé une contrainte sur la concentration de CH_4 pour l'empêcher de dépasser sa valeur sans réaction. Avec cette limite, les courbes de CO_2 et de C_2H_6 ont pris des allures plus réalistes et nous avons freiné la méthanation (les courbes de CH_4 avec contrainte et sans réaction sont confondues). Il faut toutefois noter que ces problèmes du modèle d'équilibre chimique n'affectent pratiquement pas la solution puisqu'ils n'interviennent que pour des mélanges riches qui sont loin de la stoechiométrie ($f_{st} = 0,0596$). En effet, la zone de mélange riche se situe dans une région relativement petite au voisinage du jet de combustible mais le problème, comme nous l'avons mentionné dans le cas test de Lockwood et al. (1974), réside dans le fait que le profil de température peut tendre vers une valeur différente de celle du jet de combustible lorsque f tend vers 1. Dans le cas présent, la température ne semble pas présenter cet écart puisque le problème de méthanation n'est pas très prononcé.

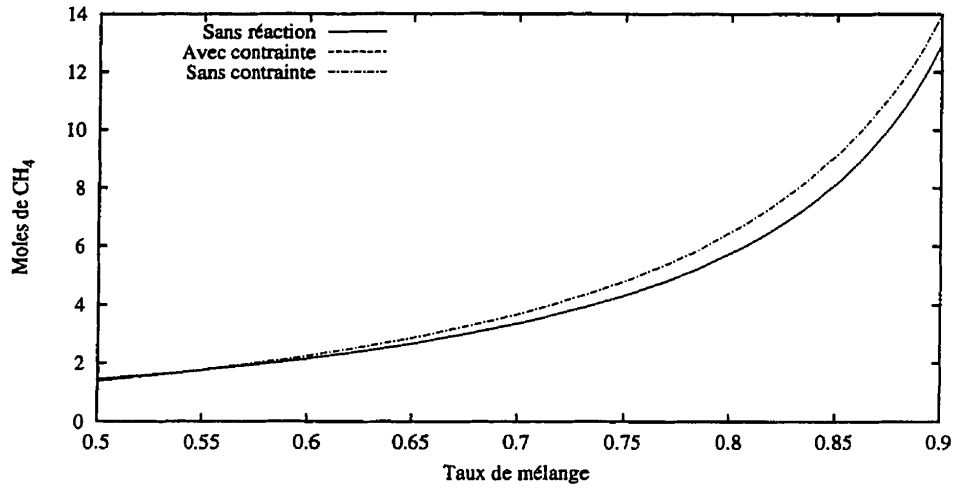


Figure 5.36: Méthanation : Évolution du nombre de moles de CH_4. Calculs du modèle d'équilibre chimique avec et sans contrainte. Nombre de moles basé sur une mole d'air.

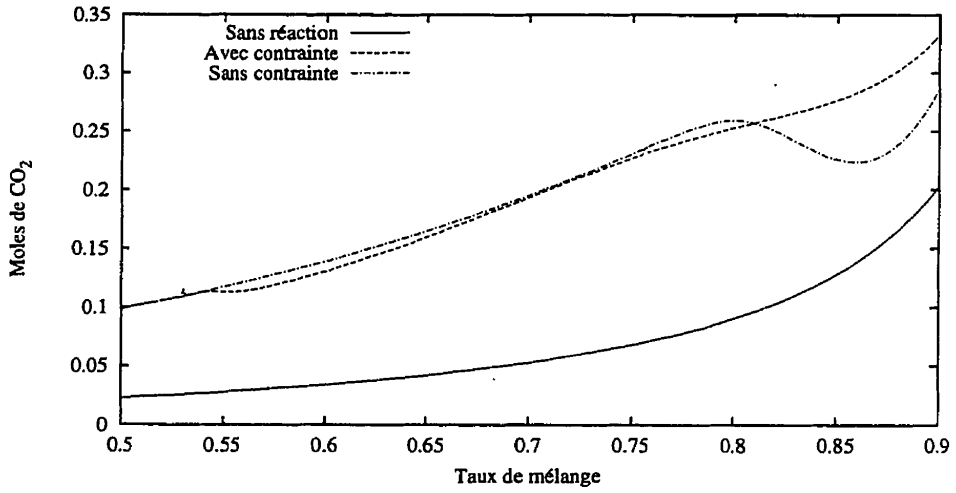


Figure 5.37: Dissociation: évolution du nombre de moles de CO_2. Calculs du modèle d'équilibre chimique avec et sans contrainte. Nombre de moles basé sur une mole d'air.

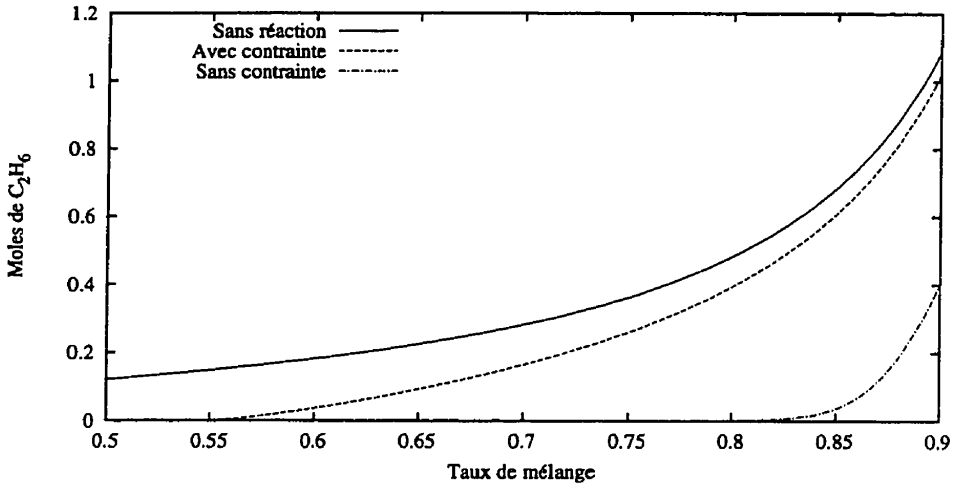


Figure 5.38: Évolution du nombre de moles de C_2H_6. Calculs du modèle d'équilibre chimique avec et sans contrainte. Nombre de moles basé sur une mole d'air.

5.4.2 Effet du maillage

L'étude de l'indépendance de la solution par rapport au maillage a été effectuée sur quatre maillages non structurés avec un rapport $h_1/h_4 = 2,22$ où h représente la taille moyenne des éléments du maillage. Du Maillage 1 au Maillage 4, un raffinement systématique a été effectué en réduisant uniformément la taille des éléments dans tout le domaine. Les calculs ont été faits dans le cas du modèle à chimie infiniment rapide avec pondération et les résultats de la figure (5.39) montrent que la région à l'embouchure des jets est sensible au maillage ($x = 95mm$). Le Maillage 4 avec ses 14523 éléments constitue donc une limite adéquate témoignant de l'indépendance de la solution vis–à–vis du maillage. D'ailleurs, dans ce qui suit tous les résultats présentés seront basés sur le Maillage 4. Pour plus de clarté, nous présentons à la figure (5.40) le Maillage 1 qui a été comprimé dans la direction axiale.

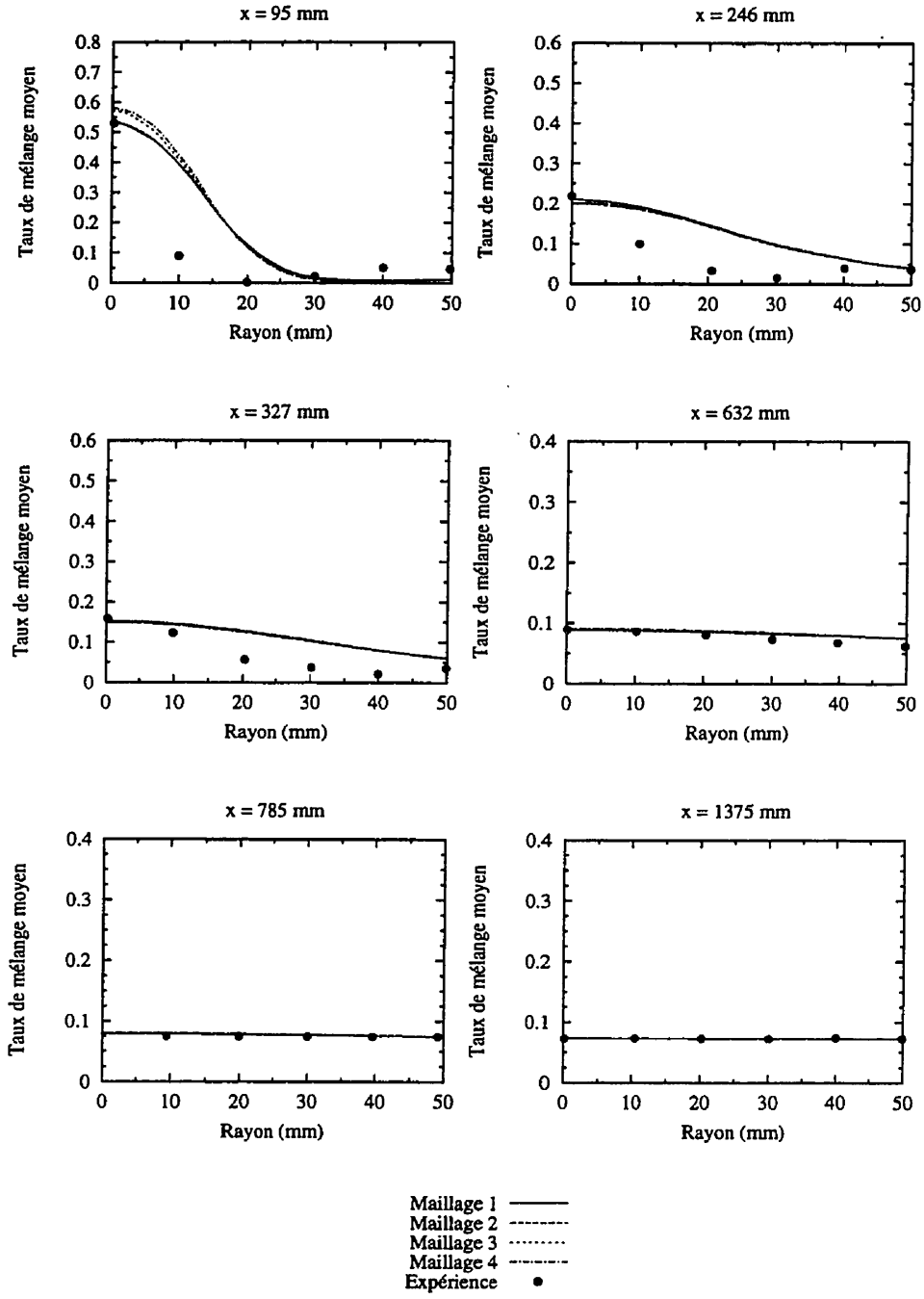


Figure 5.39: Influence du maillage sur le taux de mélange moyen à différentes stations en aval du brûleur. Expérience de Lewis et Smoot (1981).

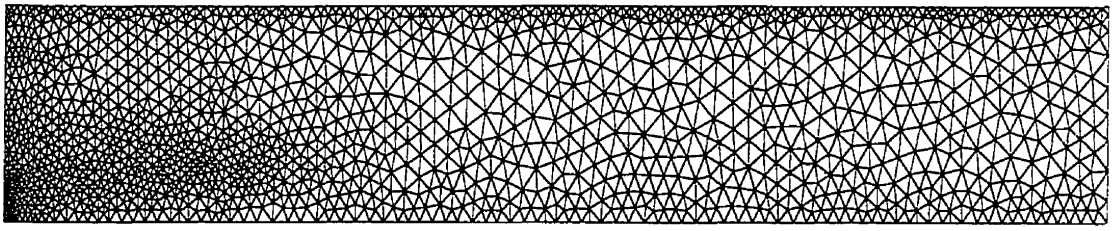


Figure 5.40: Type de maillage utilisé dans la simulation de l'expérience de Lewis et Smoot (1981). Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 3,06).

5.4.3 Comparaison des modèles de combustion

Comme le combustible contient du méthane en majorité (presque 90 %), le modèle de micro–flammes a été utilisé pour simuler cette expérience. En effet, le combustible a une composition équivalente de $C_\alpha H_\beta O_\eta N_\gamma$ ($\alpha = 1,048$, $\beta = 3,989$, $\eta = 0,028$ et $\gamma = 0,051$) qui est très proche de celle du CH_4. La pondération a été appliquée à tous les modèles sauf au modèle hybride. Pour ce dernier la constante $A_{R_{fu}}$ a été fixée à 4 et la première étape du processus de calcul (§(2.3.5)) a été réalisée en combinant les modèles d'équilibre chimique et à chimie infiniment rapide.

La figure (5.41) montre les lignes iso–taux de mélange. La flamme présente un aspect particulier puisque, contrairement à ce qu'on pourrait supposer, elle ne se développe pas autour de l'axe mais a plutôt tendance à lécher les parois de l'enceinte. En effet, la ligne de f_{st} prend naissance dans la couche de cisaillement entre l'injecteur annulaire d'air et l'injecteur central de combustible et se termine sur la paroi de l'enceinte à $x \approx 620\,mm$. Le même comportement a été observé par Lewis et Smoot (1981) dans leur expérience et a été rapporté par Smith et Smoot (1981) et McKenty (1992) dans leurs simulations numériques de ce cas test.

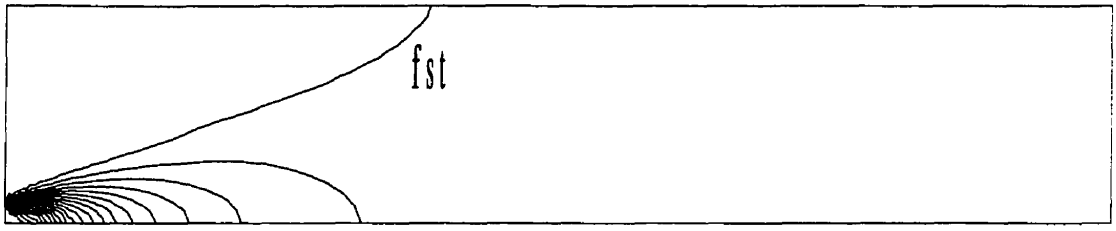


Figure 5.41: Lignes d'iso–taux de mélange dans la simulation de l'expérience de Lewis et Smoot (1981). Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 3,06).

La figure (5.42) montre la distribution radiale de taux de mélange pour les quatre modèles de combustion. Les modèles concordent en dehors de la flamme et sont presque confondus loin des jets ($x > 327\,mm$). La différence notée chez le modèle hybride peut être attribuée à l'absence de pondération. En effet, loin du front de flamme où les fluctuations sont importantes, les profils de f rejoignent ceux des trois autres modèles. Par ailleurs, le modèle de micro–flammes donne des résultats comparables et même meilleurs que ceux du modèle d'équilibre chimique, et ce malgré l'approximation sur la composition du combustible.

Tous les modèles surestiment la valeur du taux de mélange à proximité de l'entrée. Cela a pour effet de prédire une flamme plus épaisse et diffuse que la réalité. Ce phénomène n'est pas particulier à ce schéma et a été observé par Smith et Smoot (1981) et McKenty (1992). La raison de cet écart peut être imputée à l'hypothèse des nombres de Schmidt et de Prandtl égaux qui devient discutable dans la zone de mélange. La cause pourrait aussi provenir d'une mauvaise prédiction par le modèle $k - \epsilon$ du cisaillement entre les jets.

