

Titre: Implantation d'un modèle de cinétique chimique dans un code
d'éléments finis
Title: d'éléments finis

Auteur: Mohamed Arselène Ayari
Author:

Date: 1995

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Ayari, M. A. (1995). Implantation d'un modèle de cinétique chimique dans un code d'éléments finis [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal].
Citation: PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/9234/>

Document en libre accès dans PolyPublie

Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/9234/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Ricardo Camarero, & Daniel Rozon
Advisors:

Programme: Génie énergétique
Program:

Université de Montréal

IMPLANTATION D'UN MODÈLE DE CINÉTIQUE CHIMIQUE DANS UN CODE D'ÉLÉMENTS FINIS

Mohamed Arselène AYARI
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCE APPLIQUÉE (M.Sc.A.)
(GÉNIE ÉNERGÉTIQUE)

Avril 1995

© Mohamed Arselène AYARI, 1995.



National Library
of Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services Branch
395 Wellington Street
Ottawa, Ontario
K1A 0N4

Bibliothèque nationale
du Canada

Direction des acquisitions et
des services bibliographiques
395, rue Wellington
Ottawa (Ontario)
K1A 0N4

Your file Votre référence

Our file Notre référence

THE AUTHOR HAS GRANTED AN
IRREVOCABLE NON-EXCLUSIVE
LICENCE ALLOWING THE NATIONAL
LIBRARY OF CANADA TO
REPRODUCE, LOAN, DISTRIBUTE OR
SELL COPIES OF HIS/HER THESIS BY
ANY MEANS AND IN ANY FORM OR
FORMAT, MAKING THIS THESIS
AVAILABLE TO INTERESTED
PERSONS.

L'AUTEUR A ACCORDE UNE LICENCE
IRREVOCABLE ET NON EXCLUSIVE
PERMETTANT A LA BIBLIOTHEQUE
NATIONALE DU CANADA DE
REPRODUIRE, PRETER, DISTRIBUER
OU VENDRE DES COPIES DE SA
THESE DE QUELQUE MANIERE ET
SOUS QUELQUE FORME QUE CE SOIT
POUR METTRE DES EXEMPLAIRES DE
CETTE THESE A LA DISPOSITION DES
PERSONNE INTERESSEES.

THE AUTHOR RETAINS OWNERSHIP
OF THE COPYRIGHT IN HIS/HER
THESIS. NEITHER THE THESIS NOR
SUBSTANTIAL EXTRACTS FROM IT
MAY BE PRINTED OR OTHERWISE
REPRODUCED WITHOUT HIS/HER
PERMISSION.

L'AUTEUR CONSERVE LA PROPRIETE
DU DROIT D'AUTEUR QUI PROTEGE
SA THESE. NI LA THESE NI DES
EXTRAITS SUBSTANTIELS DE CELLE-
CI NE DOIVENT ETRE IMPRIMES OU
AUTREMENT REPRODUITS SANS SON
AUTORISATION.

ISBN 0-612-03649-9

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

**IMPLANTATION D'UN MODÈLE CINÉTIQUE
CHIMIQUE DANS UN CODE D'ÉLÉMENTS FINIS**

présenté par : AYARI Mohamed Arselène
en vue de l'obtention du diplôme de: MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. TEYSSEDOU Alberto, Ph.D., président

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

M. ROZON Daniel, Ph.D., membre et codirecteur

M. DETUNCQ Bruno, M.Eng., membre

*À mes parents.
À ma soeur et mes frères.
À toute ma famille.*

Remerciements

Ce travail de maîtrise a été effectué au sein du groupe de recherche en Mathématique de l'Ingénierie Assistée par Ordinateurs (M.I.A.O) à l'École Polytechnique de Montréal.

Je remercie en premier lieu mon directeur d'études le professeur Ricardo Camarero qui m'a donné l'opportunité de travailler dans son équipe. Son soutien moral et ses suggestions, toujours pertinentes, étaient une source constante de motivation. J'adresse mes plus vifs remerciements à mon codirecteur, le professeur Daniel Rozon qui m'a accueilli au sein du département énergétique et qui a rendu ce travail possible.

Je remercie les professeurs Alberto Teyssedou et Bruno Detuncq, respectivement président et membre de jury pour la lecture de ce travail. Le contenu y a gagné en clarté et en rigueur.

Je tiens également à remercier Dr. François McKenty pour ses nombreuses observations. Ses conseils et ses critiques constructives furent également très appréciés lors de la rédaction de ce mémoire.

Je ne peux pas passer sous silence la contribution de Monsieur Alain Robidoux qui a fourni le support technique nécessaire au bon fonctionnement des équipements informatiques utilisés pour ce projet.

Enfin, je remercie la mission universitaire et éducative de la Tunisie pour la bourse d'exemption.

Résumé

Dans ce travail, un modèle de cinétique chimique est intégré dans un code d'éléments finis pour la simulation d'écoulements réactifs turbulents dans des géométries bi-dimensionnelles planes ou axisymétriques.

Le modèle chimique utilisé est déterminé à partir des résultats expérimentaux de combustion, et représente la cinétique de réaction pour des hydrocarbures saturés. Afin de combiner ce modèle avec l'aéraulique du système, les variables de concentrations molaires ont été modifiées dans chacune des équations cinétiques. Les équations de conservation d'espèce exprimées en fonction des fractions massiques sont ainsi devenues compatibles avec les termes sources introduits. La turbulence a été modélisée à l'aide d'un modèle $k-\epsilon$ avec loi de paroi. La discrétisation des équations d'écoulements est obtenue par la méthode des éléments finis sur des maillages structurés avec des éléments quadrilatères de dimensions variables.

Une méthode séquentielle a été choisie pour la résolution numérique des équations d'écoulement et de conservation d'espèces chimiques par le code FIDAP. Pour cela l'algorithme de résolution *Segregated* utilisé, a permis de contourner le problème d'espace mémoire engendré par la dimension du système. Ainsi des prédictions ont été fournies sur tous les paramètres qui régissent le système, à savoir: la vitesse, l'énergie cinétique de turbulence et l'évolution de la concentration de chaque espèce chimique au cours de la réaction.

Abstract

This thesis presents the integration of a chemical reaction kinetics model in a finite element code for the simulation of turbulent reacting flows in planar or axisymmetric configurations.

This chemical model was developed based on experimental results of combustion process and describe the kinetic reaction for the oxidation of saturated hydrocarbons. In order to combine this model with the aerodynamics of the system, the variables describing moles concentration were transformed into mass fractions in each of the reaction terms. Thus, the conservation equations for the species were made compatible with the source terms introduced in these equations

The turbulence model was represented using the $k-\epsilon$ model with wall functions. The governing equations were discretized using the finite elements method applied on a mesh of structured quadratic elements.

The numerical solution of the governing equations the flow and the conservation equation for the species were solved in a sequential manner using the FIDAP code. The *Segregated* algorithm used allowed the memory restrictions imposed by the size of the system under consideration to be avoided, as compared to the fully coupled solver. This permitted all the variables in the system, i.e., the velocity field, the kinetic energy, and the evolution of the chemical species during the reaction process, to be predicted.

Table des matières

Dédicace	iv
Remerciements	v
Résumé	vi
Abstract	vii
Table des matières	viii
Liste des figures	xii
Liste des tableaux	xiv
Liste des notations et symboles	xv
Introduction	1
1.1 But	3
1.2 Objectifs	4
1.3 Méthodologie	5
CHAPITRE I	7
Modélisation cinétique	7
1.1 Théorie de la cinétique chimique	7

1.1.1 Mécanisme cinétique	9
1.2 Modèle de réaction	10
1.3 Écriture en fraction massique	13
1.4 Modification des taux de réactions	14
1.5 Les Codes de résolutions	16
1.5.1 Code d'éléments finis (FIDAP)	16
1.5.2 Code de volumes finis (VF)	16
CHAPITRE II	17
Equations d'écoulement	17
2.1 Équations moyennes de conservation	18
2.2 Les modèles de turbulence	20
2.2.1 Modèles à zéro équation	21
2.2.2 Modèles à une équation	22
2.2.3 Modèles à deux équations	23
2.2.4 Modèles algébriques des tensions de Reynolds	23
2.3 Équations de bilan	25
2.3.1 Principe de conservation d'espèce	27
2.3.3 Équation d'état	29
2.4 Conditions aux frontières	30

2.4.1 Conditions frontières à l'entrée	30
2.4.2 Conditions frontières à la sortie	31
2.4.3 Conditions frontières sur les parois	31
2.4.4 Flux de chaleur et de masse	32
2.4.5 Loi de la paroi	33
2.5 Écriture moyenne des termes sources	35
2.6 Approches de la combustion turbulente	38
 CHAPITRE III	 41
Méthodes numériques	41
3.1 Discrétisation des équations	41
3.2 Discrétisation du domaine	43
3.3 Discrétisation dans la zone de la paroi	46
3.4 Algorithme de calcul	46
3.5 Résumé des étapes de résolution	48
 CHAPITRE IV	 50
Résultats Numériques	50
4.1 Écoulement dans un canal	51
4.2 Ecoulement dans un canal avec une expansion soudaine	54

4.3 Ecoulement dans deux jets coaxiaux confinés	61
4.4 Conclusion	70
Conclusion	71
Bibliographie	73

Liste des figures

Figure 2.1	Domaine d'intégration.....	30
Figure 2.2	Déscription du problème.....	39
Figure 3.1	Élément de base quadrilatère.....	45
Figure 3.2	Emplacement des variables sur un élément quadrilatère.....	45
Figure 4.1	Géométrie utilisée pour un écoulement turbulent dans un canal	52
Figure 4.2	Maillage utilisé pour un écoulement turbulent dans un canal	53
Figure 4.3	Comparaison de la composante axiale de la vitesse dans un canal turbulent (Expérience de Richman & Azad (1973)).....	53
Figure 4.4	Géométrie d'un canal avec expansion soudaine.....	54
Figure 4.5	Maillage utilisé pour un canal avec expansion soudaine.....	56
Figure 4.6	Vecteurs vitesse pour un canal avec expansion soudaine.....	56
Figure 4.7	Lignes de courant pour un canal avec expansion soudaine	57
Figure 4.8	Lignes d'iso-vitesse pour un canal avec expansion soudaine.....	57
Figure 4.9	lignes d'iso-pression, pour un canal avec expansion soudaine.....	58
Figure 4.10	lignes d'iso-énergie, pour un canal avec expansion soudaine.....	58
Figure 4.11	Profil de la vitesse pour un écoulement dans un canal avec expansion soudaine	59

Figure 4.12	Profil de l'énergie cinétique turbulente pour un écoulement dans un canal avec expansion soudaine.....	60
Figure 4.13	Géométrie utilisée pour deux jets coaxiaux confinés, expérience de Habib et Whitelaw (1979).....	63
Figure 4.14	Maillage utilisé pour deux jets coaxiaux confinés.....	65
Figure 4.15	Lignes de courants pour deux jets coaxiaux confinés.....	65
Figure 4.16	Lignes d'iso-vitesses pour deux jets coaxiaux confinées.....	66
Figure 4.17	Lignes d'iso-taux pour deux jets coaxiaux confinés.....	66
Figure 4.18	Lignes d'iso-énergie pour deux jets coaxiaux confinés.....	67
Figure 4.19	Profil de la vitesse pour un écoulement turbulent de jets coaxiaux dans un combusteur axisymétrique.....	68
Figure 4.20	Profil de l'énergie cinétique pour un écoulement turbulent de jets coaxiaux confinés dans un combusteur axisymétrique.....	69

Liste des tableaux

Tableau 1.1	Coeficients pour le calcul des termes de transformation.....	12
Tableau 4.1	Valeurs de relaxation pour les différentes paramètres.....	62

Liste des notations et symboles

Notations

A	facteur de fréquence	$[cm^3/mole\cdot s]$
C_{Si}	concentration d'espèce i	$[kg/kg]$
C'_{Si}	fluctuation de la concentration	$[kg/kg]$
$C_{\mu 1}$	constante	$[-]$
c_d	constante; modèle de turbulence	$[-]$
c_i	fraction massique de l'espèce i	$[J/kg\cdot K]$
c_p	chaleur spécifique	$[J/kg\cdot K]$
D	Diamètre	$[m]$
ϵ	émissivité	$[-]$
E_a	énergie d'activation	$[cal/mole]$
f	grandeur aléatoire	$[-]$
g	accélération de gravitation terrestre	$[m/s^2]$
h_i	enthalpie de formation par unité de masse pour une espèce i	$[J/kg]$
I	intensité de la turbulence	$[-]$
k_r	constante d'équilibre	$[-]$
K'	fluctuation de la constante d'équilibre	$[-]$

k	énergie cinétique de turbulence	$[m^2/s^2]$
l	échelle de longueur	$[m]$
M_i	Masse molaire de l'espèce i	$[kg/kmole]$
m_w	flux de masse à la paroi	$[kg/m^2]$
n	direction normale	$[-]$
Pr	nombre de Prandtl	$[-]$
p	pression absolue	$[N/m^2]$
q_m	flux massique	$[kg/m^2]$
R	constante universelle des gaz	$[cal/mole-K]$
R_i	taux de formation de l'espèce i	$[1/s]$
r	coordonnée radiale	$[m]$
S	constante de Stefan-Boltzmann	$[J/s\cdot m^2\cdot K^4]$
S_ϕ	terme source de l'équation de transport de ϕ	$[1/s]$
Sc	nombre de Schmidt	$[-]$
S_i	espèce chimique i	$[-]$
S_t	nombre turbulent de Schmidt	$[-]$
s	direction moyenne de l'écoulement	$[-]$
T	température	$[K]$
Δt	période de temps	$[s]$
T_w	température à la paroi	$[K]$
t	temps	$[s]$
U	vitesse axiale; coordonnées locales	$[m/s]$

u	vitesse axiale	[m/s]
u_*	vitesse de frottement	[m/s]
V	vitesse radiale coordonnées locales	[m/s]
v	vitesse radiale	[m/s]
V_θ	vitesse tangentielle	[m/s]
x	coordonnée axiale	[m]
y_{limite}	distance limite à la paroi	[m]
y^+	distance adimensionnelle; loi de paroi	[m]

Lettres grecques

α_p	facteur de relaxation	[-]
β_T	coefficient d'expansion volumique du à la température	[1/K]
β_{cn}	coefficient d'expansion volumique aux espèces chimiques	[-]
δ	distance à l'entrée	[m]
$\delta_{i,j}$	symbole de Kroenecker	[-]
ϕ	ratio initial	[-]
Φ	variable scalaire	[-]
κ	constante de Von Karman	[-]
ρ	densité	[kg/m ³]

Γ_ϕ	coefficient de diffusion du scalaire ϕ	$[kg/m \cdot s]$
ε	Dissipation	$[m^2/s^3]$
ν_τ	viscosité cinématique	$[m^2/s]$
μ	viscosité laminaire	$[N \cdot s/m^2]$
μ_{eff}	viscosité efficace	$[N \cdot s/m^2]$
μ_t	viscosité turbulente	$[N \cdot s/m^2]$
τ_w	taux de cisaillement à la paroi	$[N/m^2]$

Indices

c	terme de convection
ei	espèce i dans une réaction élémentaire
eff	valeur effective due à la turbulence
externe	valeur externe du domaine
i	élément chimique
interne	valeur à l'intérieur du domaine
p	valeur de relaxation pour la pression
r	terme de rayonnement

Symboles

\sim valeur moyenne; décomposition non-pondérée par la masse

- valeur moyenne; décomposition pondérée par la masse
- ' fluctuation; décomposition pondérée par la masse
- " fluctuation; décomposition non-pondérée par la masse.

Introduction

La conversion de l'énergie chimique dans la production des diverses formes d'énergie, directement utilisable (énergie électrique, énergie mécanique, lumière, etc.) est réalisé par la production de chaleur à partir de la combustion des diverses fractions d'hydrocarbures. Bien que la production d'énergie par combustion soit réalisée dans une large gamme d'applications depuis fort longtemps, les connaissances dans ce domaine présentent encore de sérieuses lacunes.

En réalité la plupart des applications industrielles mettent en jeu des mécanismes physiques complexes qui se rajoutent à l'écoulement: couplage avec le transfert thermique par conduction dans les parois ou par rayonnement, fluides non newtoniens, présence de réaction chimique, de combustion, écoulement multi-constituants ou multi-phases, effets non linéaires de surface libre, couplage avec des phénomènes électromagnétiques, etc..

Dans le domaine de la combustion, comme dans beaucoup d'autres, l'application a devancé l'étude des phénomènes fondamentaux. Il est toutefois évident que la connaissance de ces derniers est une condition indispensable à toute optimisation ultérieure des procédés industriels. Or, cette optimisation est exigée, non seulement pour des raisons économiques en exploitant au maximum les réserves de combustibles, mais aussi pour des raisons environnementales. L'amélioration de la combustion dans les brûleurs et les moteurs à combustion interne diminuera les teneurs élevées d'hydrocarbures imbrûlés et d'oxyde de carbone dans les gaz d'échappement.

L'étude des phénomènes de combustion relève de plusieurs différentes disciplines scientifiques parmi lesquelles on peut citer: la mécanique des fluides, la chimie et la thermodynamique. Les réactions chimiques se produisant au cours de la combustion de n'importe quel combustible, le plus simple soit ils (de point de vu constitution chimique) sont multiples et complexes. Durant ces dernières années, plusieurs études théoriques basées sur un fondement mathématique solide ont été effectuées dans le domaine de la combustion dont on peut citer celles réalisées par, Lewis, Von Elbe, Von Karman et Williams. Toutefois le développement de la théorie de la combustion a donné naissance à une large gamme d'approches asymptotiques sans toutefois aboutir à des résolutions numériques directes des équations de transport. Des auteurs comme Borghi et (Williams et Libby) estiment que les nouvelles théories plus générales possèdent presque autant de points faibles que les anciennes.

Les approches utilisées pour l'analyse des flammes de diffusion turbulentes, se regroupent en trois catégories: méthodes heuristiques basées sur des équations de conservation , méthodes de pondération par densité de probabilité, et théorie cinétique de la réaction chimique .

On distingue quatre méthodes fondamentales pour la simulation numérique des phénomènes de combustion

méthode des différences finies,

méthode des volumes finis,

méthode des éléments finis,

méthode spectrale.

Le schéma numérique basé sur une technique des volumes de contrôle telle que proposée par Baliga et Patankar (1980) a été étudié amplement dans le groupe de recherche (M.I.A.O). Cette méthode utilise une discréétisation triangulaire du domaine dans laquelle les fonctions d'interpolation varient exponentiellement dans le sens de l'écoulement moyen et linéairement dans le sens transversal. Une extension basée sur la formulation vorticité-courant fut appliquée à la simulation numérique de la combustion turbulente par ElKaim (1990). De plus une variété importante d'écoulements turbulents a été implantée par Rida (1993) ainsi que des modèles de combustion pour la simulation d'écoulements réactifs en atmosphères confinés par McKenty (1992).

Parmi les travaux qui traitent de la méthode des éléments finis, on retrouve plusieurs études proposées au cours de la dernière décennie. On peut citer principalement le schéma de diffusion ligne de courant "streamline diffusion" qui a été proposé par Hughes (1978) et étudié par Johnson (1985) et d'autres schémas comme celui de Taylor-Galerkin proposé par Donnea et al. (1984) ou encore des méthodes adaptatives par Babuska et al. (1986), Oden et al. (1986), et Lohner et al. (1986). La propagation des flammes par la méthode des éléments finis en une et deux dimensions a été étudiée également par Chung (1993).

1.1 But

L'optimisation, à l'aide de la modélisation des chambres de combustion, impose des modèles précis et fiables. Le but de ce travail est d'implanter un modèle de combustion pour des hydrocarbures saturés (de la famille des alcanes) dans un code commercial utilisant la méthode des éléments finis. La résolution des équations globales du systèmes nous permettra d'identifier la faisabilité et les limites atteintes au niveau logiciel et théorique.

1.2 Objectifs

L'extension de l'utilisation de la simulation numérique dans l'industrie est liée à deux objectifs: diminuer (en se substituant à des essais coûteux et longs à mettre en oeuvre) la durée des phases de conception et simuler des configurations d'écoulements inaccessibles à l'approche expérimentale dans les technologies gazières. Par conséquent un nombre de difficultés spécifiques à la modélisation des chambres de combustion doit être surmonté.

- L'écoulement est turbulent : en chaque point de la flamme, les vitesses, la température et la composition du mélange gazeux présentent, au cours du temps, des fluctuations autour d'une valeur moyenne. Si l'écoulement est stationnaire, les valeurs moyennes et les écart-types sont constants.
- L'écoulement est réactif: la combustion fait intervenir un grand nombre de réactions chimiques et d'espèces, par exemple, la combustion du méthane dans l'air, fait intervenir plus de 600 réactions élémentaires et plus de 500 espèces. La chimie doit donc être simplifiée pour la modélisation soit sous forme d'un petit nombre de réactions chimiques représentatives comportant une dizaine d'espèces. Dans ce cas on parle de schémas réduits vis-à-vis du schéma complet des réactions élémentaires.
- Le couplage de ces phénomènes est complexe : les taux de production et de destruction s'expriment de façon non-linéaire en fonction de la composition et de la température du mélange. L'objet du modèle de combustion turbulente est de calculer les taux moyens de production ou de destruction.

Toutefois, d'autres problèmes se présentent dans la phase de préparation des données. À ce niveau on doit penser, à perfectionner la génération de maillage et les outils de C.A.O afin de résoudre rapidement avec plus de précision.

1.3 Méthodologie

Le travail décrit est basé sur une formulation d'un modèle de cinétique chimique "A Multi-Step Overall Kinetic Mechanism for The Oxydation of Hydrocarbons" tiré des travaux de Hautman et al. (1981). La modélisation chimique proposé dans ce travail consiste à des résultats expérimentaux pour des réactions d'oxydation des hydrocarbures saturés, la forme réduite du modèle est une chaîne de réactions avec sept espèces chimiques qui fournira une représentation plus réaliste du phénomène par rapport au schéma à une seule réaction. Le modèle thermochimique qu'on utilisera sera modifié pour permettre son intégration dans le code de calcul FIDAP (code commercial pour la simulation des écoulements par la méthode des éléments finis). Les termes sources tirés à partir des termes de formation et de destruction assure ainsi le couplage entre la thermochimie et l'aéraulique. Il sera question également de discuter des performances des outils logiciels développés au cours de ces dernières années pour la résolution des écoulements réactifs dans l'industrie.

Dans le premier chapitre, on présentera une introduction de la théorie cinétique et le modèle de réaction proposé. On décrira la méthode de calcul du taux de réaction de chaque élément dans la chaîne de réactions. La dernière section traitera des deux codes utilisées pour la simulation.

On présentera au deuxième chapitre les approches statistiques, ainsi que les corrélations existantes pour la résolution des équations générales pour un écoulement turbulent à densité variable.

La discrétisation du système d'équations par la méthode des éléments finis ainsi que la méthode de génération de maillage du domaine d'intégration fera l'objet du troisième chapitre. On présentera également l'algorithme de résolution du système. Finalement, nous traiterons quelques exemples dans le cas d'écoulement turbulent sans réaction chimique afin de valider les résultats obtenus avec le code. Les limites de résolution dans le cas des écoulements réactifs seront discutées par un cas de deux injecteurs coaxiaux confinés.

CHAPITRE I

Modélisation cinétique

Afin de situer les différents phénomènes de la combustion dans leur contexte physico-chimique et aérodynamique, il nous paraît utile de commencer par une description générale de la théorie de la cinétique chimique.

Pour expliquer le mécanisme réactionnel de la combustion dans un système quelconque, on a recours à une étude cinétique détaillée. Le cas utilisé dans ce travail est celui d'une réaction de combustion d'un hydrocarbure saturé de la forme C_nH_{2n+2} .

1.1 *Théorie de la cinétique chimique*

Pour déterminer l'évolution chimique dans un environnement réactif, une description détaillée du mécanisme cinétique est nécessaire à un niveau microscopique ou moléculaire. Pour une réaction en phase gazeuse de la forme :



le taux de transformation des éléments S_1 et S_2 et le taux de formation de S_3 et S_4 sont régis par la loi d'action de masse. Cette loi indique que la disparition d'une espèce

chimique est proportionnelle au produit des réactifs porté à la puissance de leurs coefficients stoechiométriques, soit :

$$\frac{dS_1}{dt} = -k_r [S_1][S_2], \quad (1.2)$$

où k_r est une constante de proportionnalité.

La réaction (1.1) indique qu'au niveau moléculaire les espèces S_1 et S_2 réagissent entre elles pour produire deux molécules S_3 et S_4 et par conséquent

$$\frac{dS_1}{dt} = \frac{dS_2}{dt} = -\frac{dS_3}{dt} = -\frac{dS_4}{dt}. \quad (1.3)$$

Toutefois le taux de disparition de S_1 est relié directement au nombre de collisions entre S_1 et S_2 , et d'après la théorie des collisions, la vitesse de réaction s'écrit sous la forme :

$$\frac{dS_1}{dt} = -A \exp(-E_a/RT) [S_1][S_2]. \quad (1.4)$$

R : constante universelle des gaz en (cal/mole-K),

T : température en (K),

A : facteur de fréquence (cm³/mole-s),

E : énergie d'activation en (cal/mole).

Cette représentation est de type Arrhenius.

Cependant, certaines réactions ne sont pas correctement représentées sous cette forme étant donné que la constante de proportionnalité est fonction de la température, soit :

$$k_r = A T^n \exp(-E_a/RT), \quad (1.5)$$

où n représente l'ordre de réaction.

La probabilité pour que la collision se fasse avec une énergie qui est au moins égale à l'énergie d'activation E_a est égale à la fraction molaire des molécules. D'après les lois de la distribution de l'énergie de Maxwell-Boltzman, cette fraction molaire est donnée par le terme $\exp(-E_a/RT)$. Ce facteur exponentiel, appelé parfois facteur d'Arrhénius, est un paramètre cinétique important puisqu'il détermine la dépendance de la vitesse de la réaction par rapport à la température.

1.1.1 Mécanisme cinétique

Une réaction chimique globale se déroule (en réalité) suite à une succession de réactions plus simples et élémentaires dont les réactifs sont des molécules ou des radicaux. Dans une chaîne de réactions, on considère une équation élémentaire de la forme :



on considère que le taux de disparition de S_{e1} par exemple s'écrit d'une façon générale sous la forme :

$$-\frac{d[S_{e1}]}{dt} = k_r \prod_{i=1}^4 [S_{ei}]^{n_i}, \quad (1.7)$$

où k_r s'exprime par :

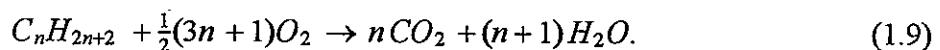
$$k_r = A \exp(-E_a/RT), \quad (1.8)$$

et S_{ei} est le réactif ou un produit qui influence la disparition de S_{ei} .

Les valeurs de n_i représentent l'ordre de la réaction et ne sont pas nécessairement des coefficients stoechiométriques. Les paramètres n_i , A et E ont été obtenus expérimentalement par Hautman et al.(1981).

1.2 Modèle de réaction

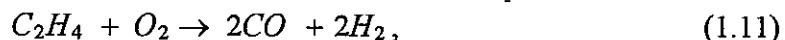
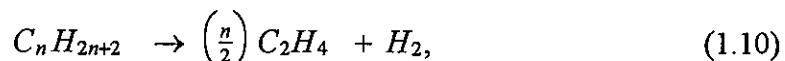
La représentation la plus simple d'une réaction d'oxydation d'un hydrocarbure saturé produit par un modèle simplifié du CO_2 et du H_2O par la réaction suivante:



Cette réaction s'effectue en une seule étape et fait intervenir quatre espèces chimiques. Ceci favorise une modélisation numérique simple mais qui est loin d'être réaliste. En effet, le taux de disparition et de formation des éléments calculé est différent des données expérimentales, et de plus on ne retrouve pas dans ce modèle les éléments intermédiaires qui apparaissent au cours de la réaction, comme l'hydrogène et le monoxyde de carbone. Ainsi ce modèle ne semble pas être constitué un bon point de départ pour la simulation.

Un modèle cinétique développé par Hautman et al. (1981) "*A Multi-Step Overall Kinetic Mechanism for the Oxydation of Hydrocarbons*", décrit la même réaction avec quatre étapes impliquant sept espèces chimiques. La première étape est une dissociation

de l'hydrocarbure en hydrogène et en C_2H_4 . Les trois autres sont des réactions d'oxydation des éléments chimiques intermédiaires. Dans ce modèle on suppose que quels que soient les éléments de la famille C_nH_{2n} , ils seront représentés par l'élément C_2H_4 pendant la réaction. Ainsi on écrit:



Ainsi, la réaction globale est exprimée en une multitude de réactions élémentaires qui permettront de déterminer avec plus de précision les taux de formation ou de consommation des éléments du système. Les éléments intermédiaires qui apparaissent au cours de ces réactions comme par exemple les hydrocarbures de la forme C_nH_{2n} ont été observés par Levinson (1959) et Orr (1963) dans une étude de tube de choc. D'autres éléments ont été observés plus tard dans différents travaux particulièrement par Burcat et al. (1971 et 1972) et par Cook et Williams (1975).

Les taux de réactions correspondants pour les équations (1.10) et (1.13) sont donnés par:

$$\frac{d[C_nH_{2n+2}]}{dt} = -10^x \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) [C_nH_{2n+2}]^a [O_2]^b [C_2H_4]^c, \quad \text{mole/cc-s} \quad (1.14)$$

$$\frac{d[C_2H_4]}{dt} = -10^x \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) [C_2H_4]^a [O_2]^b [C_nH_{2n+2}]^c, \quad \text{mole/cc-s} \quad (1.15)$$

$$\frac{d[CO]}{dt} = \left\{ -10^x \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) [CO]^a [O_2]^b [H_2O]^c \right\} * S_r, \text{ mole/cc-s} \quad (1.16)$$

$$\frac{d[H_2]}{dt} = -10^x \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) [H_2]^a [O_2]^b [C_2H_4]^c \text{ mole/cc-s} \quad (1.17)$$

avec $S_r = 7.93 \exp(-2.48 \phi)$,

où ϕ est la richesse du mélange compris entre 0.12 et 2, S est inférieur à 1 et les termes a, b, c et x varient pour chaque équation (tableau 1.1) avec,

[] : concentration de l'espèce en (mole/cm³),

E_a : énergie d'activation en (cal/mol),

T : température en (K).

Tableau 1.1 Coefficients des termes de transformations

	a	b	c	x	E_a
Eq (1.14)	0.5	1.07	0.4	17.32	49 600
Eq (1.15)	0.9	1.18	-0.37	14.7	50 000
Eq (1.16)	0.85	1.42	-0.56	13.52	41 000
Eq(1.17)	1	0.25	0.5	14.6	40 000

L'ensemble de ces étapes élémentaires constitue le mécanisme de la réaction. Au cours de la combustion, ces étapes élémentaires font intervenir non seulement des molécules stables, mais également des radicaux libres, et de plus ces étapes se succèdent de façon à former des chaînes caractérisées par une régénération continue des radicaux libres. Ceci permet la transformation d'une énorme quantité de réactifs initiaux grâce à un très petit nombre de radicaux libres.

Afin de mettre en évidence l'importance de tenir compte de ces éléments intermédiaires, Hautman (1981) a montré un résultat fort intéressant en mesurant les variations de la température au cours de la réaction. La température du système reste pratiquement constante durant les premières étapes de la réaction, qui se caractérise par le passage des hydrocarbures saturés à un alcène de la forme C_nH_{2n} . En effet, c'est après la disparition de 50 % du carburant dans la réaction que l'on commence à observer une légère variation de la température. C'est le dégagement du CO après la combustion de l'alcène qui va marquer le début de la libération de l'énergie et fait augmenter la température. La réaction d'oxydation du monoxyde de carbone en CO_2 contribue aussi à augmenter la température de la réaction.