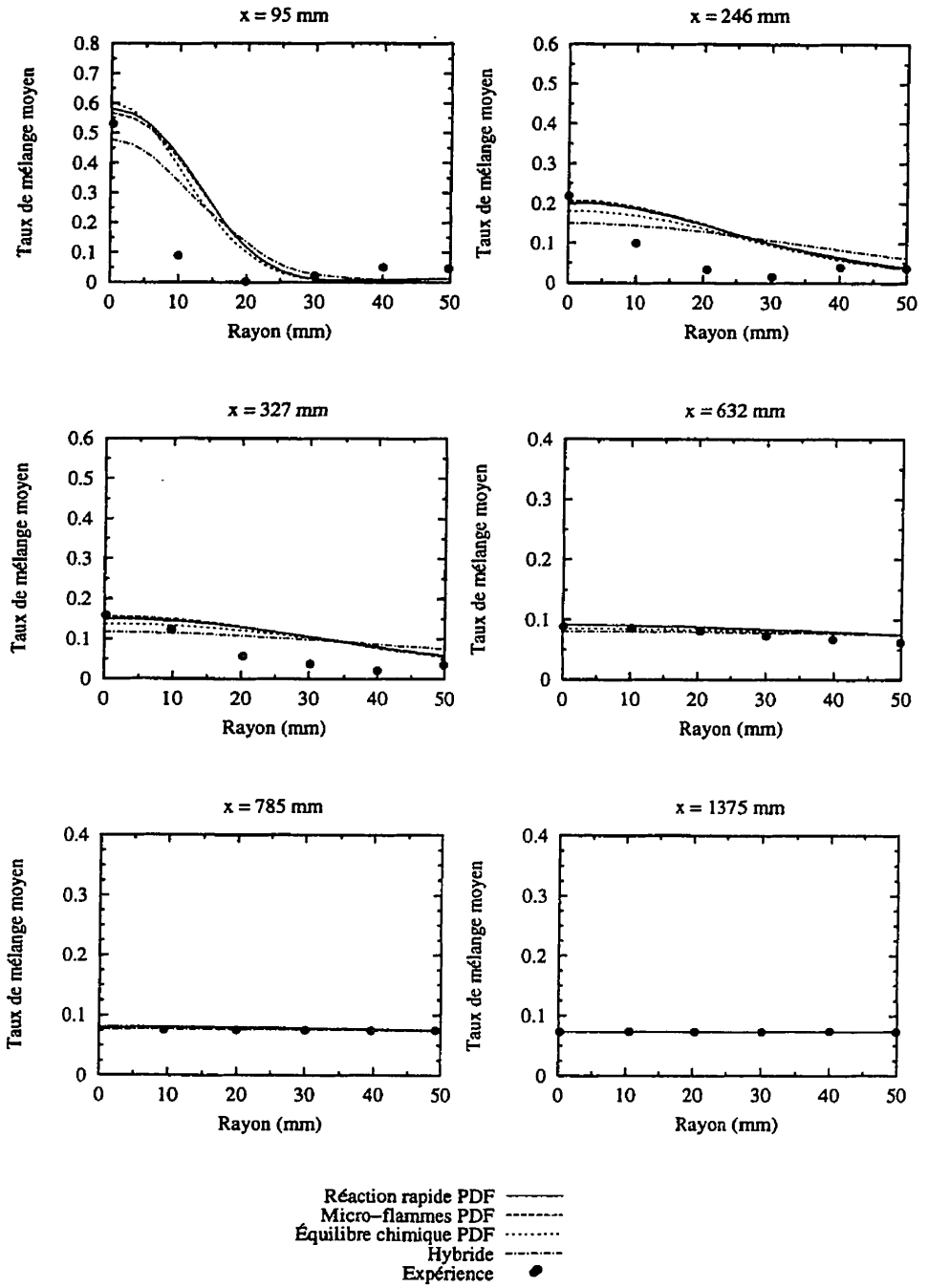


Figure 5.42: Distribution du taux de mélange à différentes stations en aval du brûleur pour quatre modèles de combustion. Expérience de Lewis et Smoot (1981).

Les figures (5.43) et (5.44) montrent les concentrations de produits dans la zone de mélange. Lewis et Smoot (1981) n'ont détecté ni H_2 ni CO dans cette région. Par contre, on remarque qu'ils ont détecté du O_2 autour de l'axe de l'enceinte dans le jet du combustible alors que nos calculs prédisent le contraire. Cette présence d'oxygène dans la zone riche nous semble problématique. En effet, la ligne f_{st} sépare la région pauvre de la région riche et il n'est pas normal d'avoir plus d'oxygène dans la région riche sauf s'il n'y a pas réaction ou si la limite d'inflammabilité n'a pas été atteinte d'autant plus que la concentration calculée de CH_4 brûlé est inférieure à celle qui a été mesurée. En outre, d'un point de vue numérique, la présence de CO_2 et de H_2O se concentre autour du front de flamme et donc de part et d'autre de la ligne f_{st} alors qu'expérimentalement on les a détecté dans la région pauvre probablement à cause de la recirculation qui ramène les gaz chauds.

Les problèmes de diffusion et du modèle de turbulence sont à l'origine d'une flamme plus touffue que la réalité. C'est pourquoi, les pics dans les profils de CO_2 et de H_2O sont pointus à l'embouchure des jets ($x = 95\,mm$) et deviennent de plus en plus étalés à la station ($x = 327\,mm$). D'ailleurs le fait de prédire une flamme plus diffuse qu'en réalité entraîne une consommation systématique de O_2 dans la zone riche ($r \leq 20\,mm$ à la figure (5.43) et $r \leq 40\,mm$ à la figure (5.44)) ce qui contribue à l'écart entre nos prédictions et les mesures expérimentales.

Par ailleurs, à la station ($x = 95\,mm$), on remarque que les profils de H_2O et CO_2 présentent des oscillations pour le cas du modèle d'équilibre chimique. Ceci est dû à la mauvaise performance du modèle dans les zones de mélange riche couplée à des problèmes de pondération. Quant au modèle hybride, ses profils se rapprochent de ceux du modèle des micro–flammes sauf qu'il prédit une flamme plus courte ce qui justifie les faibles concentrations en CH_4 et le décalage dans les courbes.

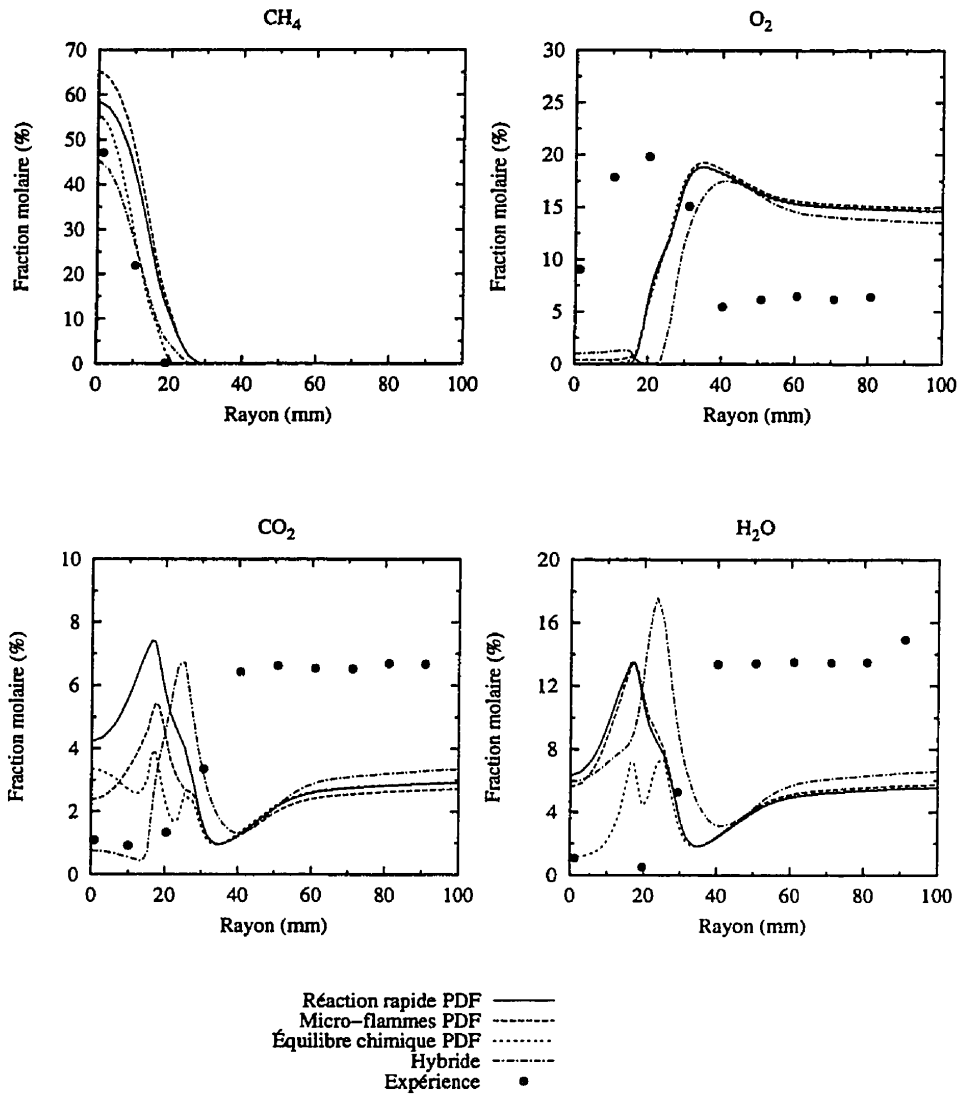


Figure 5.43: Distribution des fractions molaires des produits à la station $x = 95\,mm$ pour les quatre modèles de combustion. Expérience de Lewis et Smoot (1981).

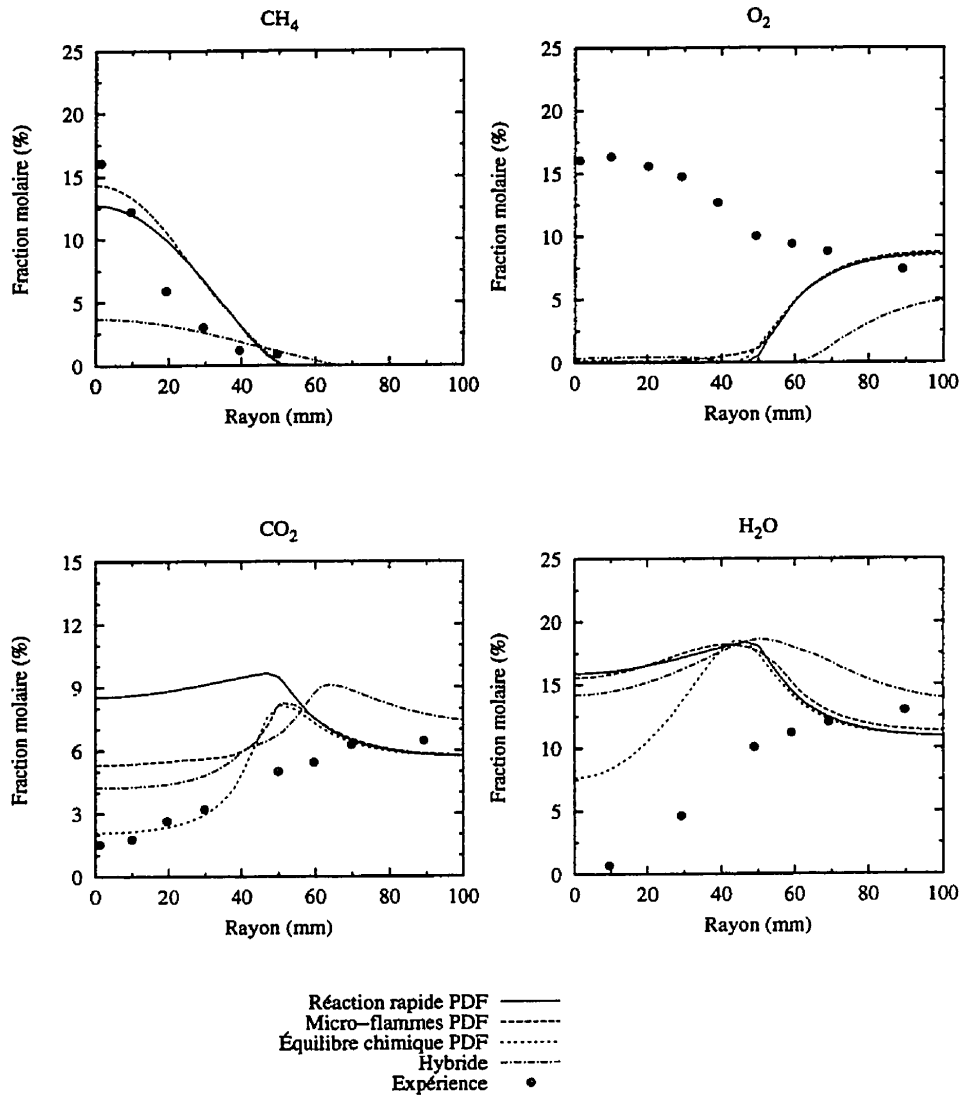


Figure 5.44: Distribution des fractions molaires des produits à la station $x = 327\,mm$ pour les quatre modèles de combustion. Expérience de Lewis et Smoot (1981).

Les figures (5.45), (5.46) et (5.47) montrent la distribution radiale des concentrations molaires des produits de combustion en aval de la zone de mélange. Dans cette région, le fluide est presque mélangé et au fur et à mesure qu'on approche de la sortie le taux de mélange devient pratiquement constant suivant le rayon.

Comme mentionné auparavant, le modèle à chimie infiniment rapide ne peut prédire le monoxyde de carbone et l'hydrogène ce qui engendre une surestimation de la concentration de CO_2. Le modèle d'équilibre chimique donne de bonnes prédictions pour l'eau mais, comme prévu, il surestime la concentration de CO et sous–estime celle de CO_2 et de H_2. Ce comportement ne résulte pas d'un mauvais calcul de l'équilibre chimique ni du phénomène de méthanation (dans ces régions le taux de mélange avoisine les 0,075). La raison réside dans le fait que l'équilibre n'est jamais physiquement atteint (d'où la sur–prédiction de CO) et que la performance du modèle d'équilibre chimique dans les régions riches n'est pas bonne. Le modèle de micro–flammes donne de très bonnes prédictions malgré l'hypothèse sur la composition du combustible. L'impact de cette approximation se voit d'ailleurs dans le profil de CH_4 qui donne les concentrations les plus élevées parmi les quatre modèles. Toutefois, ces déviations sont normales étant donnés les faibles niveaux des concentrations molaires et les erreurs attribuables aux mesures expérimentales.

En ce qui concerne le modèle hybride, il se comporte mieux dans la zone en aval de la flamme puisque les fluctuations ne sont plus importantes et donc l'impact de la pondération est moins apparent. Les profils obtenus avec ce modèle sont meilleurs que ceux de l'équilibre chimique et se comparent très bien à ceux du micro–flammes. Le modèle a été conçu pour améliorer la prédiction de CO pour un hydrocarbure quelconque et nous estimons que cet objectif a été atteint dans la mesure où les résultats sont comparables à ceux du modèle semi–empirique des micro–flammes.

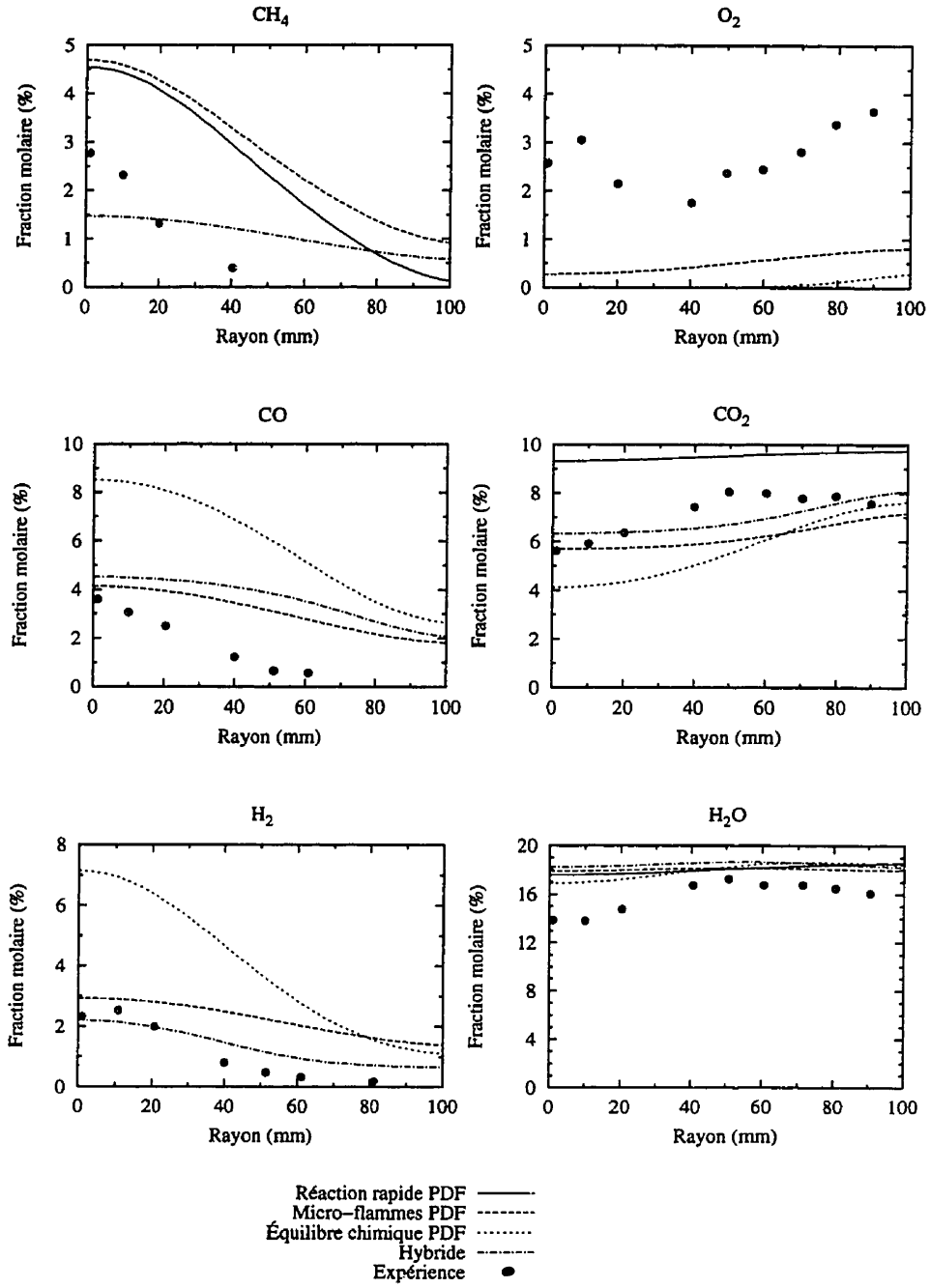


Figure 5.45: Distribution des fractions molaires des produits à la station $x = 632\,mm$ pour les quatre modèles de combustion. Expérience de Lewis et Smoot (1981).