Les taux de réactions qu'on a présenté précédemment sont exprimés en moles/cc-secondes, la concentration de chaque espèce chimique est en moles par centimètre cube.

1.3 *Écriture en fraction massique*

Pour pouvoir utiliser les taux de réactions tels que présentés précédemment dans le code de calcul FIDAP, ceux-ci doivent être exprimés en fraction massique par unité de temps. On peut écrire donc :

$$[S_{ei}] = \frac{\rho c_i}{M_i} \quad (1.18)$$

[] : concentration d'espèce chimique (kmole/m³),

ρ : densité du mélange (kg/m³),

c_i : fraction massique de l'espèce i (kg/kg),

M_i : masse molaire de l'espèce i (kg/kmole),

ainsi, pour obtenir les fractions massiques (adimensionnelles) on écrit :

$$c_i = 10^3 \frac{M_i[S_{ei}]}{\rho} \quad (1.19)$$

Le taux de réaction pour la fraction massique i est donné par :

$$\frac{dc_i}{dt} = 10^3 \frac{d[S_{ei}]}{dt} \cdot \frac{M_i}{\rho} \quad (1.20)$$

On peut alors réécrire les expressions de taux de réaction en fonction des expressions (1.18) et (1.19).

1.4 Modification des taux de réactions

Les expressions (1.14-1.16) représentent le taux de consommation ou de disparition d'une espèce chimique. Or, on aura besoin des taux de formation dans les équations de transport, ainsi on écrit :

$$\frac{dc_A}{dt} = -10^{x-3\alpha} \rho^\alpha \frac{M_A^{1-\alpha}}{M_C^b M_B^c} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) [A]^a [C]^b [B]^c \quad (1/s) \quad (1.21)$$

$$\frac{dc_B}{dt} = -10^{x-3\alpha} \rho^\alpha \frac{M_B^{1-\alpha}}{M_C^b M_A^c} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) [B]^a [C]^b [A]^c \quad (1/s) \quad (1.22)$$

$$\frac{dc_D}{dt} = -10^{x-3\alpha} \rho^\alpha \frac{M_D^{1-\alpha}}{M_C^b M_G^c} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) [D]^a [C]^b [G]^c \quad (1/s) \quad (1.23)$$

$$\frac{dc_F}{dt} = -10^{x-3\alpha} \rho^\alpha \frac{M_F^{1-\alpha}}{M_C^b M_B^c} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) [F]^a [C]^b [B]^c \quad (1/s) \quad (1.24)$$

avec $\alpha = a+b+c-1$ et $C_n H_{2n+2} = A$; $C_2 H_4 = B$; $O_2 = C$; $CO = D$; $CO_2 = E$; $H_2 = F$; $H_2 O = G$.

En se basant sur la propriété (1.3), on détermine les taux de formation à partir des équations (1.21-1.24) pour chaque espèce:

$$R_A = \frac{dc_A}{dt} , \quad (1.25)$$

$$R_B = \frac{dc_B}{dt} - \left(\frac{n}{2}\right) \frac{dc_A}{dt} , \quad (1.26)$$

$$R_C = (n-1) \frac{dc_A}{dt} - 2 \frac{dc_B}{dt} + \frac{dc_F}{dt} + \left(\frac{1}{2}\right) \frac{dc_D}{dt} , \quad (1.27)$$

$$R_D = \frac{dc_D}{dt} - 2 \frac{dc_B}{dt} + n \frac{dc_A}{dt} , \quad (1.28)$$

$$R_E = - \frac{dc_D}{dt} + 2 \frac{dc_B}{dt} - n \frac{dc_A}{dt} , \quad (1.29)$$

$$R_F = (n-1) \frac{dc_A}{dt} - 2 \frac{dc_B}{dt} + \frac{dc_F}{dt} , \text{ et} \quad (1.30)$$

$$R_G = (1-n) \frac{dc_A}{dt} + 2 \frac{dc_B}{dt} - \frac{dc_F}{dt} . \quad (1.31)$$

Chaque terme de formation est introduit dans une équation de transport comme étant un terme source. Ainsi on obtient après résolution de chacune de ces équations à une prédiction de l'évolution de chaque espèce au cours de la réaction.

1.5 Les Codes de résolutions

On se propose de résoudre les équations de transport obtenus ainsi que celle du modèle de turbulence par le code de commerce FIDAP. On utilisera les résultats réalisé par le code VF développé à l'École Polytechnique ainsi que des résultats disponible a la littérature pour des fins de comparaison et d'analyse.

1.5.1 Code d'éléments finis (FIDAP)

La résolution dans FIDAP est basée sur la méthode des éléments finis et s'étend pour des simulations d'écoulements compressibles ou incompressibles ainsi qu'a la résolution d'équations de transport d'espèces avec réaction chimique. Le transfert de chaleur dans le milieu fluide ou solide est inclus dans la résolution. Les fluides sont considérés monophasiques ou diphasiques dans des régimes d'écoulements turbulent ou laminaire. On peut résoudre jusqu'à 15 équations de transport pour la modélisation de réactions chimiques exothermiques ou endothermiques. Les simulations sont réalisées dans le cas stationnaire ou transitoire avec des géométries axisymétriques, bidimensionnelles ou en trois dimensions.

1.5.2 Code de volumes finis (VF)

Le code à été développé pour la simulation des écoulements turbulents ou réactifs. La technique de discréétisation utilisée est celle des volumes finis sur des géométries bidimensionnelles ou axisymétrique avec des maillages non structurés.

CHAPITRE II

Equations d'écoulement

Dans beaucoup d'applications pratiques, la combustion se propage dans les fluides qui se trouvent en régime turbulent plus ou moins prononcé, et ces conditions aérodynamiques ont une influence très caractéristique sur le mode de propagation de la flamme. Bien que cette influence s'exerce aussi bien sur les flammes de prémélange que sur les flammes de diffusion (où elle contrôle le mélange des réactifs), on se limitera ici à l'examen de ces dernières. Actuellement, malgré le grand nombre d'études consacrées à ce sujet, la connaissance de l'interaction réciproque entre la combustion et la turbulence ne fait pas encore l'unanimité. La complexité des paramètres aérodynamiques et le manque de méthodes expérimentales suffisamment précises sont les raisons majeures de cette carence.

Ce chapitre comporte cinq sections qui présentent une description des modèles de turbulence avec les équations de base et les conditions frontières correspondantes pour un écoulement réactif. La dernière section est dédiée au traitement de l'interaction entre la turbulence et la combustion dans le cas de flammes de diffusion.

2.1 Équations moyennes de conservation

En raison du caractère aléatoire des grandeurs caractéristiques $f(x, t)$ représentant les écoulements turbulents on effectue un traitement statistique à plus grande échelle. Il y a deux façons pour traiter le problème. La première méthode consiste en une décomposition de chaque grandeur aléatoire caractéristique f en une partie moyenne \tilde{f} et une partie fluctuante f'' , soit:

$$f = \tilde{f} + f'', \quad (2.1)$$

avec

$$\tilde{f} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} f dt \quad (2.2)$$

La deuxième méthode proposée par Favre (1969) utilise des moyennes pondérées par la masse définies d'après les relations suivantes :

$$f = \bar{f} + f', \quad (2.3)$$

avec:

$$\bar{f} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \frac{\rho f}{\bar{\rho}} dt. \quad (2.4)$$

Dans le cas d'écoulement à densité variable, on choisit souvent la deuxième méthode dont l'interprétation physique est souvent plus directe et les équations sont plus simples.

Les équations de conservation (sous forme tensorielle) pour un écoulement à nombre de Reynolds élevé avec la moyenne pondérée par la masse sont selon (Khalil, 1982) :

l'équation de continuité

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.5)$$

l'équation de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho} \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tilde{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j) = - \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\tilde{\rho} \overline{u'_i u'_j}) + \tilde{\rho} g, \quad (2.6)$$

où

$$\bar{\sigma}_{ij} = \bar{P} \delta_{ij} - \mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \delta_{ij}, \quad (2.7)$$

g étant l'accélération gravitationnelle

l'équation de transport

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho} \Phi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\tilde{\rho} \bar{u}_i \Phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i}(\tilde{\rho} \overline{u'_i \Phi'}) + \tilde{\rho} \bar{S}(\Phi). \quad (2.8)$$

L'écriture statistique de ces équations soulève déjà un problème pour la résolution. En effet, les termes non linéaires de ces équations font apparaître des corrélations inconnues suite à l'application de la moyenne sur chacune de ces fonctions. L'équation de transport montre que, du à la non-linéarité des termes de variations locales de transport, les opérations de moyennes font apparaître des corrélations de la forme $\rho \overline{u'_i u'_j}$ et $\rho \overline{u'_i \Phi'}$. Ces corrélations représentent la variation de quantité de mouvement et le transport de la fonction scalaire Φ . Ceci conduit à ce qu'on appelle un *système ouvert* (le nombre d'équations est inférieur au nombre de variables). Il convient donc d'établir des équations supplémentaires pour déterminer ces termes de turbulence, en vue de fermer le système.

2.2 Les modèles de turbulence

Il existe des modèles de turbulence de différents niveaux. On peut classer les modèles les plus couramment utilisés en deux grandes catégories:

- Les modèles de viscosité turbulente,
- Les modèles de tensions de Reynolds.

Les modèles basés sur l'hypothèse de viscosité turbulente de Boussinesq sont ceux classés en fonction du nombre d'équations différentielles additionnelles qu'il faut résoudre en plus des équations régissant l'écoulement moyen. On distingue donc:

- le modèle à zéro équation,
- le modèle à une équation,
- le modèle à deux équations.

Les modèles de viscosité turbulente sont basés sur le concept de viscosité turbulente qui pose la proportionnalité entre le gradient de vitesse du champ moyen et les tensions de Reynolds:

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{3}{2} \rho k \delta_{ij} , \quad (2.9)$$

avec μ_t la viscosité dynamique turbulente.

Ce concept n'a pas de bases mathématiques, il est construit par analogie avec la loi de comportement qui relie les contraintes aux déformations. La viscosité moléculaire est une propriété intrinsèque du fluide, la turbulence est une propriété de l'écoulement.

2.2.1 Modèles à zéro équation

Il s'agit du modèle basé sur la longueur de mélange, parmi les plus utilisés on trouve ceux proposés par Cebeci-Smith (1974), Baldwin-Lomax (1978) et Johnson-King (1985). Le premier modèle cité, détermine la viscosité turbulente à partir de la connaissance de l'épaisseur de la couche limite ce qui restreint son utilisation dans les codes de résolution des équations de Navier-Stokes, puisqu'on ne connaît pas à priori cette épaisseur.

Le modèle de Baldwin-Lomax a été dérivé à partir du modèle de Cebeci-Smith, il décompose la couche en deux parties: la couche interne et la couche externe pour lesquelles le calcul de la viscosité turbulente est différent. Dans la couche interne, le modèle de Cebeci-Smith est utilisé cependant mais la valeur de μ_t , dans la couche externe est obtenue à partir d'une expression où l'épaisseur de la couche n'intervient pas. On a donc pour ce modèle:

$$\mu_t = \begin{cases} (\mu_t)_{interne} & \text{si } y < y_{limite} \\ (\mu_t)_{externe} & \text{si } y > y_{limite} \end{cases},$$

avec y_{limite} étant la distance à partir de la paroi pour laquelle les deux valeurs de μ_t calculées sont égales.

Cette modélisation a été développée initialement pour le calcul des couches limites en régime compressible avec des codes de différences finies. Le même approche a aussi été très utilisé pour des écoulements incompressibles, mais essentiellement avec des maillages structurés. Dans le cadre de maillages non-structurés sa mise en oeuvre est plus délicate.

2.2.2 Modèles à une équation

Pour tenir compte du transport et de l'historique (ou effet de mémoire) de la turbulence, des modèles ont été développés. Ils résolvent les équations différentielles de transport des quantités turbulentes. Le plus simple comprend une seule équation de transport pour une échelle de vitesse caractéristique de la turbulence. La quantité physique la mieux représentative est $(k)^{1/2}$

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} . \quad (2.10)$$

L'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente, k , peut être obtenue en dérivant les équations de Navier-Stokes. La viscosité turbulente est donnée alors par analyse dimensionnelle (relation de Kolmogorov-Prandtl):

$$\mu_t = \rho C_{\mu_1} l \sqrt{k} , \quad (2.11)$$

avec : l échelle de longueur et C_{μ_1} une constante.

L'échelle de longueur est donnée algébriquement, elle dépend donc de l'écoulement. Il est difficile de déterminer de façon empirique cette échelle pour des écoulements complexes avec décollement ou avec effet de courbures.

Le modèle à une équation n'est pas très employé car il ne permet pas d'obtenir des résultats sensiblement supérieurs à ceux issus des modèles à zéro équation. Cette méthode a été supplantée par des schémas de turbulence à deux équations qui déterminent l'échelle de longueur en résolvant une deuxième équation de transport.

2.2.3 Modèles à deux équations

Actuellement ce sont les modèles les plus répandus. Il en existe de plusieurs types: $k-\omega$, $k-\varepsilon$. Les liens entre les propriétés turbulentes sont établis par les relations

$$\frac{dkl}{kl} = \frac{5}{2} \frac{dk}{k} - \frac{d\varepsilon}{\varepsilon}, \quad \text{et} \quad (2.12)$$

$$\frac{d\omega}{\omega} = -2 \frac{dk}{k} + 2 \frac{d\varepsilon}{\varepsilon}. \quad (2.13)$$

On s'intéresse ici au modèle $k-\varepsilon$ (Launder et Spalding, 1974) qui est le plus employé. Ce modèle est basé sur l'hypothèse de viscosité turbulente, celle-ci est évaluée à partir de l'énergie cinétique turbulente, k , et le taux de dissipation, ε , comme suit:

$$v_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (2.14)$$

Le taux de dissipation visqueuse de l'énergie cinétique turbulente est défini par :

$$\varepsilon = C_d \frac{k^{3/2}}{l}. \quad (2.15)$$

On doit résoudre deux équations différentielles, l'une pour k , l'autre pour ε , et qui seront représentés dans la section suivante.

2.2.4 Modèles algébriques des tensions de Reynolds

Pour des écoulements simples, le concept de viscosité turbulente constitue un bon lien entre la nature stochastique des fluctuations et l'écoulement moyen. Mais pour les écoulements tridimensionnels, le tenseur de Reynolds et le tenseur des contraintes moyennes ne sont pas toujours alignés, la notion de viscosité turbulente conduit à des

simulations irréalistes. C'est pourquoi des modèles de turbulence plus complexes ont été développés. Ces modèles sont directement basés sur les équations des tensions de Reynolds.

Le modèle des tensions de Reynolds complet comprend une équation différentielle partielle de transport pour chaque composante du tenseur, ce qui représente un nombre important d'équations à résoudre. Ainsi, des modèles intermédiaires ont été développés.

Les termes qui donnent aux équations leur caractère différentiel sont les termes de diffusion et de convection. Rodi a proposé de relier ces termes à des équations connues en supposant que le transport des tensions de Reynolds est proportionnel au transport de l'énergie cinétique turbulente, k .

Ce modèle s'assimile à un modèle $k-\varepsilon$ étendu, en effet les relations algébriques des tensions de Reynolds correspondent en principe aux formulations de viscosité turbulente. Ainsi, ce schéma ne convient pas pour des écoulements avec gradiant-adverse. Une façon de supprimer les instabilités numériques consiste à utiliser ce modèle pour modifier la variable C_μ dans le modèle $k-\varepsilon$. On perd alors l'avantage d'utiliser un modèle sans hypothèse de viscosité turbulente, en contre partie les effets de courbure et de rotation sont pris en compte directement dans le modèle, sans qu'il soit nécessaire d'apporter des corrections intuitives supplémentaires.