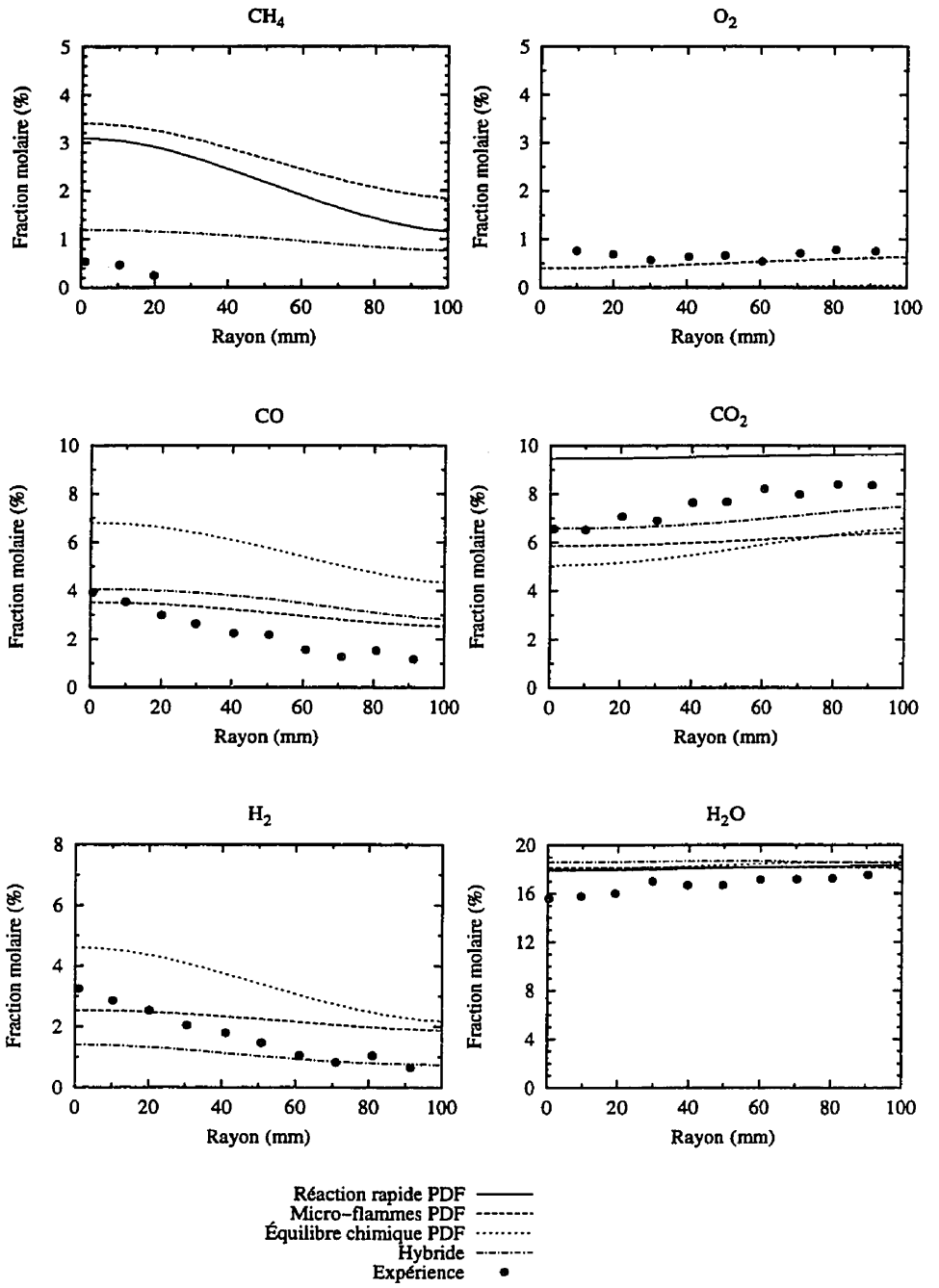


Figure 5.46: Distribution des fractions molaires des produits à la station $x = 785\,mm$ pour les quatre modèles de combustion. Expérience de Lewis et Smoot (1981).

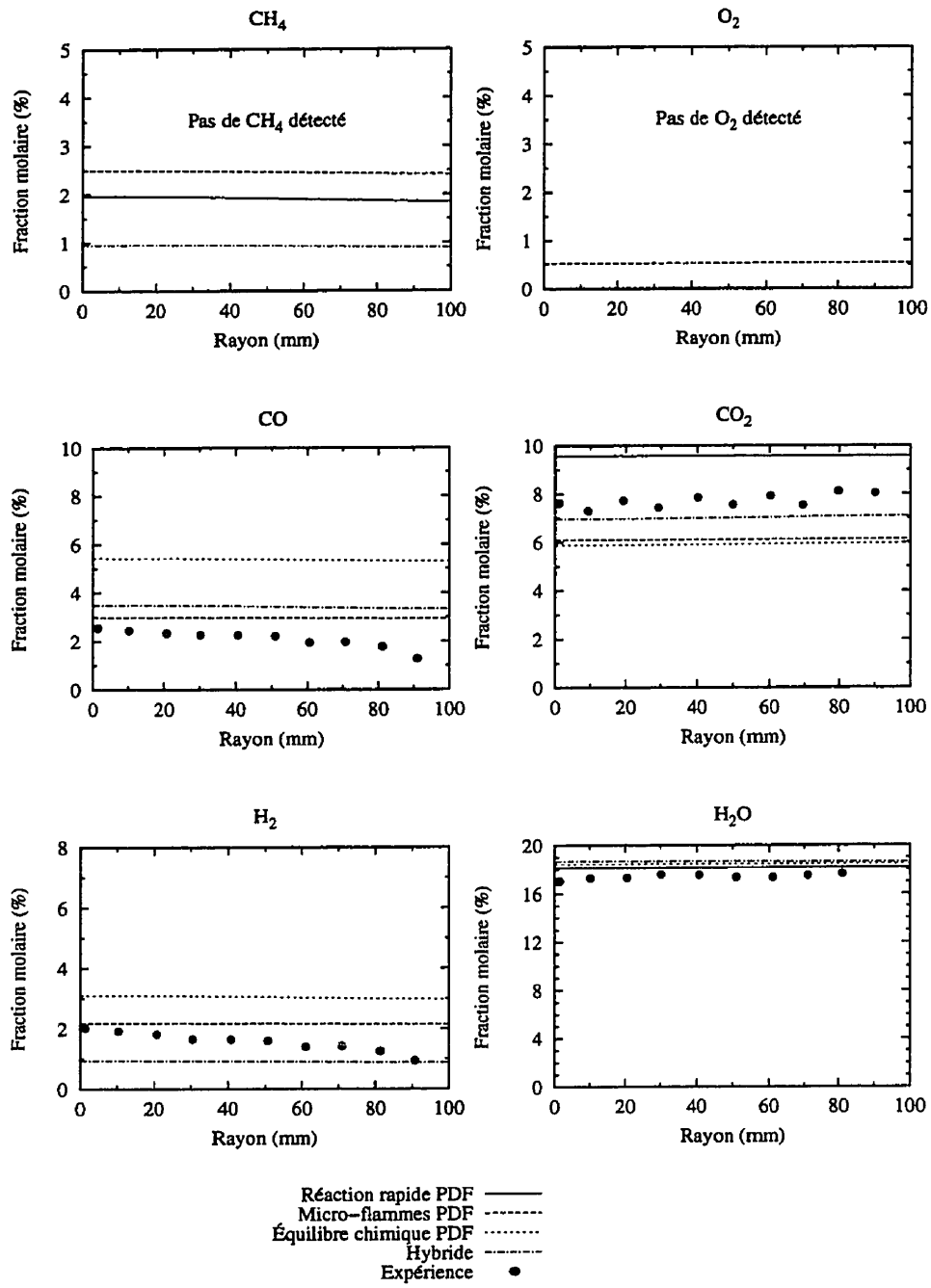


Figure 5.47: Distribution des fractions molaires des produits de la réaction à la station $x = 1375\,mm$ pour les quatre modèles de combustion. Expérience de Lewis et Smoot (1981).

5.5 Combusteur industriel aux parois non–adiabatiques

Pour cet essai nous avons choisi de simuler les expériences de Perrin et al. (1995) telles que rapportées par Perrin et al. (1996). Il s'agit d'expériences effectuées dans le combusteur expérimental du CERSTA (500kW) par la division R&D de Gaz de France. Ce combusteur est axisymétrique avec des parois supérieure et de sortie qui sont refroidies par une circuiterie d'eau afin de maintenir leur température moyenne à 1273 K, les autres parois étant adiabatiques (figure (5.48)). Nous avons simulé la flamme No. 1 qui est une flamme de diffusion de méthane sans *swirl*. Le combustible est injecté au centre avec un débit de $44,3\,m^3/h$ tandis que l'air pénètre par l'injecteur annulaire avec un débit de $644\,m^3/h$. Les températures d'entrée des deux réactifs est de 293 K.

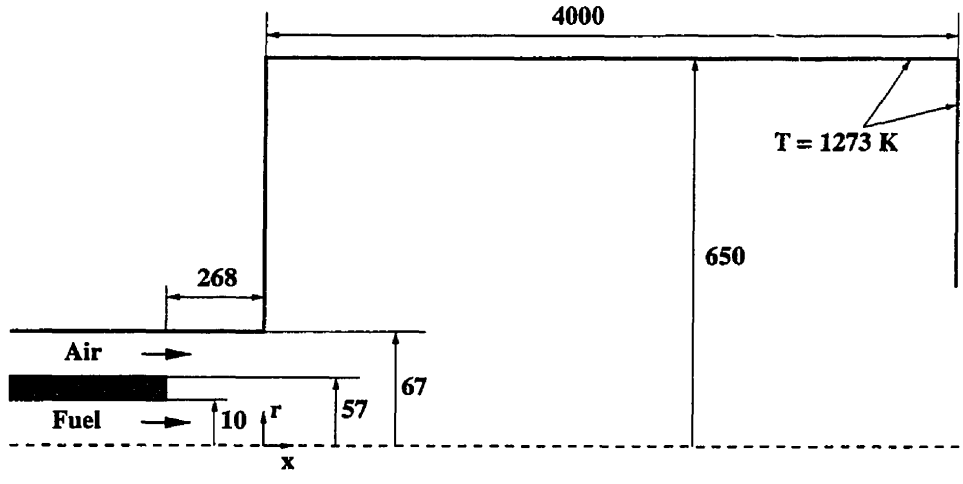


Figure 5.48: Combusteur industriel axisymétrique aux parois non–adiabatiques de Perrin et al. (1995). Distances en mm.

5.5.1 Étude paramétrique

Une étude paramétrique a été réalisée pour déterminer l'influence du maillage, de l'intensité de turbulence et de la distance à la paroi sur la qualité des résultats. Les calculs ont été effectués avec le modèle de micro–flammes étant donnée une performance bien établie dans le cas du méthane pur.

Les simulations ont été réalisées avec le code VF par Lacroix (1998). L'étude du maillage a été effectuée sur six maillages non structurés avec un rapport $h_1/h_6 = 1,7$ où h représente la taille moyenne des éléments du maillage. Du Maillage 1 (5380 éléments) au Maillage 6 (14200 éléments), un raffinement global a été effectué en réduisant uniformément la taille des éléments dans tout le domaine. Les calculs ont montré qu'à partir du Maillage 4 (10770 éléments) la solution ne dépendait plus du maillage. Par conséquent, les résultats présentés seront basés sur le Maillage 4 mais pour plus de clarté nous présentons à la figure (5.49) le Maillage 1 qui a été comprimé dans la direction axiale.

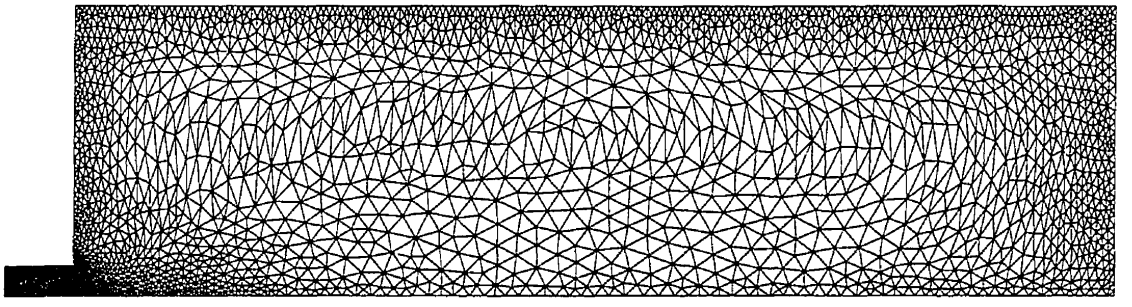


Figure 5.49: Type de maillage utilisé dans la simulation de l'expérience de Perrin et al. (1995). Image comprimée suivant la direction axiale (rapport d'échelle: 1,77).

Les valeurs de k et de ϵ à l'entrée peuvent dans certains cas influencer la solution. Ces valeurs sont données par les expressions suivantes:

$$k_{in} = \lambda \tilde{U}_{in}^2 \qquad\qquad \epsilon_{in} = C_\mu \frac{k_{in}^{3/2}}{\alpha\, D_H} \tag{5.3}$$

Pour étudier la sensibilité de l'écoulement à l'intensité de turbulence, des simulations ont été effectuées avec λ variant de 0,005 à 0,09 puis avec α variant de 0,0075 à 0,09. Pour tous ces cas, l'écoulement n'a pas été affecté par ces variations étant donné le niveau de turbulence relativement élevé généré dans l'ouvreau. Dès lors, les simulations ont été réalisées avec les valeurs communément utilisées, à savoir $\lambda = 0,005$ et $\alpha = 0,03$ (Lacroix (1998)).

Par ailleurs, la loi de paroi peut aussi influencer les vitesses de l'écoulement si la distance à la paroi y_P n'est pas choisie de manière à garder le y^+ dans la zone logarithmique ($30 < y^+ < 100$). À cet effet, les distances à la paroi ont été ajustées de manière à satisfaire cette contrainte sur toutes les frontières solides. Typiquement, ces valeurs variaient de 0,8 à 5 mm dépendant de la nature de l'écoulement au voisinage de la frontière (stagnation, recirculation, jets, ...).

Une fois encore, cet ajustement des y_P n'a pas eu d'impact significatif sur la solution. En effet, la structure de l'écoulement est complètement conditionnée par la forme qu'il prend dans l'ouvreau. C'est pourquoi le maillage a été raffiné dans cette zone de mélange à haut nombre de Reynolds où les gradients de pression, de vitesse, de k et de ϵ sont forts (figure 5.50). L'écoulement subit donc de grandes perturbations et de forts cisaillements dans cette région d'entrée et la paroi ne peut y influencer l'écoulement que si des valeurs aberrantes sont assignées à y_P.

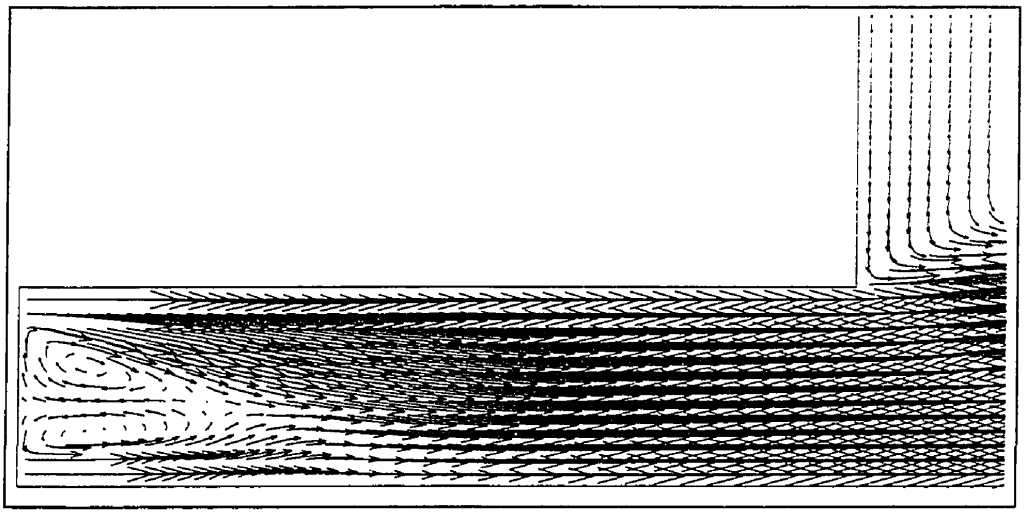


Figure 5.50: Combusteur aux parois non–adiabatiques: champs des vecteurs de vitesse dans l'ouvreau.