Plusieurs auteurs considèrent que le domaine d'application des modèles de tensions de Reynolds algébriques est limité car ces modèles font l'hypothèse qu'il existe un équilibre entre la convection et la diffusion des tensions de Reynolds, ils ne peuvent donc pas conduire à des résultats satisfaisants pour les écoulements cisailés libres. Ce type de

traitement n'est pas conseillé pour les écoulements en rotation ou dans toutes les situations où les effets de transport sont importants.

2.3 Équations de bilan

Les équations de bilan sont écrites sous forme conservative pour la masse totale, les composantes de la quantité de mouvement, l'enthalpie et la fraction massique de chaque espèce chimique. Pour les écoulements turbulents, on utilise la moyenne de Favre afin d'éviter les corrélations avec la masse volumique. On obtient alors, dans le cas turbulent, avec des coordonnées cylindriques (Khalil (1975)):

équation de continuité

$$\frac{\partial}{\partial x} (r \tilde{\rho} \bar{u}) + \frac{\partial}{\partial r} (r \tilde{\rho} \bar{v}) = 0, \quad (2.16)$$

équation de mouvement axial

$$\frac{\partial}{\partial x} (r \tilde{\rho} \bar{u} \cdot \bar{u}) + \frac{\partial}{\partial r} (r \tilde{\rho} \bar{v} \cdot \bar{u}) = \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) \quad (2.17)$$

$$+ \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) - r \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x},$$

équation de mouvement radial

$$\frac{\partial}{\partial x} (r \tilde{\rho} \bar{u} \cdot \bar{v}) + \frac{\partial}{\partial r} (r \tilde{\rho} \bar{v} \cdot \bar{v}) = \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) \quad (2.18)$$

$$+ \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)$$

$$-\frac{\partial \tilde{P}}{\partial r} - 2\mu_{eff}\frac{\bar{v}}{r^2} + \frac{\tilde{\rho} \bar{V}_\theta^2}{r},$$

vitesse tangentielle

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \tilde{\rho} \bar{u} \cdot r \bar{V}_\theta \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \tilde{\rho} \bar{v} \cdot r \bar{V}_\theta \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial r \bar{V}_\theta}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial r \bar{V}_\theta}{\partial r} \right) \\ &\quad - 2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu_{eff} r \bar{V}_\theta \right), \end{aligned} \quad (2.19)$$

équation de transport de l'enthalpie

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(r \tilde{\rho} \bar{u} \cdot \bar{h} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \tilde{\rho} \bar{v} \cdot \bar{h} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_h} \frac{\partial \bar{h}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_h} \frac{\partial \bar{h}}{\partial r} \right) + S_h \quad (2.20)$$

où $S_h = 0$ si on néglige le transfert de chaleur par rayonnement,

équation d'énergie cinétique de turbulence

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \tilde{\rho} \bar{u} \cdot \bar{k} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \tilde{\rho} \bar{v} \cdot \bar{k} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial \bar{k}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial \bar{k}}{\partial r} \right) \\ &\quad + r (G_k - \tilde{\rho} \bar{\varepsilon}), \end{aligned} \quad (2.21)$$

équation de dissipation

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(r \tilde{\rho} \bar{u} \cdot \bar{\varepsilon} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \tilde{\rho} \bar{v} \cdot \bar{\varepsilon} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial r} \right) \\ &\quad + r \frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{k}} (c_1 G_k - c_2 \tilde{\rho} \bar{\varepsilon}), \end{aligned} \quad (2.22)$$

où

$$G_k = \mu_{eff} \left[2 \left(\left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) + \left(\frac{\partial \bar{V}_\theta}{\partial x} \right)^2 + \left(r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\bar{V}_\theta}{r} \right) \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)^2 \right],$$

les viscosité efficace et turbulente sont données par :

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad \text{et} \quad \mu_t = c_d \tilde{\rho} \frac{\bar{k}^2}{\bar{\varepsilon}}, \quad (2.23)$$

et les constantes du modèle de turbulence sont :

$$\sigma_\kappa = 0.9, \quad \sigma_\varepsilon = 1.3, \quad c_1 = 1.44, \quad c_2 = 1.92, \quad c_d = 0.09.$$

Ces coefficients sont des constantes; ils ont cependant, été déterminés pour des écoulements homogènes simples sans force volumique. Dans le cas d'écoulements fortement marqués par les "inhomogénéités" ou par les forces volumiques, ces coefficients doivent être modifiés.

2.3.1 Principe de conservation d'espèce

L'équation différentielle de conservation de la masse exprime l'équilibre entre le taux d'accumulation de la masse dans un volume élémentaire et le taux de masse évacuée de cet élément. La réaction chimique qui modifie la structure moléculaire et atomique de ces éléments n'intervient pas à la création ou à la destruction de la masse. En effet l'équation (2.24) s'applique avec une réaction chimique combinée avec une ou plusieurs réactions de transport. Ce résultat se confirme d'une façon mathématique à partir de la définition même des vitesses de diffusion qui sont les vitesses respectives à la vitesse de la masse moyenne de fluide et sont données par $\left(\sum_{i=1}^N \rho c_i V_i \right) = 0$.

Dans un écoulement à plusieurs espèces chimiques on détermine la concentration de la $N^{\text{ème}}$ espèce chimique grâce au principe de conservation par :

$$c_N = 1 - \sum_{i=1}^{N-1} c_i, \quad (2.24)$$

ce qui ramène ainsi à résoudre $N-1$ équations de transport pour un mélange contenant N espèces chimiques.

2.3.2 Nombres adimensionnels

L'écriture adimensionnelle des équations globales fait apparaître dans le cas de l'équation de quantité de mouvement les forces de pression, de masse, et visqueuse qui sont calculées respectivement par le nombre de Mach, le nombre de Froude et le nombre de Reynolds. L'équation d'énergie, par contre, contient trois types d'énergie différente:

- énergie thermique donnée par $\int c_p dt$,
- énergie chimique de la forme $\sum_{i=1}^N h_i c_i$,
- énergie cinétique donnée par $(\gamma - 1/\gamma) Ma^2 (v^2 / 2)$.

Où h_i est l'enthalpie de formation par unité de masse pour une espèce i à la température T_0 , Ma : nombre de Mach avec $\gamma = c_p / c_v$. Ainsi, pour mesurer l'intensité des effets de diffusion (dans ce cas la conduction de chaleur), on calcul le nombre de Peclet donné par le produit des nombres de Prandtl et de Reynolds. Finalement, l'équation de conservation d'espèce chimique exprime le bilan entre l'accumulation, la convection (ou advection), la

diffusion et la production dans le mélange d'espèces en réaction dans un élément de volume.

2.3.3 Équation d'état

Afin de déterminer les variations de la densité dans l'écoulement, on distingue deux approches. La première considère le mélange des espèces comme un gaz parfait, l'équation d'état s'écrit alors:

$$\rho = \frac{M_i p}{RT \left[1 + \sum_{i=1}^{N-1} \left(\frac{M_i}{M_{i-1}} \right) c_i \right]} , \quad (2.25)$$

p : la pression absolue,

c_i : fraction massique de l'espèce i ,

M_i : masse molaire de l'espèce i .

La deuxième forme est représentée par:

$$\rho = \rho_0 [1 - \beta_T (T - T_0)] \prod_{i=1}^{N-1} (1 - \beta_{ci} c_i) \quad (2.26)$$

Notons qu'il existe une similarité entre les équations (2.25) et (2.26) pour la détermination de la densité. La différence fondamentale est le terme de pression dans la première forme. De plus dans l'équation (2.26) on a pas besoin de considérer une température absolue (il suffit de considérer une température de perturbation autour d'une valeur de référence).

2.4 Conditions aux frontières

Dans le cas des écoulements à deux dimensions et axisymétriques on fixe les conditions frontières sur chaque segment du domaine Ω (figure 2.1), on distingue quatre différents types de frontières, l'entrée, la sortie, les parois solides et l'axe de symétrie.



Figure 2.1 Domaine d'intégration

2.4.1 Conditions frontières à l'entrée

Les valeurs de la vitesse, de la température et de la fonction scalaire sont fixées à l'entrée par

$$\begin{aligned} u_i &= \bar{u}_i(s, t), \\ T &= \bar{T}(s, t), \\ \Phi &= \bar{\Phi}(s, t). \end{aligned} \tag{2.27}$$

Les valeurs caractéristiques de k et ε à l'entrée sont obtenues à partir des données expérimentales ou bien calculées en fonction de la vitesse à l'entrée c'est à dire:

$$k = \alpha u_{\text{entrée}}^2, \tag{2.28}$$

où α est un terme adimensionnel.

Dans le cas où on dispose des valeurs expérimentales de l'intensité turbulente I , définie par :

$$I = \frac{\left(\overline{u'^2}\right)^{\frac{1}{2}}}{u_{\text{entrée}}}, \quad (2.29)$$

les valeur de k et ε s'expriment par :

$$k = 1.5(Iu_{\text{entrée}})^2, \text{ et} \quad (2.30)$$

$$\varepsilon = \frac{k^{\frac{3}{2}}}{0.1\delta}, \quad (2.31)$$

δ : distance à l'entrée qui varie suivant la géométrie et la nature du problème.

2.4.2 Conditions frontières à la sortie

On suppose que le domaine est suffisamment long pour que le gradient d'une variable Φ dans la direction du courant s'annule,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial s} = 0, \quad (2.32)$$

avec s la direction moyenne de l'écoulement donnée par le vecteur vitesse moyen.

2.4.3 Conditions frontières sur les parois

Les parois sont adiabatiques et les espèces ne les traversent pas, les composantes de la vitesse sont nulles :

$$u_i = 0, \quad (2.33)$$

et pour chaque fonction Φ

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n} = 0. \quad (2.34)$$

2.4.4 Flux de chaleur et de masse

Les conditions frontières reliées à l'équation de mouvement s'expriment par la vitesse ou la contrainte normale

$$\sigma_i = \sigma_{ij} n_j(s, t) = \sigma_i(s, t), \quad (2.35)$$

où $n_j(s)$ est un vecteur unitaire normal à la surface.

Les conditions frontières reliées à l'équation de transport s'expriment aussi par la fonction scalaire Φ ou par le flux massique :

$$q_m = - \left(\rho \alpha_{ij} \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \right) n_j(s) = \bar{q}_m(s, t). \quad (2.36)$$

Dans le cas d'un écoulement non adiabatique sur les parois, le flux de chaleur varie en fonction du gradient de température et s'exprime par :

$$q = - \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) n_j(s), \quad (2.37)$$

ainsi, en présence de chaleur par convection ou par radiation l'expression du flux devient :

$$q = q_c(s, t) + q_r(s, t), \quad (2.38)$$

$$q_c = h_c(T - T_c) , \quad q_r = h_r(T - T_r) , \quad (2.39)$$

$$\text{avec } h_r = eS(T^2 + T_r^2)(T + T_r) . \quad (2.40)$$

où e est l'émissivité et S la constante de Stefan-Boltzmann.

2.4.5 Loi de la paroi

Le modèle k- ε pose un problème lorsqu'il s'agit de résoudre les équations d'écoulement à proximité de la paroi où les effets visqueux deviennent importants. Le nombre de Reynolds local est très petit et ainsi le transport moléculaire devient prépondérant. Pour pallier cette difficulté sans raffiner le maillage d'une manière excessive, ce qui augmente le nombre de noeuds donc le temps de résolution, on relie l'ensemble de la couche pariétale à la zone pleinement turbulente grâce à des lois de parois. Ces lois permettent de contourner le problème malgré qu'elles font intervenir un nombre considérable d'hypothèses. On considère que près de la paroi l'écoulement est parallèle à celle-ci, on introduit alors les quantités suivantes : τ_w et u_* qui sont respectivement la contrainte de cisaillement et la vitesse de frottement. Ces deux quantités sont reliées par :

$$u_* = \left(\frac{\tau_w}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} . \quad (2.41)$$

On suppose alors que près de la paroi la contrainte de cisaillement, τ , le flux de chaleur, q , et le flux de masse, m , sont constants et égaux aux valeurs correspondantes à la paroi (τ_w , q_w et m_w). Par conséquent on peut montrer que les variables adimensionnelles de la vitesse u^+ , de la température T^+ et de transport Φ^+ sont fonctions de la variable y^+ (terme adimensionnel de la distance). Ce dernier s'exprime par :

$$y^+ = \frac{\rho u_* \delta}{\mu} . \quad (2.42)$$

Les expressions des variables u^+ , T^+ , et Φ^+ sont données par:

$$u^+ = \frac{(u - u_w)}{u_*} = f_u(y^+),$$

$$T^+ = \frac{\rho c_p (T_w - T) u_*}{q_w} = f_T(y^+, \text{Pr}, \sigma_t), \quad (2.43)$$

$$\Phi^+ = \frac{\rho (\Phi_w - \Phi)}{m_w} = f_\Phi(y^+, \text{Sc}, S_t),$$

Pr et Sc : nombres laminaires de Prandtl et de Schmidt

σ_t et S_t : nombres turbulents de Prandtl et de Schmidt

δ : distance normale à la paroi.

Les fonctions disponibles pour représenter ces variables sont multiples dans la littérature, particulièrement pour la vitesse soit $f_u(y^+)$. D'une manière générale on divise la région proche de la paroi en deux couches, une sous-couche laminaire où les effets visqueux sont prépondérants et la vitesse est linéaire, donc:

$$u^+ = y^+ , \quad y^+ < 5, \quad (2.44)$$

et une sous-couche turbulente où la vitesse est logarithmique

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+) ; \quad y^+ > 30, \quad (2.45)$$

avec: κ : constante de Von Karman égale à 0.41

E : constante égale à 0.9.

La zone de transition correspond à y^+ comprise entre cinq et trente. La fonction f est donnée ainsi par la loi de Reichardt:

$$u^+ = f_R(y^+) = \frac{1}{\kappa} \ln(1 + \kappa y^+) + 7.8 \left[1 - \exp\left(\frac{y^+}{11}\right) - \frac{y^+}{11} \exp(-0.33 y^+) \right]. \quad (2.46)$$

Toutefois, il est difficile d'établir des fonctions détaillées pour la température et la fonction de transport. Cependant on utilise des fonctions semi-empiriques de la forme:

$$T^+ = f_T(y^+, \Pr, \sigma_t) = \Pr u^+ D_T + \sigma_t (1 - D_T)(u^+ + P_T), \quad (2.47)$$

$$\Phi^+ = f_\Phi(y^+, Sc, S_t) = Sc u^+ D_\Phi + S_t (1 - D_\Phi)(u^+ + P_\Phi), \quad (2.48)$$

avec $D_\theta = \exp\left(-\frac{y^+}{11} R_\theta^a\right) \quad : \quad a = \begin{cases} 1.1 & \text{pour } R_\theta < 0.1 \\ 0.333 & \text{pour } R_\theta \geq 0.1 \end{cases}$

$$R_\theta = \frac{\Pr}{\sigma_t} \text{ pour } \theta \equiv T \quad \text{et} \quad R_\theta = \frac{Sc}{S_t} \text{ pour } \theta \equiv \Phi.$$

Ainsi, la résolution du problème à proximité de la paroi nécessite une attention particulière afin de satisfaire aux hypothèses et aux conditions établies. On reviendra dans le chapitre III sur la démarche à suivre lors de la discréétisation du domaine.

2.5 Écriture moyenne des termes sources

On considère une équation de réaction élémentaire simple de la forme :

$$S_{e1} + S_{e2} \rightarrow S_{e3}, \quad (2.49)$$

et dont le taux de réaction de l'élément S_{e3} s'écrit sous la forme;

$$\frac{dS_{e3}}{dt} = K(T) [S_{e1}] [S_{e2}]. \quad (2.50)$$

Afin de déterminer l'effet de la turbulence sur la cinétique de la réaction, on écrit chacune des variables $C_{S_{e1}}$, $C_{S_{e2}}$, $C_{S_{e3}}$ et K comme étant la somme d'un terme moyen et un terme de fluctuation, en remplaçant chaque terme de concentration en fraction massique, l'équation (2.50) devient:

$$\frac{d(\bar{C}_{S_{e3}} + C'_{S_{e3}})}{dt} = (K + K')(\bar{C}_{S_{e1}} + C'_{S_{e1}}) (\bar{C}_{S_{e2}} + C'_{S_{e2}}), \quad (2.51)$$

ou encore, en faisant apparaître les termes de fluctuations,

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{C}_{S_{e3}}}{dt} + \frac{dC'_{S_{e3}}}{dt} &= \bar{K} \bar{C}_{S_{e1}} \bar{C}_{S_{e2}} \\ &\left(1 + \frac{C'_{S_{e1}}}{\bar{C}_{S_{e1}}} + \frac{C'_{S_{e2}}}{\bar{C}_{S_{e2}}} + \frac{\bar{C}_{S_{e1}} C'_{S_{e2}}}{\bar{C}_{S_{e1}} \bar{C}_{S_{e2}}} + \frac{K'}{\bar{K}} + \frac{K' C'_{S_{e1}}}{\bar{K} \bar{C}_{S_{e1}}} + \frac{K' C'_{S_{e2}}}{\bar{K} \bar{C}_{S_{e2}}} + \frac{K' C'_{S_{e1}} C'_{S_{e2}}}{\bar{K} \bar{C}_{S_{e1}} \bar{C}_{S_{e2}}} \right) \end{aligned} \quad (2.52)$$

En moyennant dans le temps l'équation (2.52)

$$\frac{d\bar{C}_{S_{e1}}}{dt} = \bar{K} \bar{C}_{S_{e1}} \bar{C}_{S_{e2}} \left(1 + \underbrace{\frac{C'_{S_{e1}} C'_{S_{e2}}}{\bar{C}_{S_{e1}} \bar{C}_{S_{e2}}} + \frac{K' C'_{S_{e1}}}{\bar{K} \bar{C}_{S_{e1}}} + \frac{K' C'_{S_{e2}}}{\bar{K} \bar{C}_{S_{e2}}} + \frac{K' C'_{S_{e1}} C'_{S_{e2}}}{\bar{K} \bar{C}_{S_{e1}} \bar{C}_{S_{e2}}}}_{\text{termes de fluctuations}} \right) \quad (2.53)$$

Par conséquent, la moyenne du taux de production de l'espèce S_{e3} n'est pas nécessairement égale au produit de la moyenne de la constante de réaction et des moyennes de concentrations des réactifs. Toutefois, en se basant sur des données expérimentales Hautman (1980) a déterminé que les termes de fluctuation dans l'équation (2.53) sont de l'ordre de $O(10^{-2})$. De plus, la moyenne de la constante de réaction n'est pas

fonction de la température moyenne, ainsi pour n égal à zéro, on remplace la température par son expression statistique dans l'équation (1.5). La moyenne du développement en série de Taylor de la fonction k autour de la valeur \bar{T} :

$$\begin{aligned} \bar{K} = & A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \left[1 + \left(\frac{E}{RT} \left(\frac{E}{2RT} - 1 \right) \frac{\bar{T}' T'}{\bar{T}^2} \right) \right] \\ & + \left[\left(\frac{E}{RT} \left(\left(\frac{E}{6RT} \right)^2 - \frac{E}{2RT} + 1 \right) \frac{\bar{T}' T' T'}{\bar{T}^3} \right) + \dots \right]. \end{aligned} \quad (2.54)$$

L'évaluation expérimentale des termes entre crochets donne un ordre de grandeur respectif de $O(10^{-1})$ et $O(10^3)$ soit un ordre global de $O(10^{-1})$. Expérimentalement les valeurs varient autour de 3.10^4 (cal/mol) pour l'énergie d'activation et 1100 K pour la température moyenne, les fluctuations de la température sont de l'ordre de 55K. Mais Khalil (1981) a estimé que les termes de fluctuations peuvent atteindre une valeur égale à cinq et se rendre jusqu'à 40 pour des valeurs expérimentales du rapport E/R de l'ordre de 6700 pour une température moyenne de 1500 K.

Bien que les valeurs moyennes permettent d'évaluer les taux de réaction moyens pour des conditions expérimentales particulières, ceci ne nous permet pas de confirmer que le taux de réaction moyen est égal au taux calculé à partir du produit des moyennes ou encore,

$$\bar{R}_{S_{e3}}(C_{S_{e3}}) \neq R_{S_{e3}}(\bar{C}_{S_{e3}}). \quad (2.55)$$

Il faut ajouter que les termes de formation qu'on introduit dans les équations de transport font intervenir la densité, ce qui rend la fonction $K(T)$ extrêmement non linéaire et risque d'induire des erreurs considérables lors de la résolution. D'un autre côté l'écriture

en série de Taylor de la fonction exponentielle dans l'équation d'Arrhenius risque de causer des divergences à de hautes températures.

2.6 Approches de la combustion turbulente

L'étude des flammes de diffusion turbulentes s'intéresse à l'influence de la turbulence sur la combustion. Dans cette approche on considère que le combustible et l'oxydant entrent dans la région de combustion dans différentes lignes de courant et brûlent au cours du mélange. Les variations que l'on a besoin de connaître sont les taux de réactifs consommés ou les taux de chaleurs dégagées. On calcule alors les termes moyens de fluctuation et les profils de température de ces quantités au cours de la combustion.

Du point de vue de l'application à la combustion turbulente, il est utile de considérer le caractère diffus des fluctuations turbulentes. Dans ce cas, on fait d'ordinaire la comparaison avec la diffusion moléculaire, cette comparaison est pratique et utile, à condition de se souvenir de ses limites. Dans un gaz au repos, ou en écoulement laminaire, on peut considérer des propriétés telles que la diffusion ou la conductivité de chaleur, qui résultent des mouvements des molécules. De la même façon, pour un écoulement gazeux turbulent (avec abstraction des fluctuations turbulentes), on considère que l'écoulement moyen est un écoulement laminaire sur lequel sont superposés une partie tourbillonnaires. Cependant il s'agit d'une analogie, c'est-à-dire qu'à côté de cette ressemblance entre les propriétés moléculaires et les propriétés "tourbillonnaires", il existe une différence fondamentale. En effet, les fluctuations turbulentes sont fortement déterminées par l'écoulement moyen tandis que les mouvements moléculaires, de même que la viscosité et la diffusion moléculaire en sont totalement indépendants.

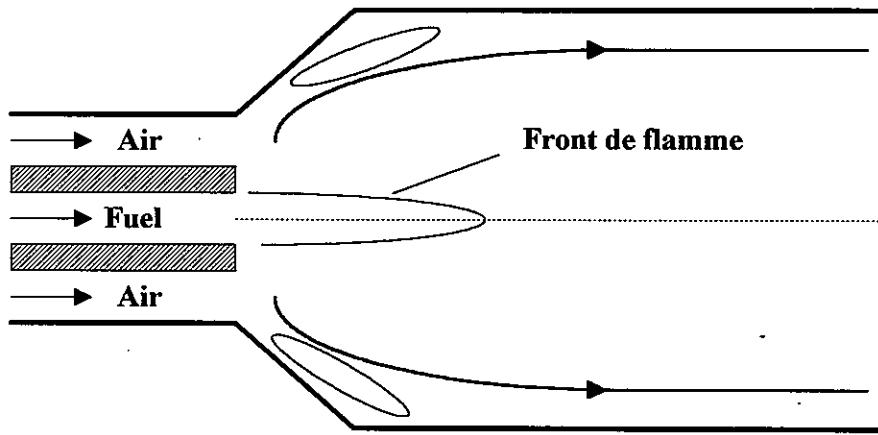


Figure 2.2 Déscription du problème

Dans la plupart des applications de la combustion turbulente, la turbulence qui existe à froid (dans un écoulement sans réaction de combustion) n'est ni homogène ni isotrope. En d'autres termes l'intensité de la turbulence I définie par:

$$I = \frac{\sqrt{\overline{u_x^2}}}{V}, \quad (2.56)$$

est différente en tout point de l'espace considéré. Les valeurs quadratiques moyennes, qu'on désigne ordinairement par "composantes de l'intensité de turbulence" sont différentes, c'est à dire:

$$\sqrt{\overline{u_x^2}} \neq \sqrt{\overline{u_y^2}}. \quad (2.57)$$

Ceci rend la caractérisation du champ de turbulence particulièrement laborieuse et l'étude de l'interaction entre la turbulence et la combustion difficile. En plus dès que la combustion

s'installe dans ce champ de turbulence complexe, la variation de la température et de la viscosité des gaz (grandeurs qui fluctuent elles aussi) vient compliquer encore la situation.

CHAPITRE III

Méthodes numériques

La résolution par la méthode des éléments finis du système d'équations différentielles consiste à chercher une solution approchée comme combinaison linéaire d'un nombre fini de fonctions élémentaires. Ceci consiste en une approximation des formes faibles des équations différentielles. On subdivise le domaine en un nombre de régions simples qu'on appelle éléments. Les variables sont approchées ainsi au niveau de chaque élément, par une combinaison linéaire de fonctions d'interpolation.

3.1 *Discrétisation des équations*

On divise la région de calcul en différents éléments afin d'interpoler les variables de l'écoulement u_i , p , T , k et ϵ en termes de valeurs à déterminer dans l'ensemble des noeuds du domaine. Les variables du système sont représentées par les approximations suivantes

$$u_i(x, t) = \Phi^T \mathbf{U}(t), \quad (3.1)$$

$$p(x, t) = \Psi^T \mathbf{P}(t), \quad (3.2)$$

$$T(x, t) = \vartheta^T \mathbf{T}(t), \quad (3.3)$$

$$k(x, t) = \zeta^T \mathbf{K}(t), \quad \text{et} \quad (3.4)$$

$$\varepsilon(x, t) = \xi^T \mathbf{E}(t), \quad (3.5)$$

où \mathbf{U} , \mathbf{P} , \mathbf{T} , \mathbf{K} et \mathbf{E} sont des vecteurs colonnes qui contiennent les variables à déterminer et φ , ϑ , ψ , ζ et ξ sont les fonctions d'interpolation. On remplace ensuite les variables respectives dans les équations d'écoulement et ainsi on obtient le système d'équations algébriques discrètes suivant:

équation de mouvement

$$f_1(\varphi, \psi, \vartheta, \mathbf{U}_i, \mathbf{P}, \mathbf{T}) = \mathbf{R}_1, \quad (3.6)$$

équation de conservation de la masse

$$f_2(\varphi, \mathbf{U}_i) = \mathbf{R}_2, \quad (3.7)$$

équation d'énergie

$$f_3(\varphi, \vartheta, \mathbf{U}, \mathbf{T}) = \mathbf{R}_3, \quad (3.8)$$

équation d'énergie cinétique turbulente

$$f_4(\vartheta, \zeta, \xi, \mathbf{U}_i, \mathbf{K}, \mathbf{E}) = \mathbf{R}_4, \quad (3.9)$$

équation de dissipation

$$f_5(\vartheta, \zeta, \xi, \mathbf{U}_i, \mathbf{K}, \mathbf{E}) = \mathbf{R}_5, \quad (3.10)$$

les termes \mathbf{R}_1 , \mathbf{R}_2 , \mathbf{R}_3 , \mathbf{R}_4 et \mathbf{R}_5 sont des résidus résultants de l'approximation. La méthode de Galerkin consiste à réduire ces quantités à zéro, on écrit que les fonctions d'interpolation et les résidus sont orthogonaux pour chacune des équations, soit :

$$(f_1, \varphi) = (\mathbf{R}_1, \varphi) = 0, \quad (3.11)$$

$$(f_2, \psi) = (\mathbf{R}_2, \psi) = 0, \quad (3.12)$$

$$(f_3, \vartheta) = (\mathbf{R}_3, \vartheta) = 0, \quad (3.13)$$

$$(f_4, \zeta) = (\mathbf{R}_4, \zeta) = 0, \quad (3.14)$$

$$(f_4, \xi) = (\mathbf{R}_4, \xi) = 0, \quad (3.15)$$

où (a, b) est le produit scalaire défini par :

$$(a, b) = \int_V a \cdot b \, dV. \quad (3.16)$$

V étant le volume de l'élément.

3.2 Discréétisation du domaine

La discréétisation du domaine par des éléments quadrilatères nous permet de déterminer les variables de l'écoulement situées sur les noeuds de chaque élément. Tout d'abord on choisit les fonctions d'interpolation en fonction des variables adimensionnelles r et s . Ensuite, pour un élément quadrilatère à quatre noeuds on écrit les fonctions d'interpolation bilinéaires pour la vitesse et la température suivantes:

$$\varphi = \Psi = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{4} (1-r)(1-s) \\ \frac{1}{4} (1+r)(1-s) \\ \frac{1}{4} (1+r)(1+s) \\ \frac{1}{4} (1-r)(1+s) \end{array} \right\}, \quad (3.17)$$

où les deux variables r et s sont comprises entre -1 et 1, voir figure (3.1).

Pour la discrétisation de la pression, figure (3.2), on a deux approches. La première consiste à prendre la fonction d'interpolation ψ ($= \varphi$) et par conséquent une distribution continue de la pression. La deuxième approche est discontinue soit un seul degré de liberté est situé au centre de l'élément et la fonction d'interpolation ψ est égal à un.

La distribution des variables de pression, de vitesse et de température sur un élément quadrilatère est représentée comme suit:

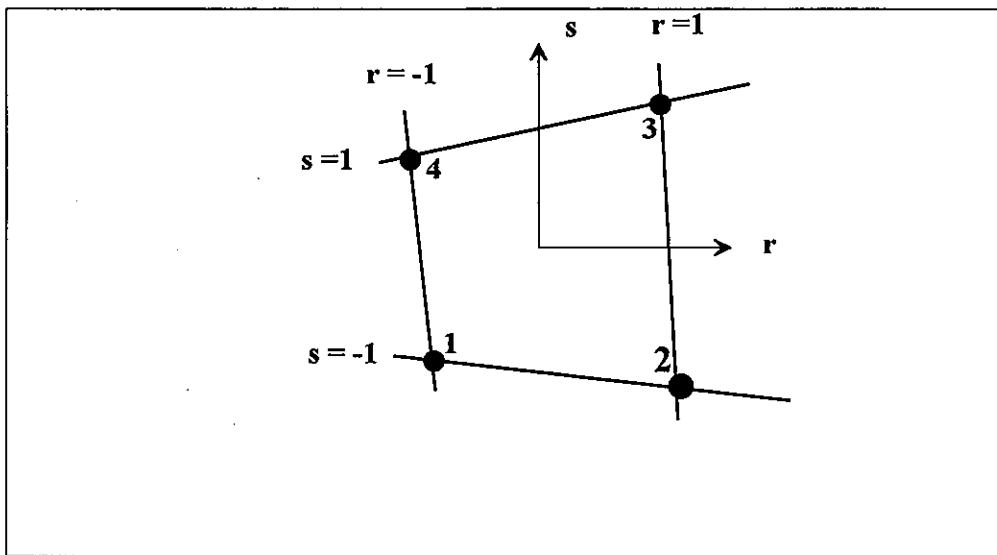


Figure 3.1. Élément de base quadrilatère

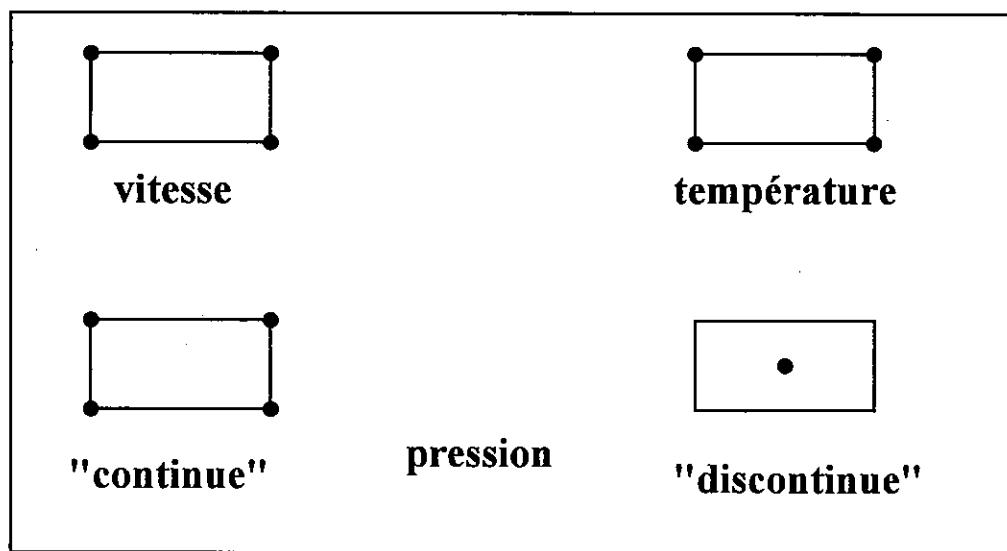


Figure 3.2 Emplacement des variables

3.3 Discrétisation dans la zone de la paroi

La génération du maillage dans la première couche d'éléments près de la paroi doit avoir une épaisseur suffisante pour contenir la couche visqueuse et la zone de transition. Ainsi on mesure la valeur de y^+ afin de fixer les éléments dans cette couche. Une valeur de y^+ supérieure à trente dans chaque élément est suffisante malgré qu'on peut descendre en dessous de ce seuil à condition que la position n'influence pas la nature de l'écoulement.