5.5.2 Problème de lissage

Dans le cas d'écoulements turbulents *a fortiori* avec réaction chimique, l'équation de transport de l'énergie cinétique de turbulence k est régie principalement par les termes de production P_k et de dissipation ϵ. Ces termes s'expriment en fonction de grandeurs de l'écoulement moyen. En particulier, le terme de production est basé sur la double contraction du tenseur des déformations $\widetilde{\widetilde{\mathbf{D}}}$, c'est–à–dire sur les gradients de vitesse de $\tilde{u}$ et de $\tilde{v}$.

Une évaluation adéquate de ces gradients est déterminante pour la bonne prédiction des champs de k et de ϵ qui constituent la plaque tournante en combustion. En effet, l'énergie cinétique de turbulence et sa dissipation interviennent dans toutes les équations de transport à travers μ_t mais aussi dans le taux de réaction R_{fu}^{EBM} ainsi que dans l'équation de g qui conditionne tout le calcul de la pondération.

Nous avons remarqué que la manière de discrétiser et de calculer les gradients de vitesse dans le terme de production P_k influençait énormément l'écoulement en terme d'accélération, de génération de turbulence et de longueur de flamme. L'évaluation numérique de ces gradients se fait par le biais d'une interpolation linéaire au sein d'un triangle (figure (5.51)).

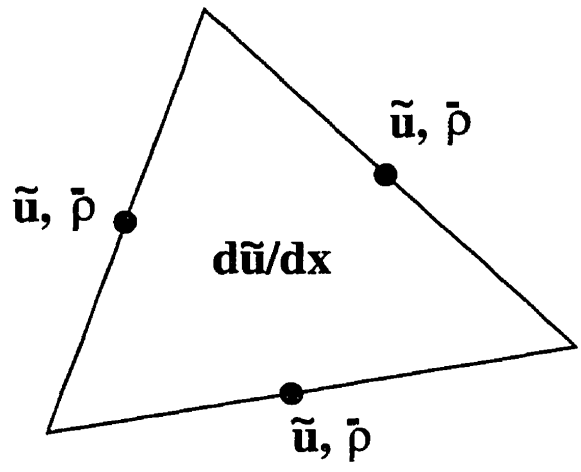


Figure 5.51: Discrétisation de la dérivée suivant x de la vitesse $\tilde{u}$.

Par exemple, pour calculer le gradient de la vitesse $\tilde{u}$ suivant la direction axiale, la manière la plus directe serait d'utiliser les valeurs des vitesses définies aux milieux des trois côtés du triangle. Nous avons aussi exploré d'autres avenues où nous utilisons $\bar{\rho}\tilde{u}$ ou $\bar{\rho}^2\tilde{u}$ à la place de $\tilde{u}$ pour calculer $d\tilde{u}/dx$. La discrétisation se fait comme suit:

$$\begin{aligned}
\tilde{u} = a_0 x + b_0 y + c_0 \quad &\rightarrow \quad (d\tilde{u}/dx)_{\text{élément}} = a_0 \\
\bar{\rho}\tilde{u} = a_1 x + b_1 y + c_1 \quad &\rightarrow \quad (d\tilde{u}/dx)_{\text{élément}} = a_1/\bar{\rho}_{\text{élément}} \\
\bar{\rho}^2\tilde{u} = a_2 x + b_2 y + c_2 \quad &\rightarrow \quad (d\tilde{u}/dx)_{\text{élément}} = a_2/\bar{\rho}^2_{\text{élément}}
\end{aligned} \tag{5.4}$$

La densité étant variable, cet artifice numérique constitue un lissage des gradients de vitesse par la densité qui met en relief l'importance de la variation de la densité sur l'écoulement en général et sur la turbulence en particulier. Dans ce qui suit, nous allons référer à l'absence de lissage par L_0, au simple lissage avec $\bar{\rho}$ par L_1 et au double lissage avec $\bar{\rho}^2$ par L_2.

La figure (5.52) montre les profils sur l'axe de la température et des fractions molaires de CO et de CO_2 obtenus avec les trois formes d'interpolation en utilisant le modèle de micro–flammes avec pondération. Avec la forme L_0, la flamme est trop longue ce qui perturbe complètement les profils de CO et de CO_2. En passant à la forme L_1, les profils s'améliorent mais pas autant qu'avec la forme L_2 où nous sommes beaucoup plus proches des mesures expérimentales.

La figure (5.53) présente les profils de température radiaux à différentes stations en aval de l'ouvreau. Il est clair que la forme L_2 donne les meilleures prédictions puisque les résultats obtenus avec les formes L_1 et L_0 accusent de grands écarts avec les mesures particulièrement au niveau de l'axe où se situe la zone de mélange. Toutefois, même loin de cette région critique (station $x = 2385\,mm$), les profils de température obtenus avec L_0 et L_1 surestiment toujours la température et ce, à cause de la longueur de la flamme qui décale les pics de température plus au centre de la chambre de combustion et diminue l'effet du refroidissement pariétal.

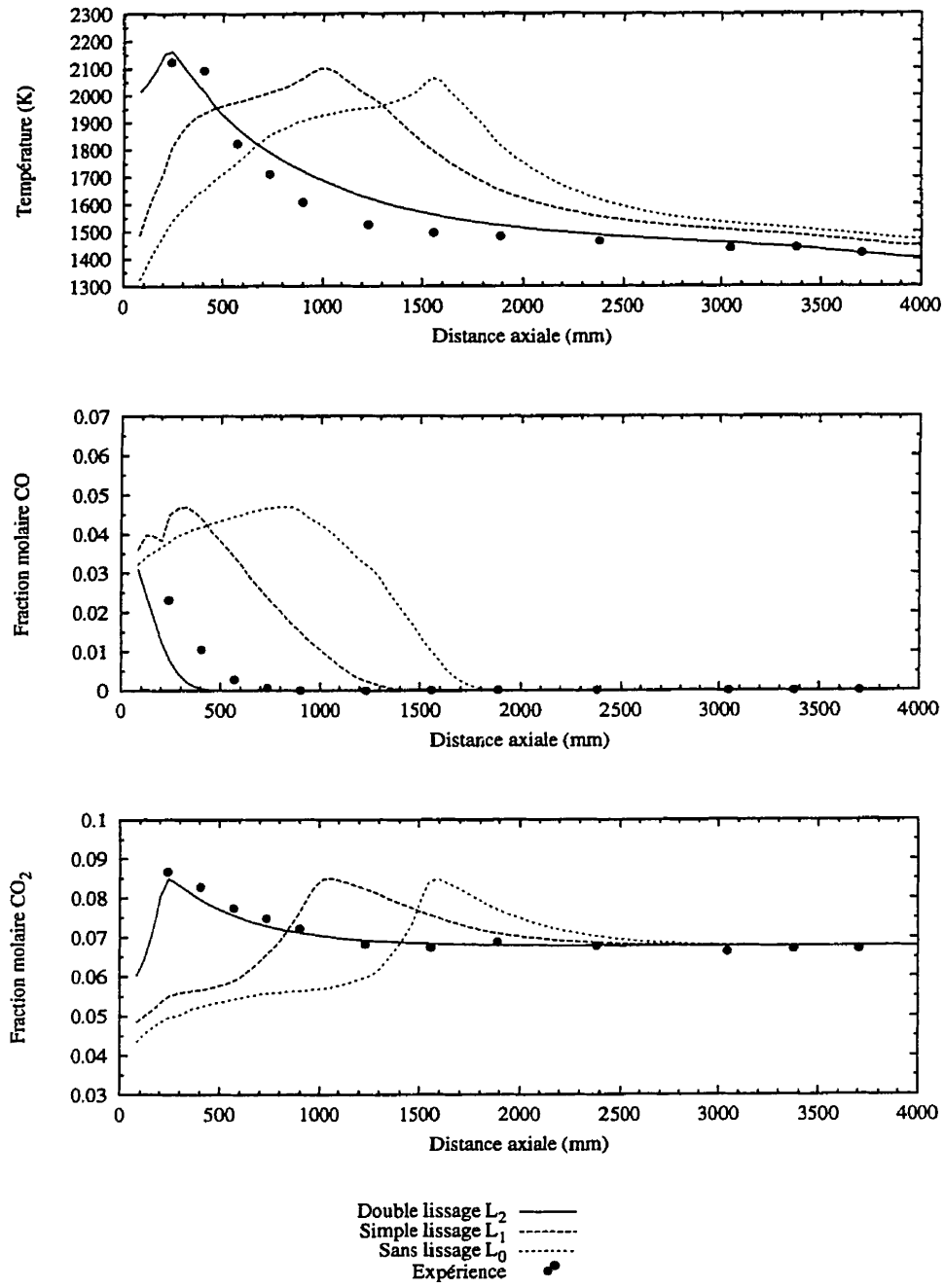


Figure 5.52: Distribution de la température et des fractions molaires de CO et de CO_2 sur l'axe de symétrie du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaison des trois formes de lissage en utilisant le modèle de micro-flammes avec PDF.

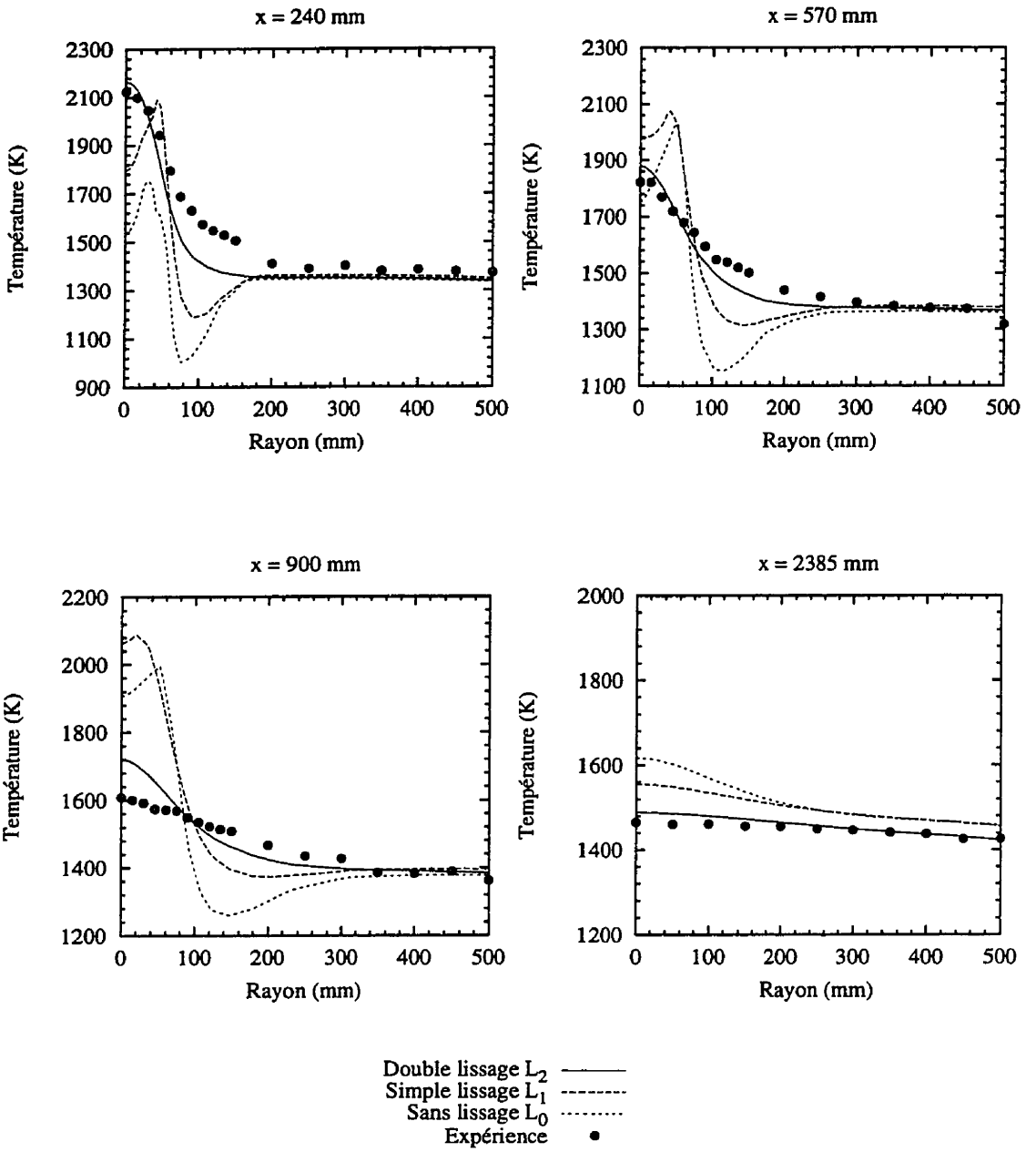


Figure 5.53: Distribution radiale de la température à différentes stations du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaisons des trois formes de lissage en utilisant le modèle de micro–flammes avec PDF.

Nous avons vu que le lissage permettait de corriger les profils de température et implicitement ceux du taux de mélange et des concentrations des produits. Comment cela se produit-il? Il est clair que la production et la dissipation de turbulence sont à l'origine de ces changements. La figure (5.54) montre les profils de l'énergie cinétique de turbulence sur l'axe pour les trois formes de lissage. La forme L_2 présente un pic de k qui atteint les $700\,m^2/s^2$ à $x \approx 50\,mm$. Ce pic entraîne une accélération de l'écoulement et des variations de la densité qui favorisent la réaction et contribuent à raccourcir la flamme. On observe aussi des pics de k à l'intérieur de l'ouvreau pour la forme L_1 ($83\,m^2/s^2$ à $x \approx -160\,mm$) et la forme L_0 ($44\,m^2/s^2$ à $x \approx -150\,mm$). Toutefois, les niveaux de turbulence avec L_1 et L_0 ne sont pas assez élevés pour favoriser la réaction à proximité des injecteurs ce qui explique les longues flammes obtenues. Perrin et al. (1995) n'ont pas réalisé de mesures à l'intérieur de l'ouvreau mais nous pouvons prévoir que les niveaux de la production d'énergie de turbulence y sont aussi intenses que les prédictions de la forme L_2.

Il existe une différence notable entre les trois profils de vitesse dans la zone de mélange mais ces écarts s'estompent au fur et à mesure qu'on approche de la sortie de la chambre de combustion. Les trois profils de vitesse présentent des accélérations causées par la dilatation des gaz mais celles–ci diffèrent en intensité. Pour les formes L_1 et L_0, les pics de température sont décalés vers le centre de la chambre de combustion (figure (5.52)). C'est donc à ces endroits que la plus forte accélération a lieu et comme la flamme est diffuse, cette accélération s'étend sur une plus grande région et contribue à l'écart observé entre les vitesses mesurées et celles obtenues avec les formes L_1 et L_0. Quant à la forme L_2, on observe une flamme plus courte avec une forte accélération concentrée à l'embouchure de l'ouvreau. Mais, comme la flamme prédite est plus touffue qu'en réalité et les phénomènes de convection–diffusion sont propices, la

dilatation se diffuse le long de l'axe et les vitesses demeurent élevées creusant l'écart avec les mesures expérimentales jusqu'à la sortie de la chambre de combustion.

Il faut cependant noter que cette surestimation de la vitesse se limite à la région de l'axe de symétrie. En effet, d'après la figure (5.55) où sont présentées les distributions radiales de la vitesse u, il devient clair qu'en dehors de la zone de mélanges ($r > 100$ mm) les trois profils sont confondus et coïncident avec les mesures expérimentales. On peut aussi confirmer avec cette figure que la flamme est plus diffuse qu'en réalité puisque dans les régions où les formes L_0 et L_1 présentent des pics de température, la concordance des vitesses prédites avec les mesures n'a lieu qu'à partir de $r \approx 200mm$.

Par ailleurs, un autre paramètre qui influence l'écoulement mais dont on a négligé les variations dans cet essai est la pression. Dans un brûleur industriel, les variations de pression sont assez importantes dans l'ouvreau. Or, faute de données expérimentales, nous avons supposé une pression atmosphérique constante dans tout le domaine de calcul. Cette hypothèse a certainement un impact sur l'équation d'état puisque les variations de la pression affectent directement les champs de densité et de température. Toutefois, si on tient compte de ces variations, il ne sera plus possible de pondérer les résultats à cause du caractère bimodal que revêtirait la fonction de densité de probabilité $\widetilde{P}(f, P)$.

Nous constatons qu'il est très difficile de concilier les profils de température et de vitesse car celles-ci évoluent dans des sens opposés en fonction du lissage. Toutefois, comme l'objectif principal est de déterminer la longueur de la flamme et les concentrations des produits, il semble que la forme L_2 soit la plus adéquate et elle sera donc utilisée par la suite.