On estime dans FIDAP que le champ de vitesse n'est pas perturbé pour une valeur de y^+ situé dans l'intervalle $[10, 1000]$ tant que l'écoulement reste attaché à la paroi. Cet intervalle reste valable pour des écoulements dans une marche ou dans un canal avec une expansion soudaine. Par contre l'intervalle se réduit à $[30, 100]$ dans le cas de point de séparation ou de décollement.

3.4 Algorithme de calcul :

La méthode de Galerkin appliquée sur les équations de l'écoulement conduit à un système algébrique non linéaire dont la représentation matricielle s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{K}(\mathbf{U})\mathbf{U} = \mathbf{F}, \quad (3.18)$$

où \mathbf{K} est la matrice du système global, \mathbf{U} vecteur global des variables qui contient (la vitesse, la pression, la température, les fractions massiques, etc.) et \mathbf{F} le vecteur incluant les conditions aux limites et les forces de volumes.

Pour résoudre ce système on utilise l'algorithme de résolution *Segregated*. Cette méthode nous permet de découper le système global en une multitude de systèmes

d'ordre inférieur pour chaque variable de l'écoulement. Après la discréétisation de l'équation de pression et le calcul du champ de valeur, on résoud les équations de (mouvement, transport, énergie, espèce chimique, énergie cinétique, et de dissipation) à partir des derniers résultats obtenus. Le processus se déroule d'une façon séquentielle et au cours de chaque itération, on effectue une mise à jour du champ de valeur de la densité à partir de l'équation d'état. On fixe une valeur de relaxation pour chaque équation du système, la forme générale de l'algorithme est la suivante :

À partir d'un champ initial de solution ($u_x^0, u_y^0, T^0, k^0, \varepsilon^0$)

1) résolution de l'équation de pression

2) relaxation de la pression par :

$$p^{i+1} = \alpha_p p^i + (1 - \alpha_p) p^{i+\frac{1}{2}} \quad (3.19)$$

3) résolution de l'équation de mouvement pour la composante u_x

4) résolution de l'équation de mouvement pour la composante u_y

5) résolution de l'équation d'énergie pour T

6) résolution de l'équation d'énergie cinétique k

7) résolution de l'équation de dissipation ε

8) résolution des équations de transport Φ_n

9) résolution de l'équation pour Δp .

Les indices i , $i+1/2$, $i+1$ indiquent respectivement les niveaux d'itérations précédentes, intermédiaires et dernières.

3.5 Résumé des étapes de résolution

Les étapes de la résolution par la méthode des éléments finis se réduit d'après Reddy (1984) à la classification suivante:

- a) 1. Discrétisation du domaine en un ensemble d'éléments prédéfinis.
- 2. Construction du maillage.
- 3. Génération des propriétés géométriques du problème (coordonnées, surfaces, nombre de noeuds et d'éléments).
- b) 1. Construction de la formulation variationnelle des équations différentielles.
- 2. Remplacement de chaque variable u sous la forme:

$$u = \sum_{i=1}^n u_i \psi_i \quad (3.20)$$

qu'on remplace dans l'étape b.1, pour aboutir au système d'équations suivant:

$$[K^{(e)}] \{u^{(e)}\} = \{F^{(e)}\} \quad (3.21)$$

- 3. Sélection des fonctions d'interpolation parmi celles disponibles dans la littérature.

- c)
 - 1. Identification des conditions de continuité entre les éléments parmi les variables primaires par la liaison des noeuds de l'élément aux noeuds du domaine (connectivité des éléments) .
 - 2. Identification de la condition d'équilibre pour les variables secondaires; établir la relation entre les sources ou les forces locales et les composantes globales.
 - 3. Assemblage des équations pour chaque élément en utilisant les deux étapes c.1 et c.2 précédentes.
- d) Imposition des conditions aux limites du problème.
- e) Résolution des équations assemblées.

CHAPITRE IV

Résultats Numériques

Dans le but d'une validation du modèle $k-\epsilon$ dans le code de calcul FIDAP on effectue deux simulations:

- un écoulement turbulent dans un canal et
- un écoulement turbulent dans un canal avec une expansion soudaine.

Les validations seront basées sur la comparaison avec des résultats numériques réalisés par le code VF (travaux de McKenty (1992) et Rida (1993)) ainsi que les résultats experimentaux rapportées pour la vitesse et l'énergie cinétique turbulente. Ensuite, on effectue une simulation de l'expérience de Habib et Whitelaw (1979) avec une géométrie axisymétrique de deux injecteurs confinés, au cours de laquelle il sera question d'introduire deux espèces différentes à l'entrée sans réaction chimique pour étudier le taux de mélange dans le système. Finalement pour déterminer les limites d'application du code FIDAP pour la simulation des écoulements réactifs on fera intervenir la réaction chimique au cours de la deuxième étape de simulation

La modélisation de la turbulence dans les deux codes est réalisée par le modèle $k-\epsilon$ avec loi de paroi. La résolution par le code VF est basé sur la technique des volumes finis avec

une discréétisation spatiale faite sur des maillages non structurés. Une discréétisation par élément finis sur des maillages structurés dans le cas de FIDAP. L'avantage de la première méthode est qu'elle permet un meilleur traitement pour des formes géométriques complexes et d'accélérer la convergence.

4.1 Écoulement dans un canal

On commence par un cas test pour comparer les performances du code FIDAP vis-à-vis des simulations à l'aide du code VF par Gravel (1994), et des données expérimentales rapportées par Richman et Azad (1973). Il s'agit d'une conduite cylindrique représentée par une géométrie axisymétrique, (figure 4.1). Le diamètre est égal à un et la sortie est localisée à une distance égale à cinquante fois le diamètre sans condition explicite sur la vitesse. Un maillage structuré qui comporte 920 éléments (figure 4.2) est raffiné du côté de la paroi solide, avec une vitesse moyenne à l'entrée u_m égale à l'unité.

L'écoulement est bi-dimensionnel, stationnaire où la viscosité laminaire et la densité sont constantes. Les coupes de vitesse sont établies parallèlement à l'axe du canal et situées aux niveaux suivants

$$y = 0, \quad y = 0.3, \quad y = 0.425, \quad y = 0.485.$$

Les valeurs de k et ε à l'entrée sont déterminées par les deux équations suivantes:

$$k_{\text{entrée}} = 0.003 u_{\text{entrée}}^2, \quad \varepsilon_{\text{entrée}} = \frac{C_\mu k_{\text{entrée}}^{\frac{3}{2}}}{0.03 d}. \quad (4.1)$$

Avec ce test il s'agit de prédire le développement d'un profil de vitesse turbulent. La figure 4.3 représente les prédictions de la variation de la vitesse axiale normalisée divisée par la vitesse moyenne à l'entrée dans les trois cas de figure. Les résultats sont satisfaisants aux niveaux de toutes les coupes de mesure en particulier au niveau de l'axe de symétrie où les prédictions sont très satisfaisantes ce qui indique une bonne prédition de la vitesse aux parois solides.

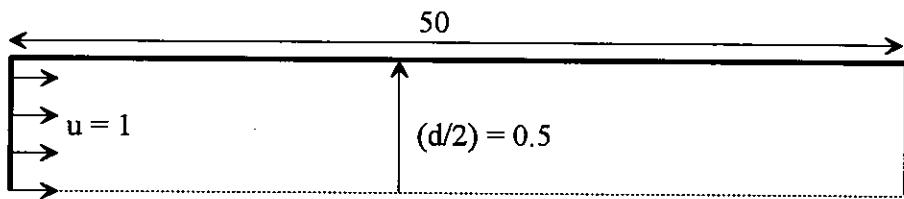


Figure 4.1. Géométrie utilisée pour un écoulement turbulent dans un canal .

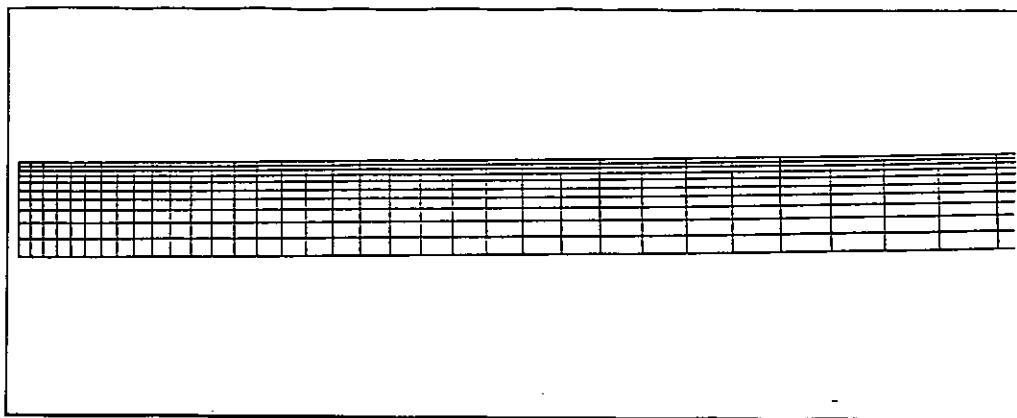


Figure 4.2. Maillage utilisé pour un écoulement turbulent dans un canal

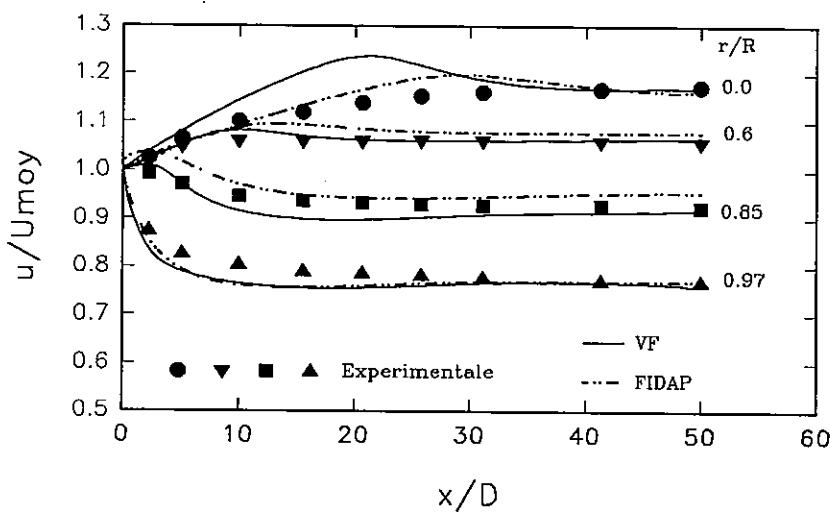


Figure 4.3. Comparaison de la composante axiale de la vitesse dans un canal turbulent (Expérience : Richman & Azad (1973)).

4.2 Ecoulement dans un canal avec une expansion soudaine

On retrouve dans la littérature une variété importante d'études qui traitent le cas d'un diffuseur par des méthodes expérimentales ou par des résolutions numériques. Des études expérimentales ont été réalisées par Moon et Rudinger (1977) et Stiegler et al. (1989). La résolution par la méthode des différences finies a été utilisée par Sala et al.(1980) pour des diffuseurs avec un angle de 15°, 30°, 45°, et 90°. L'étude dans un canal avec une expansion soudaine par la méthode des éléments finis a été réalisée par Smith (1984), de même que Bhata et Rahman (1993) qui ont effectuées des simulations avec des nombres de Reynolds allant de 2.10^5 et un éventail d'angles variant entre 15° et 90°. Dans toutes ces études la vitesse à l'entrée a demeuré constante.

Dans notre cas on considère uniquement un écoulement dans un canal avec une expansion soudaine à une vitesse à l'entrée égale à 31m/s et un nombre de Reynolds constant égal à 2.10^5 . Les dimensions de la géométrie sont données à la figure 4.4.

Les valeurs de k et ε à l'entrée sont déterminées par l'équation 4.1. Le maillage, formé par des éléments quadrilatères contient 2560 éléments, (figure 4.5).

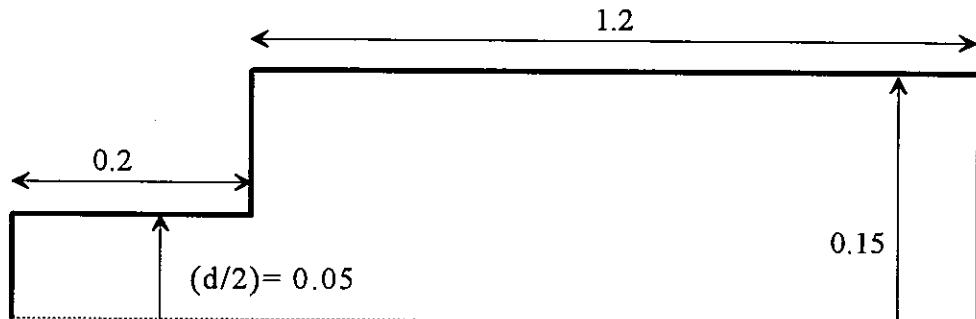


Figure 4.4.

Géométrie d'un canal avec expansion soudaine

Les quatre stations pour mesurer la vitesse u et l'énergie de turbulence k correspondent à:

$$x/R = 1.0, \quad x/R = 3.0, \quad x/R = 6.0, \quad x/R = 8.0 \text{ respectivement.}$$

Les figures 4.6 et 4.7 montrent les champs de vitesse et les lignes de courants respectivement, le point de rattachement est situé à ($x/H = 8.28$), la valeur expérimentale correspond à ($x/H = 7.33$). Le résultat numérique diffère sensiblement de la valeur expérimentale, cette différence est attribué d'après Autret et al. (1987) à la valeur de la constante C_μ dont la variation fait varier la longueur de recirculation.

Les prédictions de la vitesse u/U_{in} sont présentées en fonction de l'ordonnée adimensionnelle y/R dans les figures (4.11a-d). Les résultats obtenus concordent bien pour la vitesse dans les quatre stations de mesures avec les données empiriques réalisées par chaturvedi (1963) et les simulations réalisées par le code VF.

Des Profils représentant l'énergie de turbulence k adimensionnalisée par rapport à U_{in}^2 sont illustrés aux figures 4.12. La concordance avec les résultats expérimentaux est assez bonne dans les deux premières stations de mesures, toutefois on observe une translation de la courbe vers le haut pour les abscisses $x/R = 6.0$ et $x/R = 8.0$.

Cette surestimation dans la prédition de l'énergie cinétique peut être attribué à différents paramètres incluant les constantes utilisées dans le modèle de turbulence qui sont tirées à partir de valeurs empiriques, en plus des instabilités engendrées par la recirculation. Les écoulements avec mise en rotation comportent des erreurs résultants de l'utilisation du modèle $k-\varepsilon$.