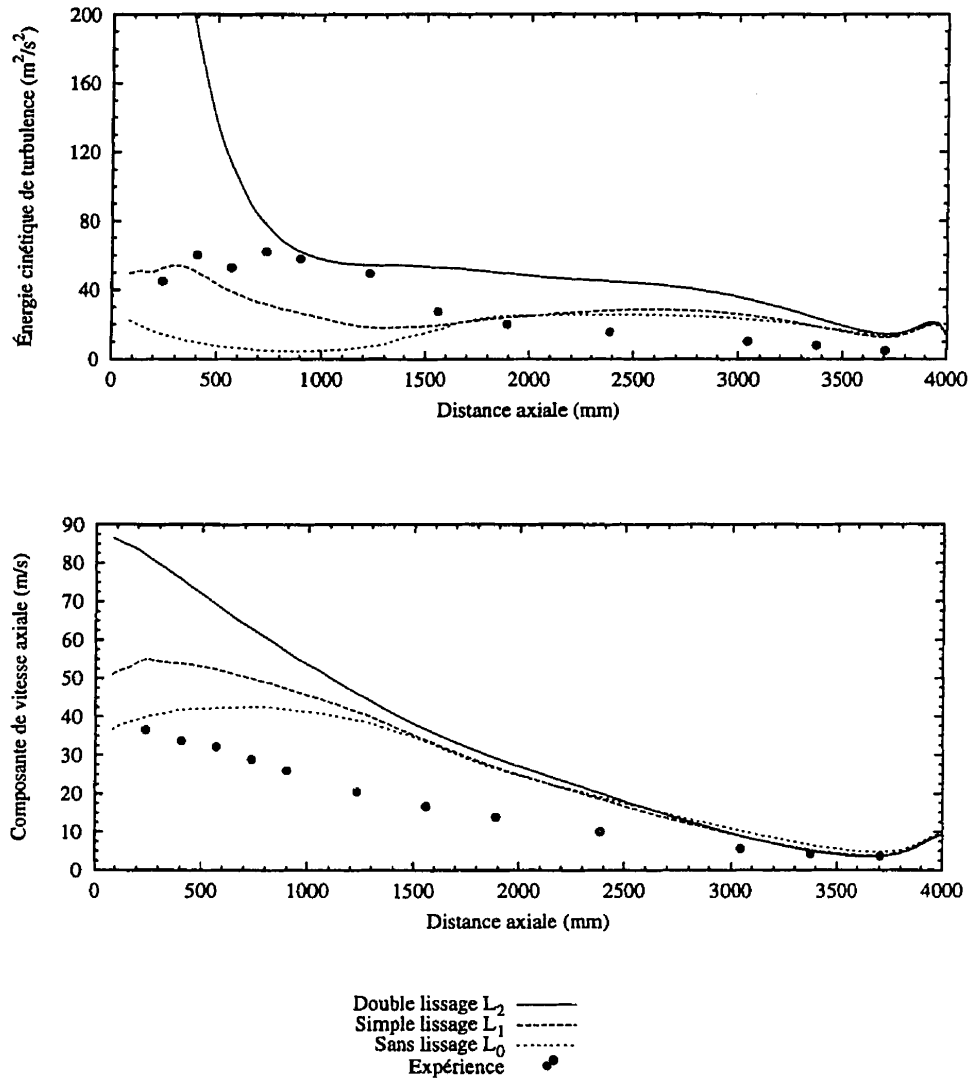


Figure 5.54: Distribution de l'énergie cinétique de turbulence et de la vitesse axiale sur l'axe de symétrie du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaison des trois techniques de lissage en utilisant le modèle de micro–flammes avec PDF.

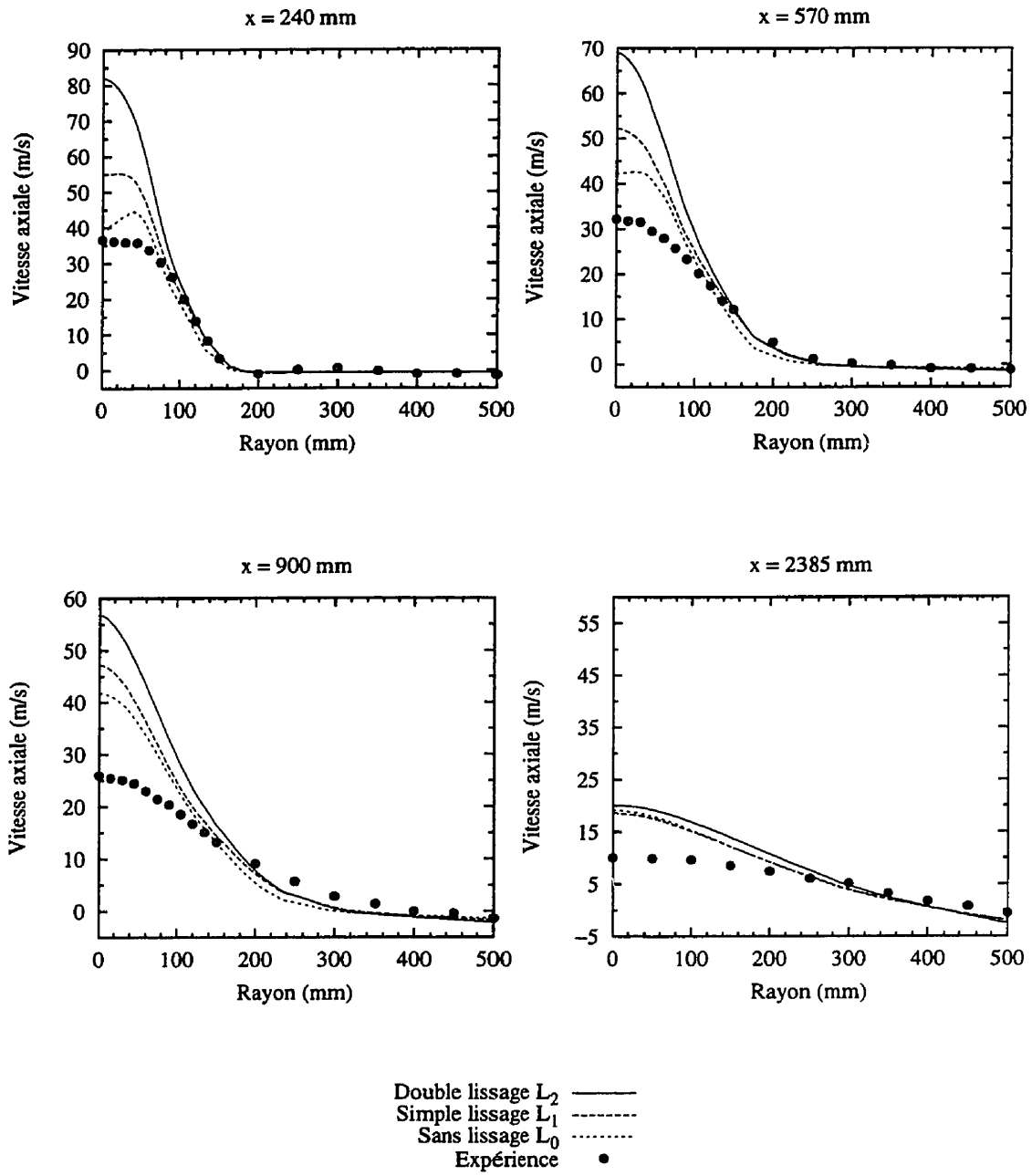


Figure 5.55: Distribution radiale de la vitesse u à différentes stations du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaisons des trois formes de lissage en utilisant le modèle de micro–flammes avec PDF.

5.5.3 Loi de paroi et transfert de chaleur

Une étude comparative a été effectuée entre les prédictions basées sur la loi à deux échelles de vitesse et celle obtenues avec la loi au profil universel. Ceci nous a permis de valider les deux lois de parois dans le cas de transfert de chaleur pariétal. Les calculs ont été effectués avec le modèle de micro–flammes avec pondération en utilisant la forme L_2.

Les figures (5.56) et (5.57) montrent que la loi de paroi au profil universel sous–estime le transfert de chaleur pariétal ce qui limite l'évacuation de chaleur et entraîne une augmentation de la température proche des parois et de la sortie. Par contre, les profils obtenus avec la loi de paroi à deux échelles de vitesse concordent avec les mesures expérimentales dans ces régions. Dans la zone de mélange où la turbulence est élevée, l'effet de la paroi est négligeable et les profils de température des deux lois sont identiques.

La mauvaise performance de la loi de paroi au profil universel réside dans le fait que proche de la paroi les vitesses sont parfois faibles ce qui réduit la vitesse de friction et diminue par la même occasion le flux de chaleur. Ce dernier peut même devenir nul quand le taux de cisaillement vient à s'annuler au voisinage d'un point de stagnation ce qui est contraire aux observations expérimentales qui préconisent plutôt un flux maximal dans cette région (Ignat et al. (1996)). Les profils de température obtenus avec la loi à deux échelles de vitesse sont donc meilleurs parce que la vitesse de friction qui est basée sur l'énergie cinétique de turbulence demeure non nulle aux points de rattachement.

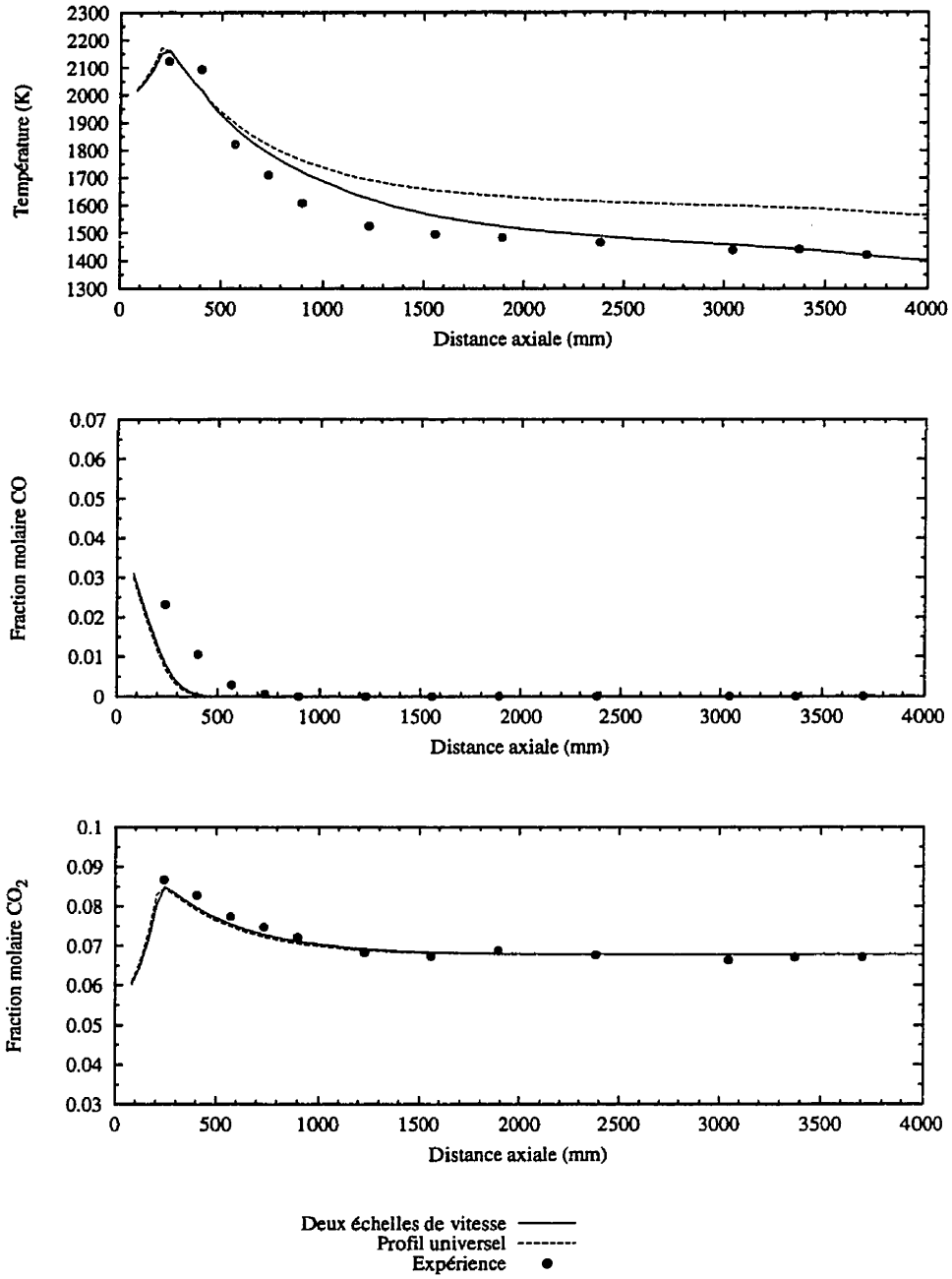


Figure 5.56: Distribution de la température et des fractions molaires de CO et de CO_2 sur l'axe de symétrie du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaison des deux lois de parois en utilisant le modèle de micro–flammes avec PDF.

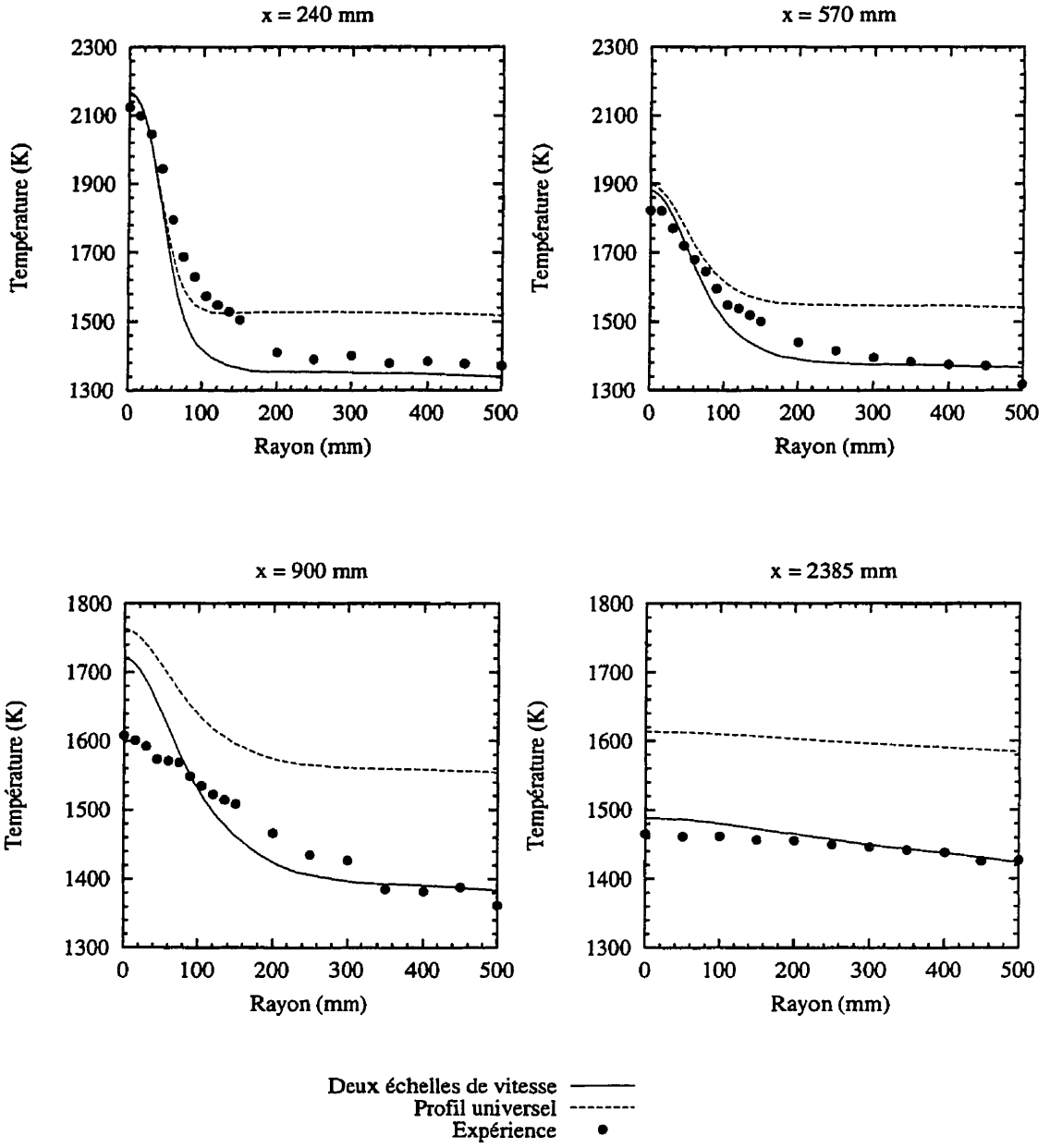


Figure 5.57: Distribution radiale de la température à différentes stations du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaisons des deux lois de parois en utilisant le modèle de micro–flammes avec PDF.

5.5.4 Comparaison des modèles de combustion

La figure (5.58) présente le profil de température le long de l'axe de la chambre de combustion. Nous constatons que pour les trois modèles pondérés le pic de température est décalé d'environ 150 mm en amont (le pic devrait se situer entre les deux premiers points expérimentaux) et que la flamme devient plus diffuse à la sortie de l'ouvreau. En effet, dans la zone de mélange ($x < 1500\,mm$), les effets de la turbulence sont prépondérants et l'écoulement est conditionné par la forme qu'il prend à la sortie de l'ouvreau en terme d'accélération et de variation de densité. Il est donc très difficile de prédire le bon taux de mélange et les distributions de température en aval du *bluff–body*. D'ailleurs, on remarque que loin de la zone de mélange les températures concordent parfaitement avec les mesures de Perrin et al. (1995) et ce, pour les quatre modèles étudiés (figure (5.59)).

L'écart dans le profil de température a causé un décalage dans le profil du CO et donc une légère variation dans le profil de CO_2. Toutefois, on remarque que les modèles sont fidèles à leurs tendances. Le modèle à chimie infiniment rapide surestime le CO_2 et ignore le CO ce qui lui confère le pic de température le plus haut. Dans le cas du modèle d'équilibre chimique on assiste à une évidente sur–prédiction de CO. Quant au modèle de micro–flammes, il reste à l'avant garde avec relativement les meilleurs prédictions.

En ce qui concerne le modèle hybride, il devient clair que sans pondération le modèle n'est pas capable de donner de bonnes prédictions. Dans la région de l'ouvreau les fluctuations sont très importantes et le modèle tend manifestement à sous–estimer la longueur de flamme avec toutes les conséquences que cela peut avoir sur la prédiction des concentrations.

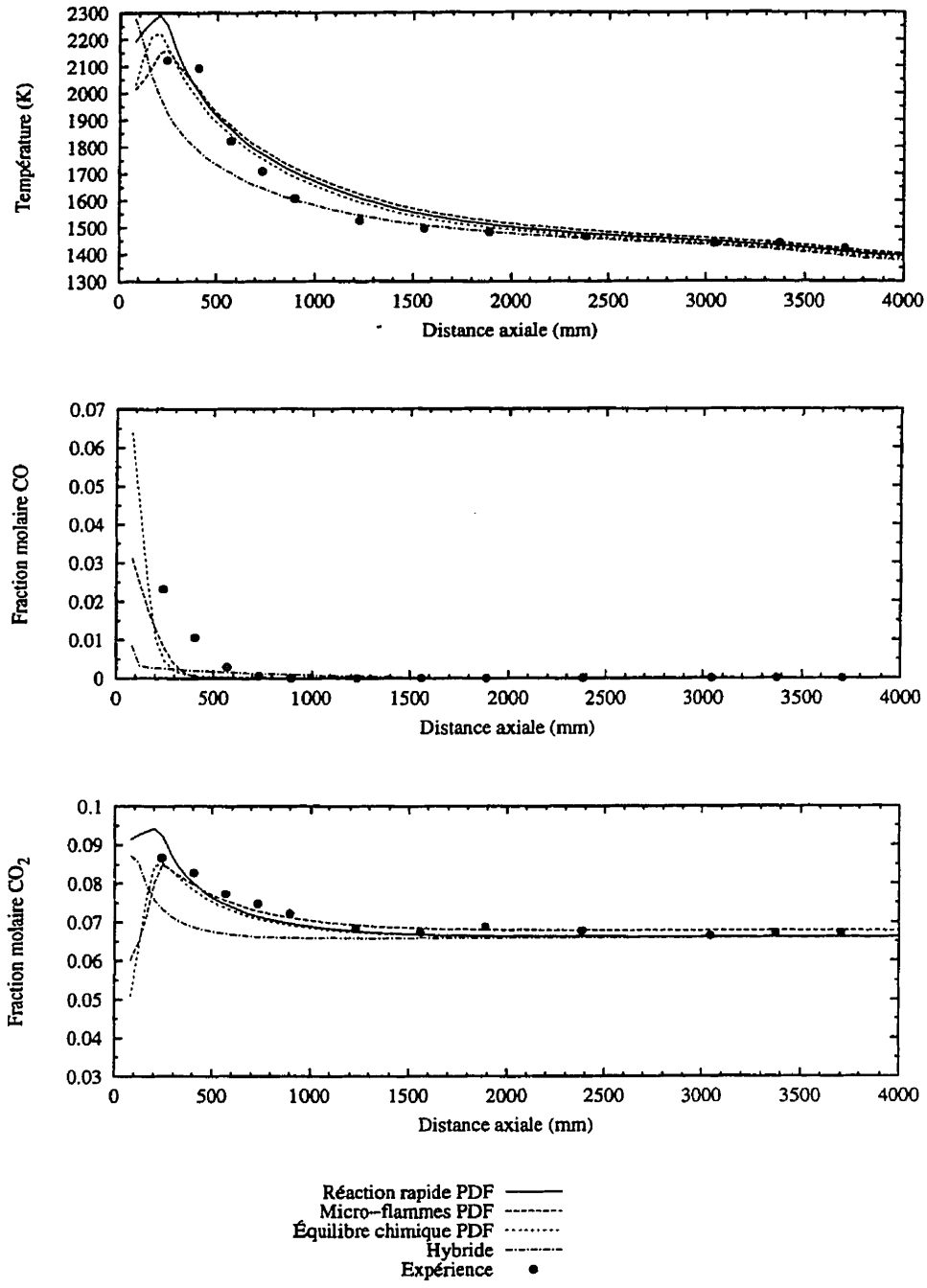


Figure 5.58: Distribution de la température et des fractions molaires de CO et CO_2 sur l'axe de symétrie du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaison des quatre modèles de combustion.

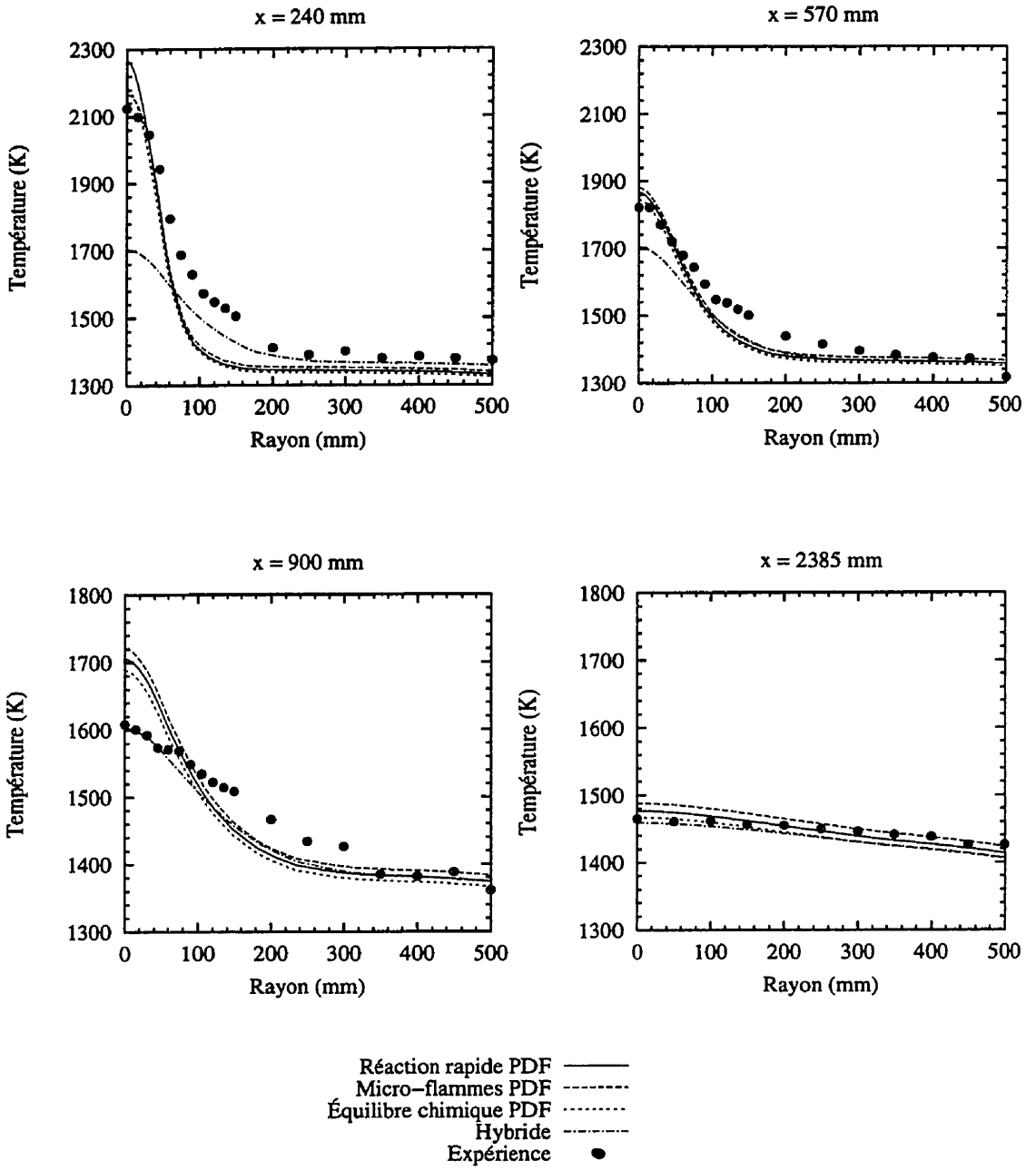


Figure 5.59: Distribution radiale de la température à différentes stations du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaisons des quatre modèles de combustion.

L'importance de la pondération sur le modèle hybride se fait aussi sentir au niveau des profils radiaux de température (figure (5.59)). On remarque toutefois, que loin de la zone des fluctuations (station $x = 2385\,mm$), le modèle hybride donne d'excellentes prédictions. Si on est intéressé uniquement par le niveau des polluants à la sortie de la chambre de combustion, le modèle hybride est capable de les prédire.

Les résultats du modèle hybride n'indiquent pas une déficience du modèle. En effet, sa performance relatée dans ce cas test est très conditionnée par la pondération et cela est aussi valable pour les autres modèles. D'ailleurs, les figures (5.60) et (5.61) montrent que le modèle de micro–flammes sans pondération donne presque les mêmes résultats que ceux du modèle hybride. Cette comparaison suggère qu'avec le recours à la pondération pour le modèle hybride, les résultats pourraient être du calibre de ceux obtenus avec le modèle de micro–flammes avec PDF, du moins pour les flammes de méthane.

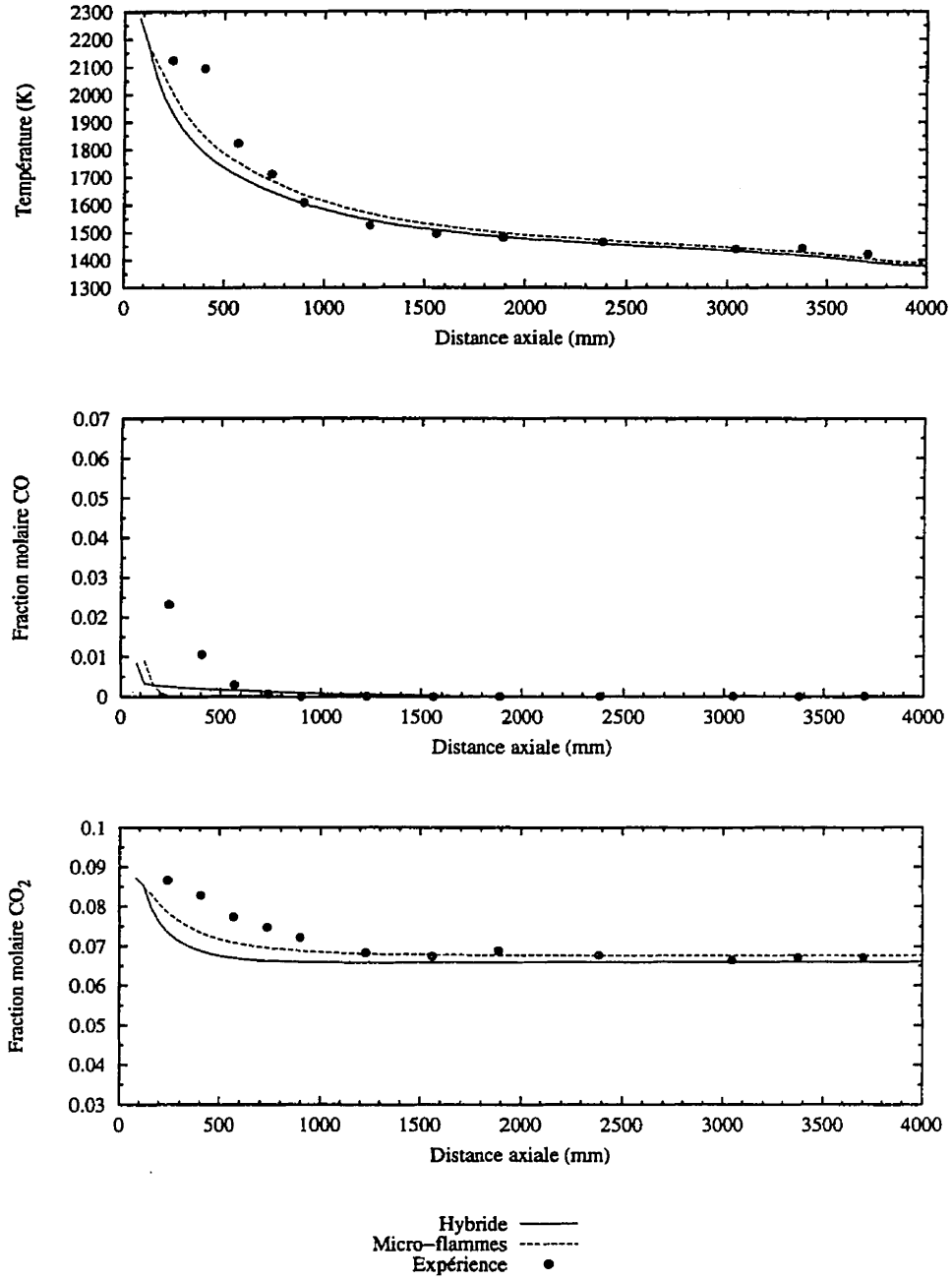


Figure 5.60: Distribution de la température et des fractions molaires de CO et CO_2 sur l'axe de symétrie du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaisons des modèles hybride et de micro–flammes sans PDF.

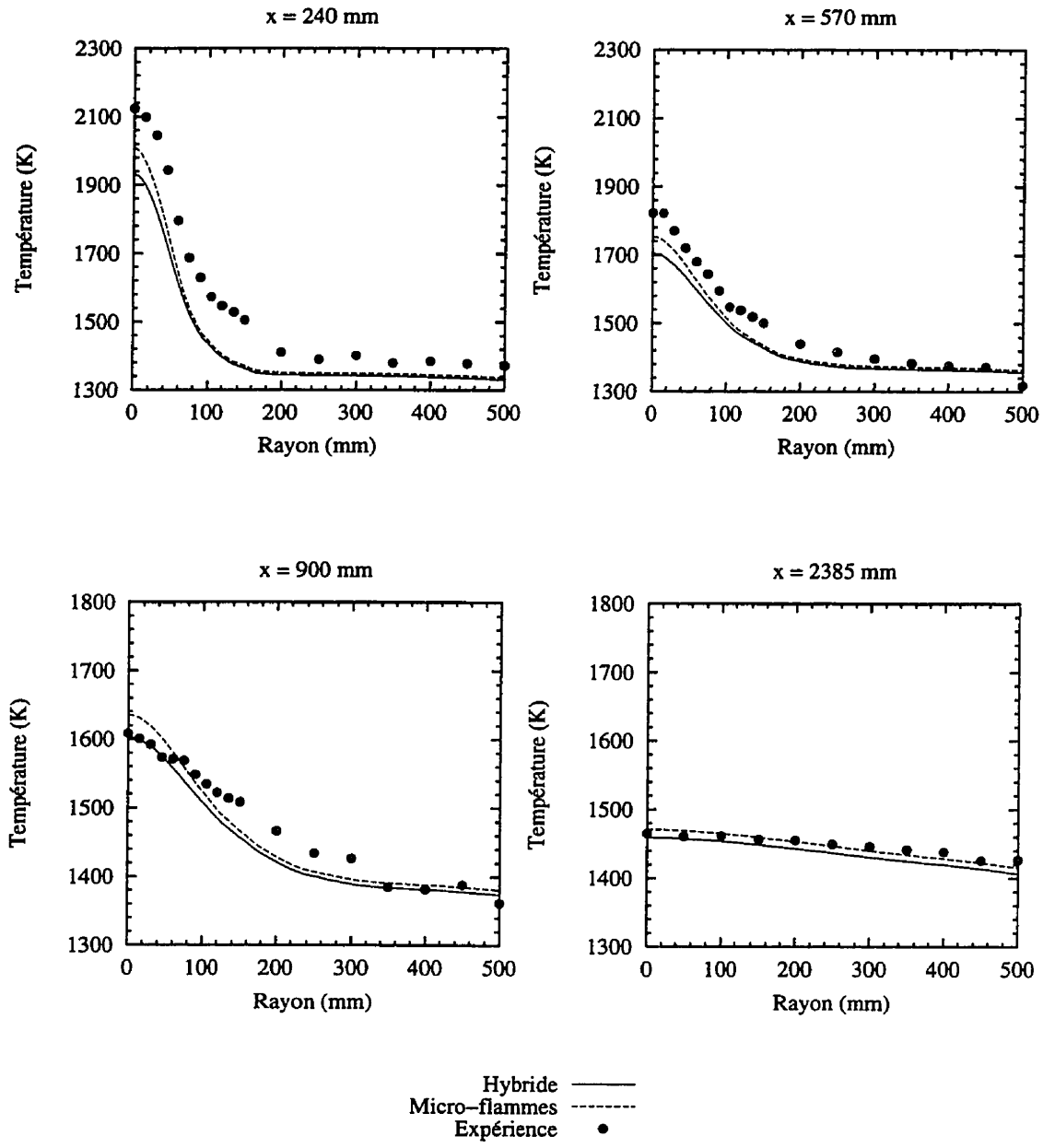


Figure 5.61: Distribution radiale de la température à différentes stations du combusteur de Perrin et al. (1995). Comparaisons des modèles hybride et de micro–flammes sans PDF.