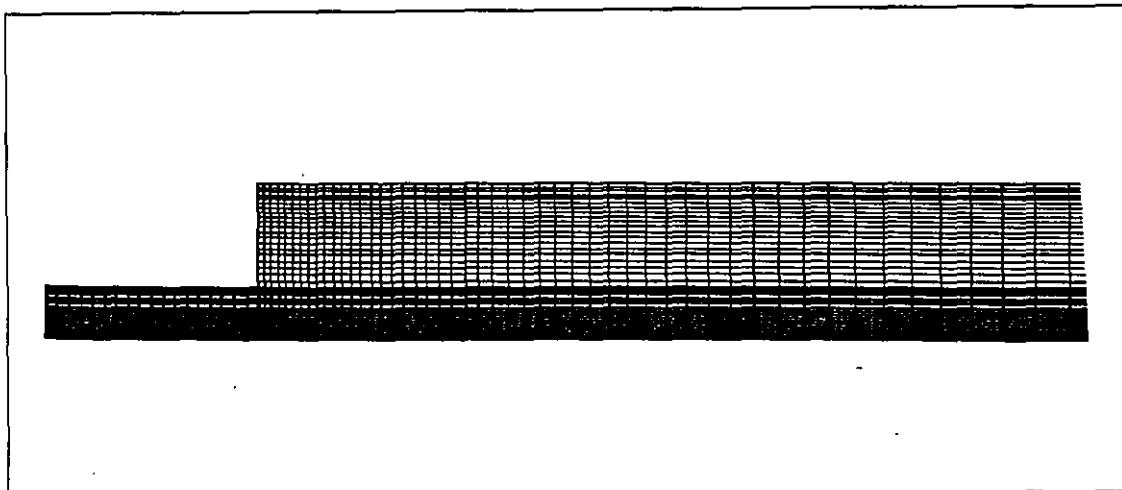


Figure 4.5. Maillage utilisé pour un canal avec expansion soudaine

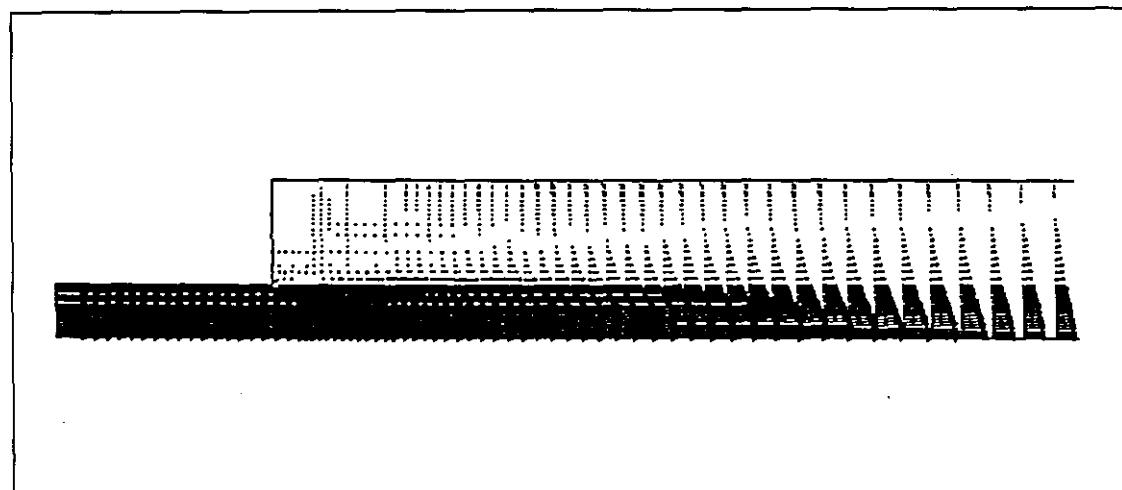


Figure 4.6. Vecteurs vitesses pour un canal avec une expansion soudaine

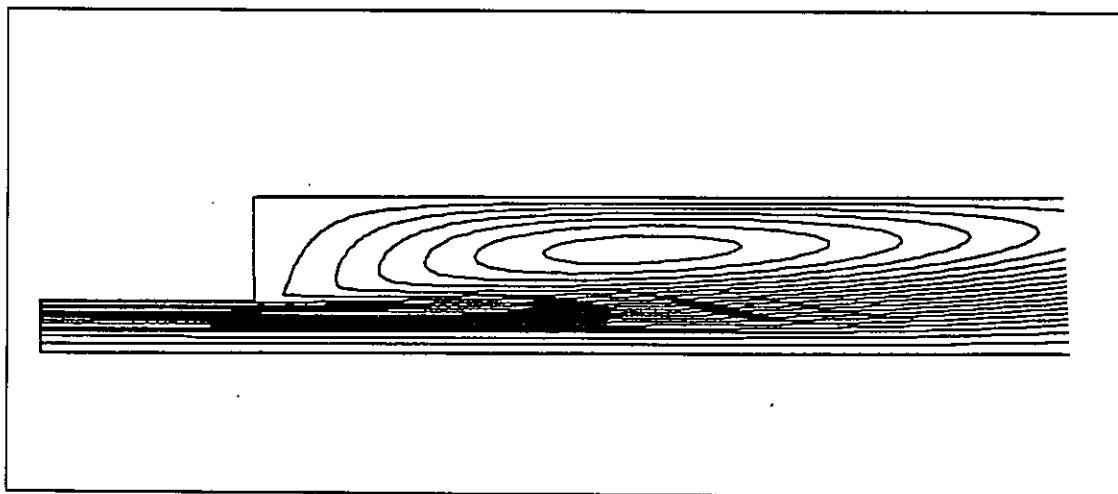


Figure 4.7. Lignes de courant pour un canal avec une expansion soudaine

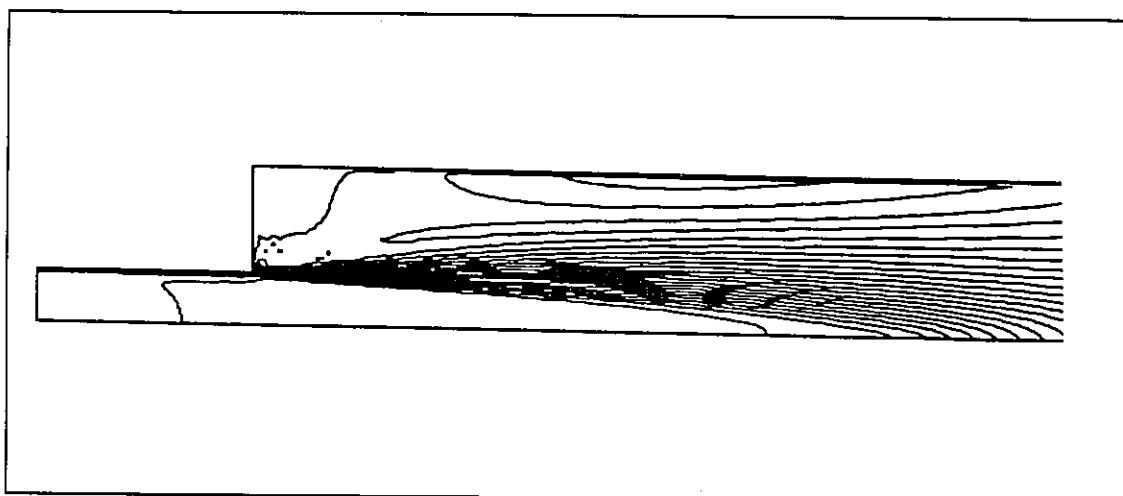


Figure 4.8. Lignes d'iso-vitesse pour un canal avec une expansion soudaine

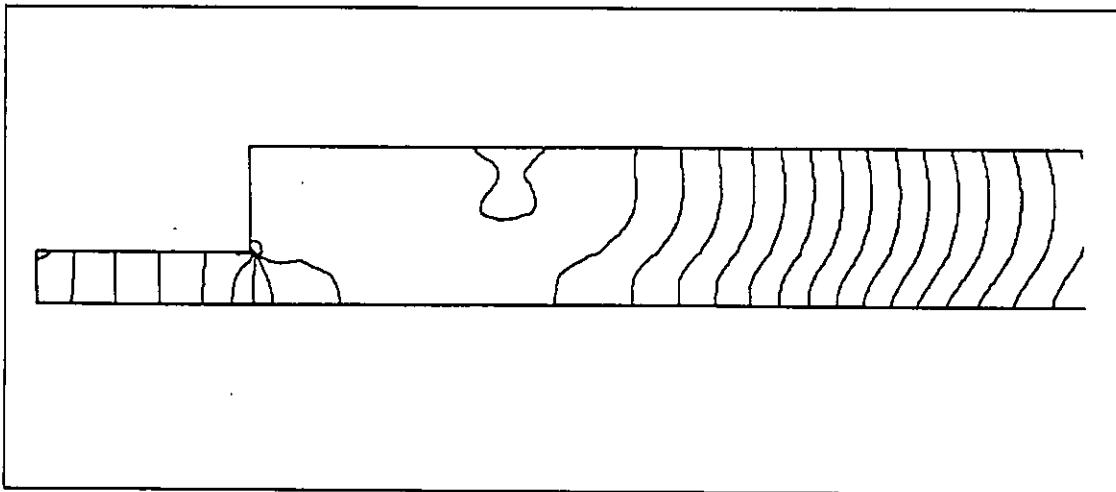


Figure 4.9. Lignes d'iso-pression, pour un canal avec une expansion soudaine

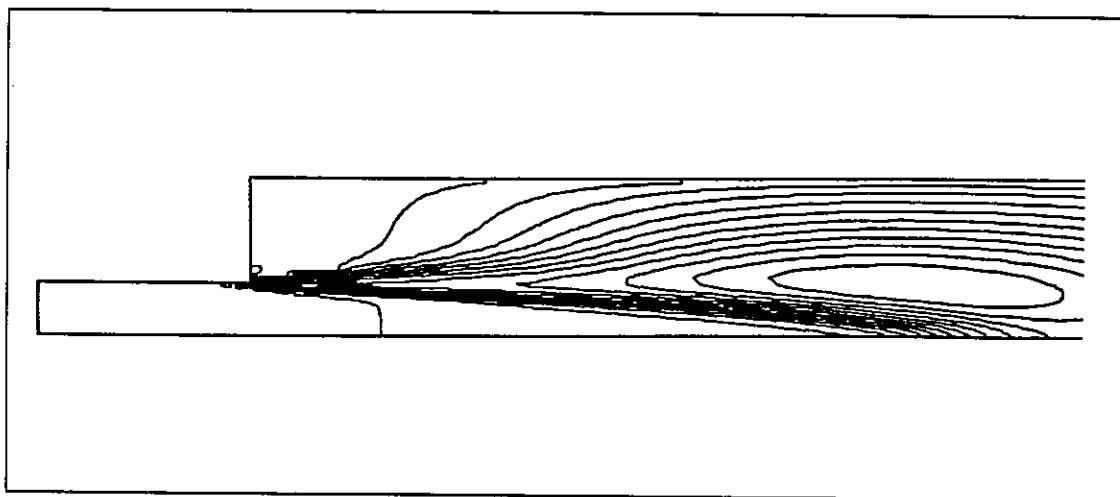


Figure 4.10. Lignes d'iso-énergie pour un canal avec expansion soudaine

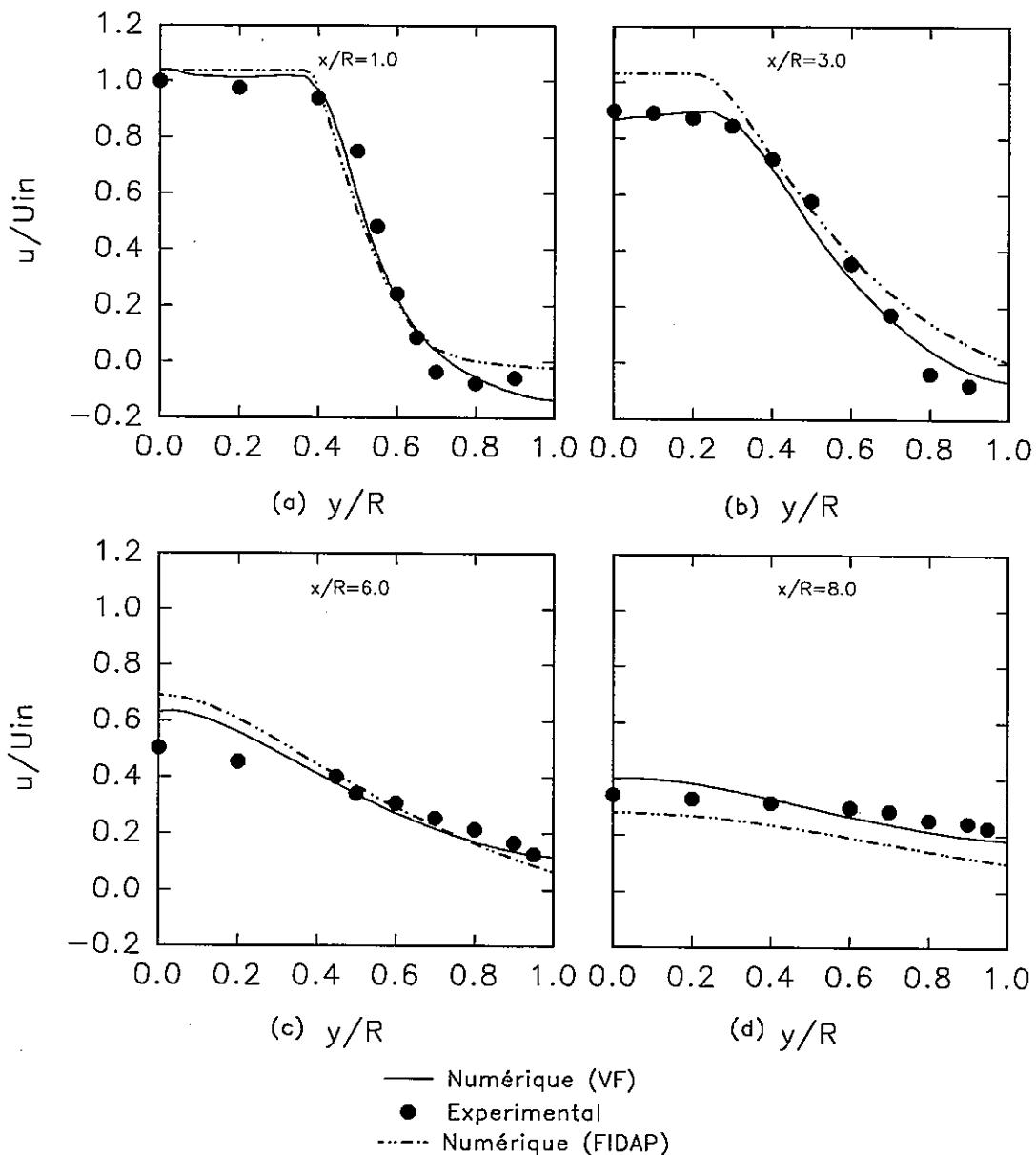


Figure 4.11. Profil de la vitesse pour un écoulement dans un canal avec expansion soudaine