5.6 Conclusion

Après cette campagne de validations du schéma numérique et de la librairie CMBLIB étendue, nous sommes arrivés aux conclusions suivantes. La prédiction des écoulements turbulents réactifs a été dans l'ensemble satisfaisante et assez fiable. Tant qu'il s'agit de flammes de diffusion laminaires, il est possible de classer les modèles de combustion, en commençant par le plus précis, comme suit:

- modèle de micro–flammes;
- modèle hybride;
- modèle d'équilibre chimique;
- modèle à chimie infiniment rapide.

Toutefois, lorsqu'on passe à la simulation d'écoulements turbulents réactifs, l'interaction de la turbulence avec la combustion est tellement forte qu'une erreur de prédiction des phénomènes de turbulence peut avoir des conséquences fâcheuses sur l'aspect thermochimique de la combustion. Il faut donc s'assurer de bien évaluer la production et la dissipation de la turbulence et de tenir compte de son caractère intermittent à travers la pondération par fonctions de densité de probabilité. C'est précisément à ce niveau que le modèle hybride présente des lacunes puisque sa fonction de densité de probablité bimodale est inconnue.

En rétrospective, Le modèle à chimie infiniment rapide demeure le modèle le plus économique pour ébaucher presque tous les problèmes. Si on s'intéresse à la prédiction d'autres espèces que le CO_2 et le H_2O, il faut recourir au modèle d'équilibre chimique. Toutefois, ce dernier présente des déficiences quand le mélange est riche et a tendance à surestimer la concentration de CO. Le modèle hybride a été développé pour pallier ces lacunes mais ne peut être pondéré actuellement. Enfin, le modèle de micro–flammes

demeure à l'avant garde des quatre modèles tant qu'on se limite à des flammes de méthane.

Toutefois, une question demeure en suspens: peut–on assurer de bonnes prédictions numériques de phénomènes aussi complexes que les écoulements turbulents réactifs sans connaître *a priori* les résultats ? Nous posons cette question en pensant à la constante $A_{R_{fu}}$, au terme de production de turbulence dans le modèle $k - \epsilon$ qui est très sensible à la discrétisation des gradients de vitesse, à l'approche statistique de la pondération ou encore au problème de méthanation du modèle d'équilibre chimique. Néanmoins, ces aspects de la simulation relèvent de plusieurs disciplines et ne peuvent pas être mis au même niveau d'importance. En effet, un paramètre comme $A_{R_{fu}}$ est spécifique à chaque écoulement alors qu'une approche statistique de la pondération constitue une modélisation qui a relativement le même impact sur tous les écoulements.

Malgré ces hypothèses et ces approximations, les tendances des écoulements turbulents réactifs sont correctement prédites pour des applications en ingénierie. La modélisation des phénomènes de combustion est basée sur des modèles physiques semi–empiriques qui ont conduit jusqu'à présent à des prédictions assez fiables. Leur amélioration passe inéluctablement par une connaissance plus approfondie des aspects aérothermochimiques de la combustion.

Conclusion

L'objectif principal de cette étude consistait à améliorer et à développer des modèles de combustion pour la simulation numérique de flammes de diffusion turbulentes en utilisant le schéma en variables primitives développé par Rida (1993). Le produit final est destiné à des fins d'ingénierie pour la prédiction des phénomènes de combustion tels l'aspect de l'écoulement, la forme et la longueur de la flamme, le niveau des polluants et la température du mélange.

Nous avons entamé cette étude avec:

- schéma de volumes finis pour écoulements incompressibles;
- algorithme SIMPLER;
- modèle $k - \epsilon$ avec loi de paroi au profil universel;
- librairie de modèle de combustion CMBLIB pour la combustion de 8 espèces développée par McKenty (1992) et composée de:
  - modèle à chimie infiniment rapide;
  - modèle d'équilibre chimique;
  - modèle de micro–flammes.

Au terme de cette étude nous avons abouti à:

- schéma de volumes finis pour écoulements *faiblement compressibles*;
- méthode de résolution *couplée*;
- modèle $k - \epsilon$ avec loi de paroi au profil universel et *loi de paroi à deux échelles de vitesse*;
- librairie de combustion CMBLIB *étendue à la combustion de 55 espèces* et composée de:
  - modèle à chimie infiniment rapide;
  - modèles d'équilibre chimique standard et *avec contraintes d'inégalité*;
  - modèle de micro–flammes *limité à 8 espèces*;
  - *modèle hybride combinant cinétique de réaction et équilibre chimique pour améliorer la prédiction de CO.*
- *Procédure de pondération par fonctions de densité de probabilité Beta et Delta.*

La procédure de calcul ainsi développée a été testée d'abord sur des écoulements turbulents isothermes afin de valider les divers changements apportés aux aspects aérodynamiques du schéma et à l'algorithme de résolution. L'extension aux écoulements réactifs a d'abord été validée dans le contexte d'une flamme de diffusion laminaire de méthane afin de comparer les quatre modèles de combustion sans se préoccuper des effets de la turbulence. Cela a permis de classer les modèles selon un ordre décroissant de précision:

- modèle de micro–flammes;
- modèle hybride;
- modèle d'équilibre chimique;
- modèle à chimie infiniment rapide.

C'est d'ailleurs la limitation du modèle de micro–flammes à la prédiction de flammes de méthane qui nous a incité à développer le modèle hybride. La qualité des résultats obtenue dans le cadre de l'écoulement réactif laminaire a permis de valider la procédure de calcul du modèle hybride.

Le passage aux écoulements turbulents réactifs s'est fait sans problèmes majeurs. Une bonne concordance a été observée entre nos résultats numériques et les mesures expérimentales ou les prédictions numériques puisées dans la littérature. Le classement cité auparavant a pu être conservé tant que la pondération n'a pas été considérée. En effet, la pondération avec le modèle hybride requiert une fonction de densité de probabilité bimodale *a priori* inconnue. Par conséquent, les prédictions du modèle hybride ont été comparables à celles du modèle du micro–flammes tant qu'on était loin de la zone de mélange ou lorsque ce dernier était utilisé sans pondération.

Par ailleurs, la procédure de pondération développée a permis de sauver un temps de calcul considérable dans l'intégration des PDF en ayant recours à une détermination *a priori* de la forme de la fonction de densité de probabilité à utiliser. Toutefois, cette procédure n'étant valable que pour les PDF à une seule variable il n'a pas été possible de l'utiliser dans le contexte du modèle hybride.

Nous avons aussi observé que le modèle d'équilibre chimique avaient des comportements aberrants dans certaines conditions de réaction. Il permettait la formation d'hydrocarbures à partir d'atomes libres de carbone et d'hydrogène ou encore la dissociation du dioxyde de carbone pour des mélanges riches. Ces comportements ne constituant pas une erreur mais plutôt une avenue irréaliste dans le contexte actuel, il nous a fallu y pallier. Une variante du modèle d'équilibre avec contraintes d'inégalité sur les espèces critiques a été alors développée.

À la suite de ce travail, de nombreuses améliorations et extensions sont possibles. Elles concernent des raffinements des modèles de combustion pour enrichir la librairie CMBLIB parmi lesquels on peut citer:

- introduire la pondération dans le modèle hybride;
- développer un modèle similaire au modèle hybride pour la prédiction des oxydes d'azote ;
- inclure les effets de la radiation sur le transfert de chaleur;
- passer à une formulation en trois dimensions pour agrandir le spectre d'applications de la librairie CMBLIB à des géométries industrielles complexes.
- améliorer l'interaction turbulence–combustion du côté de la modélisation de la turbulence en implantant un modèle aux tensions de Reynolds qui tient compte de l'anisotropie de la turbulence.

Somme toute, les objectifs que nous nous sommes assignés ont été atteints. La librairie CMBLIB a été greffée avec succès à un schéma de volumes finis couplé au modèle $k - \epsilon$. Nous avons pu prédire les phénomènes de combustion pour des flammes de diffusion turbulentes et obtenir des résultats raisonnables avec un rapport qualité/coût assez intéressant pour faire de ce code un outil de design industriel.

Références

ARRHENIUS, S. (1889). Über die reaktions geschwindigkeit der inversion von rohrzucken durch sauren. *Z. Phys. Chem.*, *4*.

ASKARI-SARDHAI, A., LIEW, S. K. et MOSS, J. B. (1985). Flamelet modelling of propane–air chemistery in turbulent non–premixed combustion. *Combus. Sci. Tech.*, *44*, 89–95.

AURIER, T. (1995). *Modélisation au second ordre et simulation numérique des écoulements turbulents à volume variable.* Thèse de doctorat, Université de Nantes.

AUTRET, A., GRANDOTTO, M. et DEKEYSER, I. (1987). Finite–element computation of a turbulent flow over a two–dimensional backward–facing step. *Intl. J. Num. Meth. Fluids*, *7*, 89–102.

BÉER, J. M. et CHIGIER, N. A. (1972). *Combustion Aerodynamics.* John Wiley and Sons.

BILGER, R. W. (1975). Turbulent diffusion flames. *Prog. Ener. Combus. Sci.*, *1*, 87.

BILGER, R. W. (1980). Turbulent flows with nonpremixed reactants. P. A. Libby et F. A. Williams, éditeurs, *Turbulent Reacting Flows.* Spring–Verlag, New York, Topics in Applied Physics.

BOCKHORN, H. et LUTZ, G. (1984). The application of turbulent reaction models to the oxidation of CO in a turbulent flow. *Twentieth Symposium (Intl.) on Combustion.* 377–386.

BORGHI, R. (1985). Quelques propriétés mathématiques des modèles physiques pour la combustion turbulente. R. Borghi, P. Calvin, A. Liñan, P. Pelce et G. I. Sivashinsky, éditeurs, *Modélisation des phénomènes de combustion.* Éditions Eyrolles, Paris, 1–42.

BORGHI, R. (1989). *Prog. Ener. Combus. Sci.*, *14*, 245–292.

BORGHI, R. et DESTRIAU, M. (1995). *La combustion et les flammes.* Technip, Paris.

BOUSSINESQ, J. (1877). Théorie de l'écoulement tourbillant. *Acad. Sci. Inst. Fr.*, *23*, 46–50.

BRAIS, N. et MCKENTY, F. (1989). Impact environnemental de l'utilisation du gaz naturel dans l'industrie des pâtes et papiers. *Application du gaz naturel dans l'industrie des pâtes et papiers.* Troisième séminaire.

BRAY, K. N. C. (1976). The interaction between turbulence and combustion. *Sixteenth Symposium (Intl.) on Combustion.* 223–233.

BRAY, K. N. C. et PETERS, N. (1993). *Turbulent Reacting Flows.* Academic Press.

CHAN, S. H., PAN, X. C. et ABOU-ELLAIL, M. M. M. (1995). Flamelet structure of radiating ch_4–air flames. *Combus. and Flame*, *102*, 438–446.

CHIENG, C. C. et LAUNDER, B. E. (1980). On the calculation of turbulent heat transport downstream from an abrupt pipe expansion. *Num. Heat Transfer*, *3*, 189–207.

CHOMIAK, J. et NISBET, J. R. (1995). Modeling variable density effects in turbulent flames – some basic considerations. *Combus. and Flame, 102*, 371–386.

CHUNG, éditeur (1993). *Numerical Modeling in Combustion.* Series in Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Science. Taylor and Francis, Washington D.C.

CORREA, S. M. et GULLATI, A. (1992). Measurements and modeling of a bluff body stabilized flame. *Combus. and Flame, 89*, 195–213.

CORREA, S. M. et POPE, S. B. (1992). Comparison of a Monte Carlo PDF/Finite–Volume mean flow model with bluff–body raman data. *Twenty–Fourth Symposium (Intl.) on Combustion.* The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, 279–285.

DAVIDSON, L. (1996). A pressure–correction method for unstructured meshes with arbitrary control volumes. *Intl. J. Num. Meth. Fluids, 22*, 265–281.

DERVIEUX, A. et LARROUTUROU, B. (1989). *Numerical Combustion.* Lecture Notes in Physics. Spring Verlag.

EATOUGH, C. N. (1991). *Controled Profile Reactor Design and Combustion Measurement.* Thèse de doctorat, Brigham Young University.

FARINAS, M. I. (1997). Communication privée. École polytechnique de montréal.

FAVRE, A. (1965). Équations des gaz turbulents compressibles. *J. de Méc., 4*, 361–421.

FAVRE, A., KOVASZNAY, L. S. G., DUMAS, R., GAVIGLIO, J. et COANTIC, M. (1976). *La turbulence en mécanique des fluides.* Gauthiers–Villars.

GARDINER, W. C., éditeur (1984). *Combustion Chemistry.* Spring–Verlag, New York.

GARON, A. (1995). Communication privée. École polytechnique de montréal.

GHONIEM, A. F. (1986). Computational methods in turbulent combustion. G. S. S. Ludford, éditeur, *Reacting Flows: Combustion and Chemical Reactors, Part I.* American Mathematical Society, Providence, RI, vol. 24 de *Lectures in Appl. Math*, 199–265.

GIVI, P., JOU, W. H. et METCALFE, R. W. (1988). Flame extension in a temporally developing mixing layer. *Proceedings of the* 21st *Symposium (intl.) on Combustion.* The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, 1251–1261.

GLARBORG, P., LILLEHEIE, N. I., BYGSTOL, S., MAGNUSSEN, B. F., KILPINEN, P. et HUPA, M. (1992). 24th *Symposium (Intl.) on Combustion.* 889–898.

GLASSMAN, I. (1977). *Combustion.* Academic Press.

GORDON, S. et MCBRIDE, B. J. (1971). Computer program for calculation of complex chemical equilibrium composition, rocket performance, incident and reflected shock and Chapman Jouguet detonations. Rapport technique, NASA–SP 273.

GOSMAN, A. D., LOCKWOOD, F. C. et SALOOJA, A. P. (1976). The prediction of cylindrical furnaces gaseous fueled with premixed and diffusion burners. *Sixteenth Symposium (Intl.) on Combustion.* 747–760.

GOSMAN, A. D., PUN, W. M., RUNCHAL, A. K. et SPALDING, D. B. (1969). *Heat and Mass Transfer in Recirculating flows.* Academic Press, London and New York.

HABIB, M. A. et WHITELAW, J. H. (1979). Velocity characteristics of a confined coaxial jet. *J. Fluids Eng.*, *101*, 521–529.

HAMER, A. J. et ROBY, R. J. (1997). CFD modeling of a gas turbine combustor using reduced chemical kinetic mechanism. 33rd *AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit.* Seattle, WA, no. AIAA 97–3242.

HARLOW, F. H. et WELCH, J. E. (1965). Numerical calculation of time–dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*, *8*, 2182–2189.

HAUTMAN, D. J., DRYER, F. L., SCHUG, K. P. et GLASSMAN, I. (1981). A multiple–step overall kinetic mechanism for the oxidation of hydrocarbons. *Combus. Sci. Tech.*, *25*, 219–235.

HEYWOOD, J. B. (1986). *Internal Combustion Engine Fundamentals.* McGraw–Hill, New York.

HJERTAGGER, B. H. et MAGNUSSEN, B. F. (1982). Computer simulation of flow, heat transfer and combustion in three–dimensional furnaces. *Arch. Combus.*, *2(1–2)*, 25–48.

IGNAT, L., PELLETIER, D. et ILINCA, F. (1996). An adaptive finite element method for turbulent heat transfer. 34th *Aerospace Sciences Meeting & Exhibit.* Reno, NV, no. AIAA 96–0607.

ILINCA, F., PELLETIER, D. et GARON, A. (1996). Positivity preserving formulations for adaptive solution of two–equation models of turbulence. 27th *AIAA Conference.* No. AIAA 96–2056.

JANAF (1986). *Thermochemical Tables.* American Institute of Physics for the National Bureau of Standards, Washington D.C., troisième édition.

JAYATILLEKE, C. L. V. (1969). The influence of Prandtl number on the resistance

of the laminar sub–layer to momentum and heat transfer. *Prog. Heat Mass Trans.*, *1*, 193–199.

JONES, W. P. (1980). Models for turbulent flows with variable density and combustion. W. Kollmann, éditeur, *Prediction methods for turbulent flows.* Hemisphere Publishing, Washington D.C., 379–421.

JONES, W. P. et LAUNDER, B. E. (1972). The predictions of laminarization with a two–equation model of turbulence. *Intl. J. of Heat and Mass Trans.*, *15*, 301–314.

JONES, W. P. et WHITELAW, J. H. (1982). Calculation methods for reacting turbulent flows: A review. *Combus. and Flame*, *48*, 1–26.

JONES, W. P. et WHITELAW, J. H. (1984). Modelling and measurements in turbulent combustion. *Twentieth Symposium (Intl.) on Combustion*, 233–249.

KENT, J. H. et BILGER, R. W. (1976). The prediction of turbulent diffusion flame fields and nitric oxide formation. *Sixteenth Symposium (Intl.) on Combustion*, 1643–1656.

KHALIL, E. E. (1982). *Modelling of Furnaces and Combustors.* Abacus Press, Turnbridge Wells, UK.

KHALIL, E. E., SPALDING, D. B. et WHITELAW, J. H. (1975). The calculation of local flow properties in two–dimensional furnaces. *Intl. J. Heat mass Trans.*, *18*, 775–791.

KHALIL, K. E., MAHALLAWY, F. M. E., KHALIL, E. E. et SPALDING, D. B. (1977). *Flow Mixing and Heat Transfer in Furnaces.* Pergamon Press.

KIM, Y. M. (1987). *Finite–Element Methods in Turbulent Combustion.* Thèse de doctorat, University of Alabama in Huntsville.

KUO, K. K. (1986). *Principles of Combustion.* John Wiley and Sons.

LACROIX, M. (1998). *Étude paramétrique de la simulation numérique d'un brûleur industriel.* Projet de fin d'études, École Polytechnique de Montréal, Montréal.

LAUNDER, B. E., REECE, G. J. et RODI, W. (1975). Progress in the development of a Reynolds–stress turbulence closure. *J. Fluid Mech.*, *68*, 537–566.

LAUNDER, B. E. et SPALDING, D. B. (1974). The numerical computation of turbulent flows. *Comput. Meth. in Appl. Mech. Eng.*, *3*, 269–289.

LEWIS, B. et VON ELBE, G. (1961). *Combustion, Flames and Explosions of Gases.* Academic Press, New York.

LEWIS, M. H. et MOSS, J. B. (1978). Time resolved scalar measurements in a confined turbulent premixed flame. *Seventeenth Symposium (Intl) on Combustion.* 267.

LEWIS, M. H. et SMOOT, L. D. (1981). Turbulent gaseous combustion part I: Local species concentration measurements. vol. 42, 183–196.

LIBBY, P. A. et WILLIAMS, F., éditeurs (1980). *Turbulent Reacting Flows*, vol. 44 de *Topics in Applied Physics.* Spring–Verlag, New York.

LIEW, S. K., BRAY, K. N. C. et MOSS, J. B. (1981). A flamelet model of turbulent non–premixed combustion. *Combus. Sci. Tech.*, *27*, 69–73.

LIEW, S. K., BRAY, K. N. C. et MOSS, J. B. (1984). A stretched laminar flamelet model of turbulent non–premixed combustion. *Combus. and Flame*, *56*, 199–213.

LIU, C., LIU, Z. et MCCORMICK, S. (1993). Multigrid methods for numerical simulation of laminar diffusion flames. 31st *Aerospace Sciences Meeting and Exhibit.* Reno, NV, no. AIAA 93–0236.

LOCKWOOD, F. C., EL-MAHALLAWY, F. M. et SPALDING, D. B. (1974). An experimental and theoretical investigation of turbulent mixing in a cylindrical furnace. *Combus. and Flame*, *23*, 283–293.

LOCKWOOD, F. C. et NAGUIB, A. S. (1975). The prediction of the fluctuations in the properties of free, round–jet, turbulent, diffusion flames. *Combus. and Flame*, *24*, 109–124.

MAGEL, H. C., SCHNELL, U. et HEIN, K. R. G. (1996). Simulation of detailed chemistry in a turbulent combustor flow. 26th *Symposium (Intl.) on Combustion.*

MAGNUSSEN, B. F. (1975). 14th *Symposium (Intl.) on Combustion.*

MAGNUSSEN, B. F. et HJERTAGER, B. H. (1976). 16th *Symposium (Intl.) on Combustion*, 719–729.

MAURY, F. A. et LIBBY, P. A. (1995). Nonpremixed flames in stagnating turbulence part I – The $k - \epsilon$ theory with equilibrium chemistry for the methane–air system. *Combus. and Flame*, *102*, 341–356.

MCKENTY, F. (1992). *Modèles de combustion pour la simulation numérique d'écoulements réactifs en atmosphère confinée.* Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.

MCKENTY, F., RIDA, S., MENG, F., CAMARERO, R. et ELKAÏM, D. (1994). Modelling of turbulent diffusion flames using a new staggered control volume finite element method. *CFD94 Conference.* Toronto, Canada.

MENG, F. L. (1994). *A Staggered Control Volume Finite Element Method for Turbulent Reacting Flows Coupled With Radiation.* Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Canada.

MITCHELL, R. E., SAROFIM, A. F. et CLOMBURG, L. A. (1980). Experimental and numerical investigation of confined laminar diffusion flame. *Combus. and Flame, 37*, 227–244.

MÜLLER, C. M., BREITENBACH, H. et PETERS, N. (1994). *Twenty–Third Symposium (Intl.) on Combustion*, 1099.

NICOLAÏDES, R. A. (1993). The covolume approach to computing incompressible flows. *Incomp. Comput. Fluid Dyn.*, 295–333.

NIKJOOY, M. (1987). *On the Modelling of Non–Reactive and Reactive Turbulent Combustion Flows.* Thèse de doctorat, Arizona State University.

PAGE, M., GARON, A. et CAMARERO, R. (1989). LUSS: Sous programmes pour la résolution d'un système d'équations algébriques stockées en ligne de ciel. Rapport technique EPM/RT–89/13, École Polytechnique de Montréal.

PATANKAR, S. V. (1980). *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow.* Hemisphere Publishing.

PATANKAR, S. V. et SPALDING, D. B. (1970). *Heat and Mass Transfer in Boundary Layers, a General Calculation Procedure.* Intertext Books, London.

PATANKAR, S. V. et SPALDING, D. B. (1972). A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three–dimensional parabolic flows. *Intl. J. Heat Mass Trans., 15*, 1787–1806.

PERRIN, M., ALBERT, S., IMBACH, J. et MARIASINE, J. (1995). Characterization of a large scale (500kw) model burner by detailed in–flame measurements for different flames in a high temperature environment. *Intl. Gas Research Conference.* Cannes, France.

PERRIN, M., MCKENTY, F., RIDA, S. et CAMARERO, R. (1996). Experimental and numerical investigation of natural gas non–premixed turbulent flames of industrial scale. *Combustion Canada 96 Conference.* Ottawa, Canada.

PETERS, N. (1986). *Twenty–First Symposium (Intl.) on Combustion*, 1231.

PETERS, N. et KEE, R. J. (1987). The computation of stretched laminar methane–air diffusion flame using a reduced four–step mechanism. *Combus. and Flame*, *68*, 17–29.

POPE, S. B. (1976). The probability approach on the modelling of turbulent reactive flows. *Combus. and Flame*, *27*, 299.

POPE, S. B. (1981). A Monte Carlo method for the pdf equations of turbulent reactive flow. *Combus. Sci. Tech.*, *25*, 159.

POPE, S. B. (1990). *Twenty–Thirdt Symposium (Intl.) on Combustion*, 591.

PUN, W. M. et SPALDING, D. B. (1977). A general computer program for two–dimensional elliptic flows. Rapport technique HTS/76/2, Imperial College, Londres, UK.

RAMOS, J. I. (1989). *Internal Combustion Engine Modeling.* Hemisphere Publishing, New York.

REYNOLDS, O. (1895). On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London.* vol. 186 de *Series A*, 123.

RHIE, C. M. et CHOW, W. L. (1982). A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation. No. AIAA 82–0998.

RHODES, R. P. (1975). *Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows.* Plenum Press, New York.

RHYMING, I. L. (1985). *Dymanique des fluides.* Presses Polytechniques Romandes, Lausanne.

RICHARDSON, J. N., HOWARD, H. C. et SMITH, R. W. (1953). *Fourth Symposium (Intl.) on Combustion.*

RIDA, S. (1993). *Schéma de volumes finis pour la simulation numérique d'écoulements turbulents sur des maillages non structurés.* Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.

RIDA, S., MCKENTY, F., MENG, F. L. et REGGIO, M. (1997). A staggered control volume scheme for unstructured triangular grids. *Intl. J. Num. Meth. Fluids*, *25*, 697–717.

ROGG, B., BEHRENDT, F. et WARNATZ, J. (1986). Turbulent non–premixed combustion in partially premixed diffusion flamelets with detailed chemistry. *Twenty–First Symposium (Intl.) on Combustion.* 1533–1541.

ROSSINI, F. D., PITZER, K. S., ARNETT, R. L. et BRAUN, R. M. (1953). *Selected Values of Physical and Thermodynamics Properties of Hydrocarbons and Related Compounds.* Carnegie Press, Pittsburgh.

ROTTA, J. C. (1951). Statistische theorie nichthomogener turbulenz. *Z. Phy.*, *29*, 547–572.

RUFFIN, E. (1994). *Étude de jets turbulents à densité variable à l'aide de modèles de transport au second ordre.* Thèse de doctorat, Institut de Mécanique Statistique de la Turbulence, Marseille, France.

SANDERS, J. P. H., CHEN, J. Y. et GÖKALP, I. (1997). Flamelet–based modeling of NO formation in turbulent hydrogen jet diffusion flames. *Combus. and Flame*, *111*, 1–15.

SCHIESTEL, R. (1993). *Modélisation et simulation des écoulements turbulents.* Hermes, Paris.

SCHLICHTING, H. (1960). *Boundary Layer Theory*, McGraw–Hill. Series in Mechanical Engineering. Quatrième édition, 598–599.

SCHNEIDER, G. E. et RAW, M. J. (1986). A skewed positive influence coefficient procedure for control–volume–based finite–element convection–diffusion computation. *Num. Heat Trans.*, *9*, 1–26.

SCHNEIDER, G. E. et RAW, M. J. (1987). Control volume finite element method for heat transfer and fluid flow using collocated variables – 1. computational procedure. *Num. Heat Trans.*, *11*, 363–390.

SESHADRI, K. et ILINCIC, N. (1995). The asymptotic structure of nonpremixed methane–air flames with oxidizer leakage of order unity. *Combus. and Flame*, *95*, 69–80.

SESHADRI, K. et PETERS, N. (1988). Asymptotic structure and extinction of methane–air diffusion flames. *Combus. and Flame*, *73*, 23–44.

SHIH, T. M., TAN, C. H. et HWANG, B. C. (1989). Effect of grid staggering on numerical schemes. *Intl. J. Num. Meth. Fluids*, *9*, 193–212.

SMITH, P. J. et SMOOT, L. D. (1981). Turbulent gaseous combustion part II: Theory and evaluation for local properties. *Combus. and Flame*, *42*, 277–285.

SMITH, R. M. et HUTTON, A. G. (1982). The numerical treatment of advection: A performance comparison of current methods. *Num. Heat Trans.*, *5*, 439–461.

SMOOKE, M. D., MITCHELL, R. E. et KEYES, D. E. (1989). Numerical solution of a confined axisymmetric laminar diffusion flame. *Proceedings of the Fifth International Symposium on Numerical Methods in Engineering.* vol. 1 de *Computational Mechanics Publications*, 185–194.

SPALDING, D. B. (1971a). Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. *Thirteenth Symposium (Intl) on Combustion.* 649–657.

SPALDING, D. B. (1971b). Concentration fluctuations in a round turbulent free jet. *Chem. Eng. Sc.*, *26*, 95–107.

SPALDING, D. B. (1979). *Combustion and Mass Transfer.* Pergamon Press, Oxford.

TAKAGI, T., OGASAWARA, M., FUJII, K. et DAIZO, M. (1974). A study on nitric oxide formation in turbulent diffusion flames. *Fifteenth Symposium (Intl.) on Combustion.* 1051–1059.

THOMADAKIS, M. et LESCHNIZER, M. (1996). A pressure–correction method for the solution of incompressible viscous flows on unstructured grids. *Intl. J. Num. Meth. Fluids*, *22*, 581–601.

TURNS, S. R. (1996). *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications.* McGraw–Hill.

VANDERPLAATS, G. N. (1984). *Numerical optimization techniques for engineering design.* Series in Mechanical Engineering. McGraw–Hill.

VIOLLET, P. L. (1986). Modélisation numérique de flammes de diffusion en régime turbulent. *Bulletin de la direction des études et recherches.* vol. 2 de *Série A*, 5–21.

WARNATZ, J. et MAAS, U. (1993). *Technische Verbrennung.* Springer.

WEINBERG, F. J. (1975). The first half–million years of combustion research and today's burning problems. *Prog. Ener. Combus. Sci.*, *1*, 17–31.

WENG, Z. M. et CHEN, D. Z. (1988). Numerical method of computation of turbulent flow field of two–dimensional hydrogen–air mixing stream with detailed chemical reaction mechanism. *Intl. J. Hydrogen Ener.*, *13*, 355–362.

WESTBROOK, C. K. et DRYER, F. L. (1981). Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combus. Sci. Tech.*, *27*, 31–43.

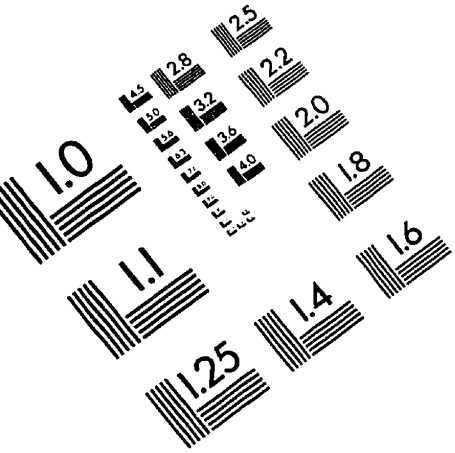
WILCOX, D. G. (1993). *Turbulence Modeling for CFD.* DCW Industries Inc., Cañada, CA.

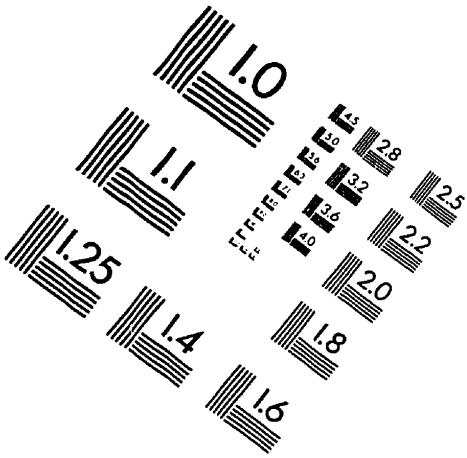
WILLIAMS, F. A. (1965). *Combustion Theory.* Addison–Wesley, Reading, MA.

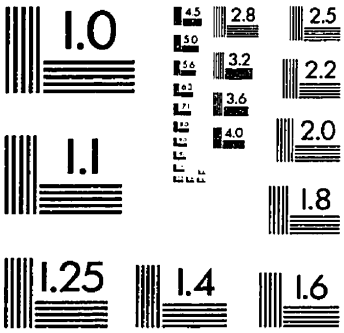
WILLIAMS, F. A. (1975). *Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows.* Plenum Press, New York.

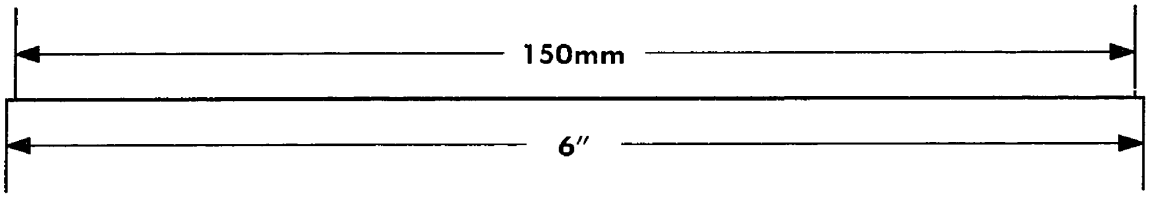
WILLIAMS, F. A. (1985). *Combustion Theory.* Benjamin–Cummings, Menlo Park, CA, seconde édition.

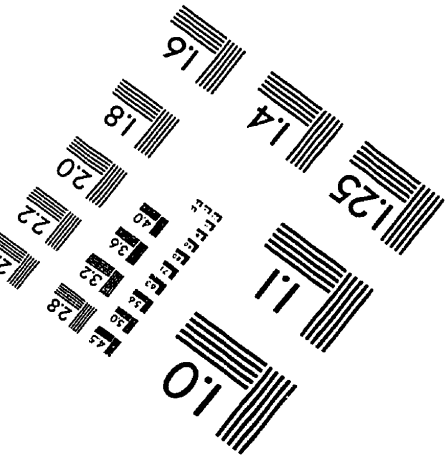
IMAGE EVALUATION TEST TARGET (QA-3)

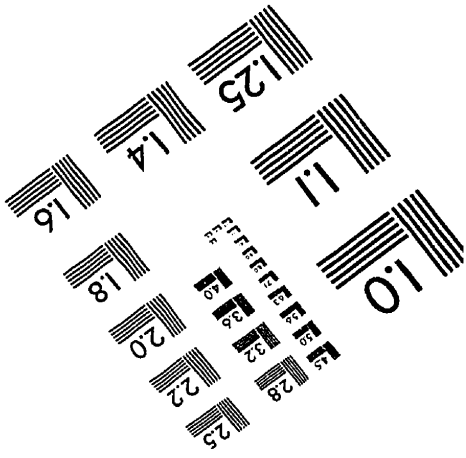










APPLIED IMAGE, Inc
1653 East Main Street
Rochester, NY 14609 USA
Phone: 716/482-0300
Fax: 716/288-5989

© 1993, Applied Image, Inc., All Rights Reserved