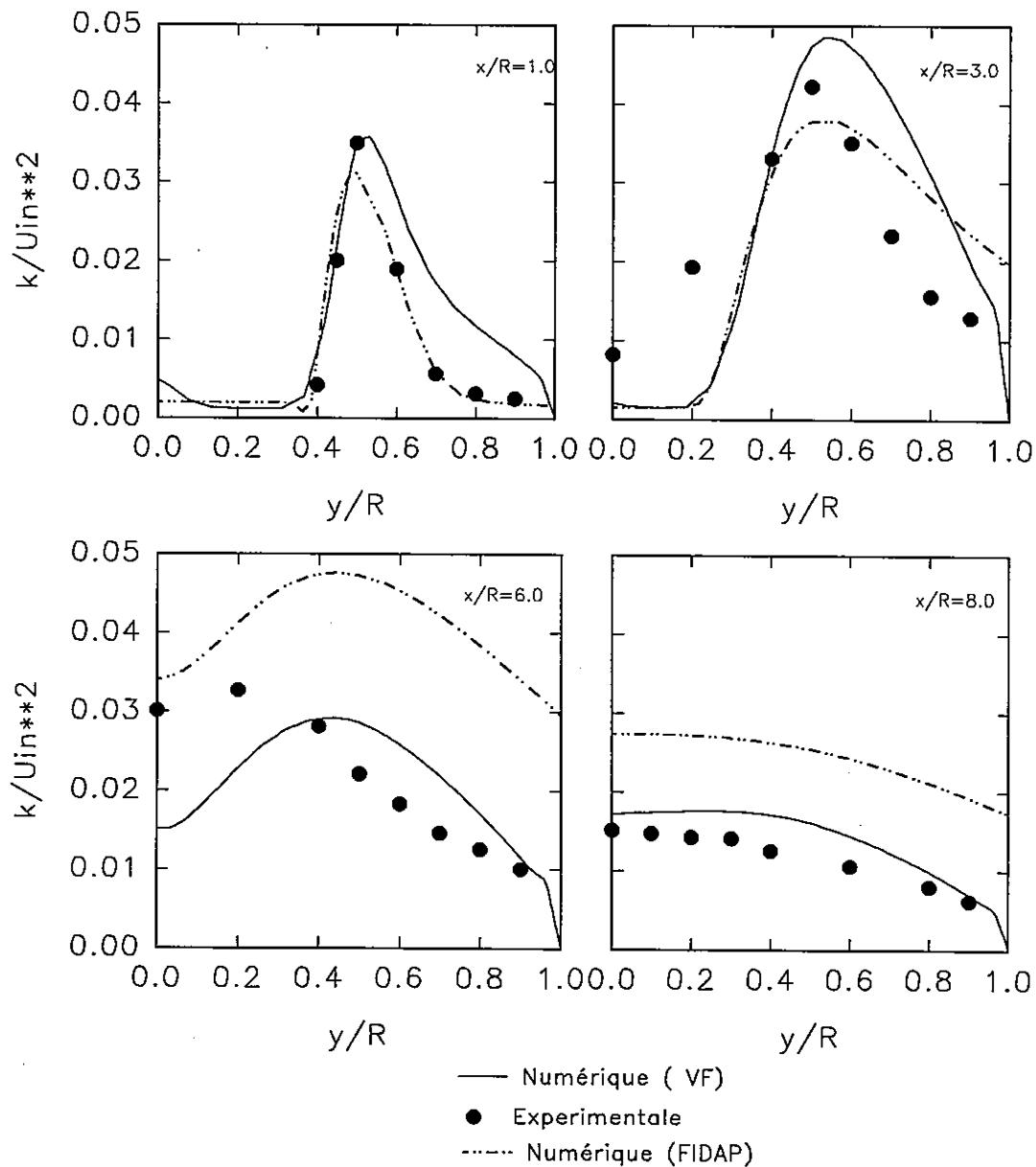


Figure 4.12. Profile de l'énergie cinétique turbulente pour un écoulement dans un canal avec expansion soudaine

4.3 Ecoulement dans deux jets coaxiaux confinés

Le calcul de l'écoulement dans deux jets (de l'air à la périphérie et du fuel au centre) a été réalisé en deux étapes. On effectue une première simulation à froid sans termes sources de réaction afin de valider les paramètres de calcul de la vitesse et de l'énergie cinétique turbulente à l'aide des résultats expérimentaux de Habib et Whitelaw (1979). Dans ces conditions on résoud une seule équation de conservation pour l'air ou le fuel. La géométrie de calcul est donnée à la figure 4.13, les conditions aux limites correspondent à la vitesse à l'entrée pour l'air et le combustible 25 m/s et 5 m/s respectivement, la fraction massique est égale à un, les valeurs de variables de turbulence sont données par les relations :

$$k_{\text{entrée}} = 0.003 u_{\text{entrée}}^2, \quad \varepsilon_{\text{entrée}} = \frac{C_\mu k_{\text{entrée}}^{\frac{3}{2}}}{0.03 d}. \quad (4.2)$$

Le maillage utilisé pour la simulation est montré à la figure 4.14; celui-ci comporte 2840 éléments. La géométrie est complexe et comporte deux zones de parois solides, ainsi on va augmenter le nombre d'éléments à proximité de ces deux surfaces. La meilleur solution serait de construire des maillages non structurés afin de contrôler la densité des éléments dans la géométrie, en particulier à l'entrée et à la sortie et éviter de raffiner dans les zones où l'écoulement est développé. Cependant le maillage implanté dans FIDAP ne permet pas de réaliser des maillages non structurés dans des géométries complexes. Par conséquent une discréétisation structurée est adoptée ce qui revient plus cher en temps de calcul et en espace mémoire. À titre de comparaison un maillage non structuré de 1270 éléments est utilisé pour les simulations avec VF.

Les valeurs de relaxation utilisées pour la résolution sont données dans le tableau suivant :

Tableau 4.1. Valeurs de relaxation pour les différents paramètres

u_x	u_y	p	T	k	ε	$c_i, i = 1..7$
0.25	0.25	0.1	0.05	0.3	0.3	0.1

Pour la résolution de l'écoulement avec réaction chimique, les mêmes géométries, maillage, et conditions initiales de vitesse, de dissipation et l'énergie cinétique du cas à froid on été utilisée. La nouvelle condition initiale dans ce cas est la température. Les valeurs utilisées, ont été tirées des données expérimentales de Hautman et Dryer (1980).

La deuxième étape de résolution consiste à déclencher la réaction chimique ce qui revient sur le plan de calcul à résoudre cinq autres équations de transport avec l'équation d'énergie. Pour démarrer la résolution on a utilisé les mêmes valeurs initiales pour le cas à froid et on a conservé les valeurs de relaxation. Les deux fluides à l'entrée ainsi que les parois du brûleur sont maintenus à une température de 300 K . Toutefois, les conditions expérimentales de température varient entre 960 et 1145 K.

L'aspect général de l'écoulement est montré aux figures 4.15 et 4.16 représentant respectivement les lignes de courant et les lignes d'iso-vitesses. Les lignes d'iso-taux de fuel dans deux jets coaxiaux confinées est représenté dans la figure 4.17. La figure 4.18 représente la distribution de l'énergie cinétique de turbulence, on observe un fort gradient près de l'interstice solide entre les deux injecteurs caractérisant la couche de cisaillement à l'interface des deux jets.

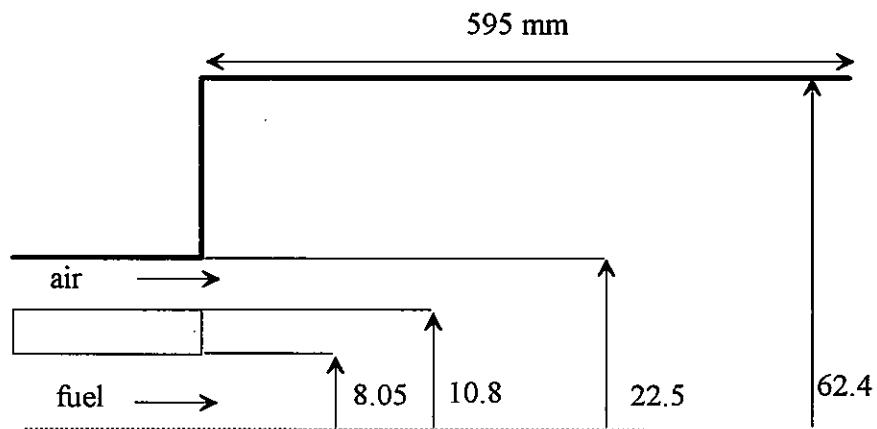


Figure 4.13. Géométrie utilisée pour deux jets co-axiaux confinés, expérience de Habib et Whitelaw (1979)

La figure 4.19 montre la variation radiale de la vitesse axiale adimensionnalisée par la vitesse sur l'axe de symétrie aux quatre stations de mesures situées à:

$$x/D = 0.616, \quad x/D = 1.430, \quad x/D = 2.230, \quad x/D = 3.670 \text{ respectivement.}$$

Ici aussi les prédictions sont en accord quantitatif avec les valeurs expérimentales à l'exception de la dernière coupe de valeurs vers la sortie de la conduite où on observe une différence entre les valeurs expérimentales et celles calculées par le code FIDAP. La variation de l'énergie cinétique turbulente le long de l'axe de symétrie, figure 4.20, indique une surestimation par FIDAP de la valeur de k tout au long de l'axe de symétrie. En effet les résultats d'énergie turbulente calculés par FIDAP sont deux fois plus importantes que celles déterminées par VF ou expérimentalement. Par conséquent les valeurs de la vitesse

sont, d'une façon qualitative, surestime aussi malgré la concordance observé avec les données adimensionnelles.

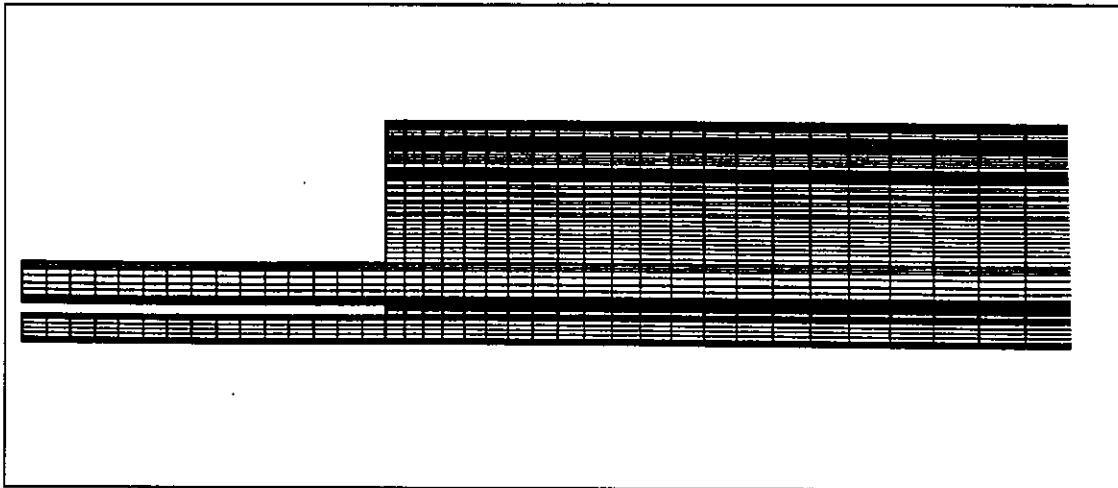


Figure 4.14. Maillage utilisé pour deux jets co-axiaux confinées.

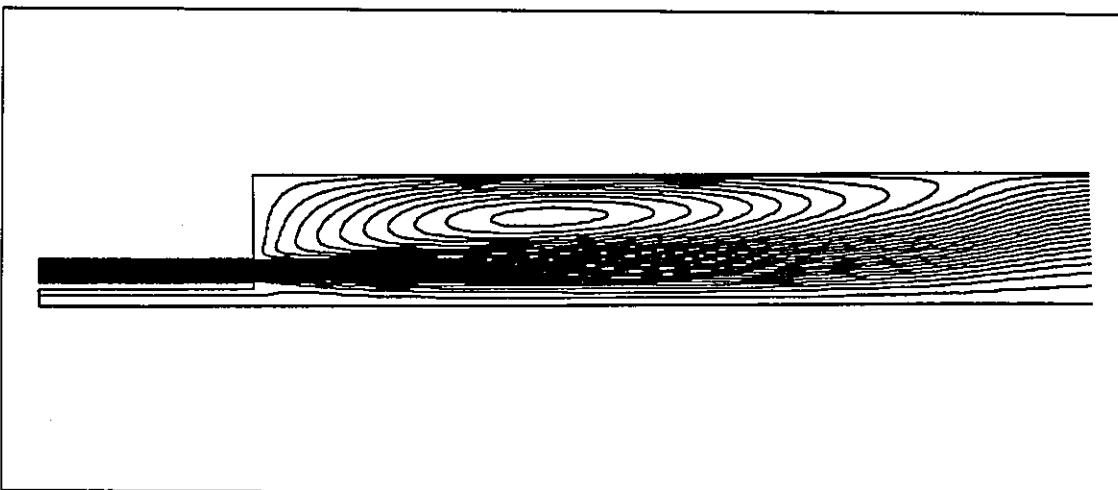


Figure 4.15. Lignes de courants pour deux jets co-axiaux confinées

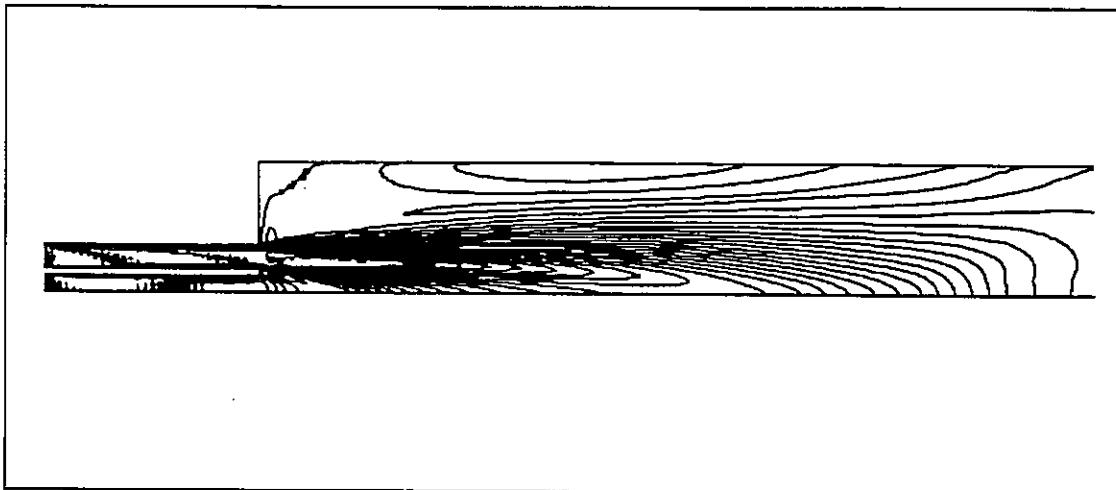


Figure 4.16. Lignes d'iso-vitesses pour deux jets co-axiaux confinées

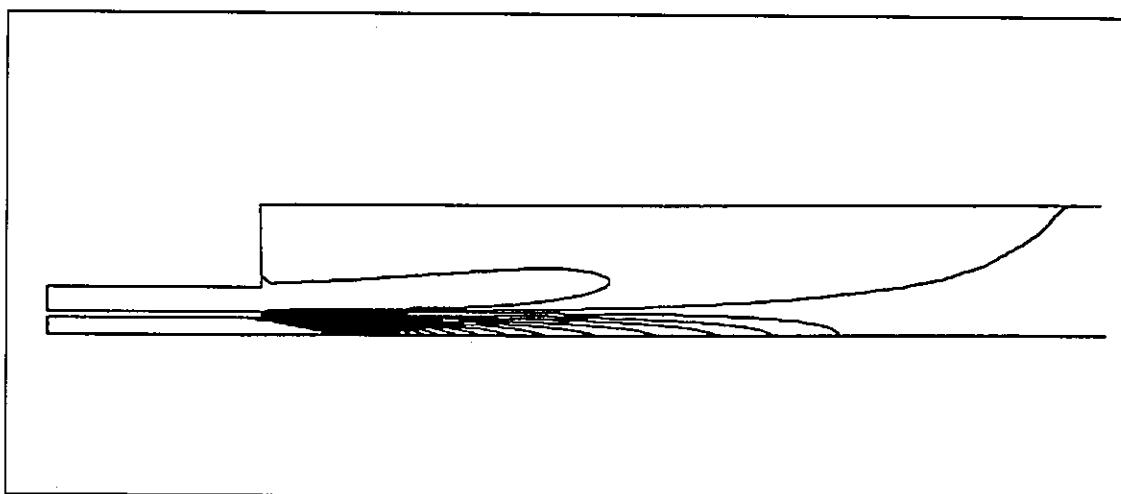


Figure 4.17. Lignes d'iso-taux du fuel dans deux jets co-axiaux confinées

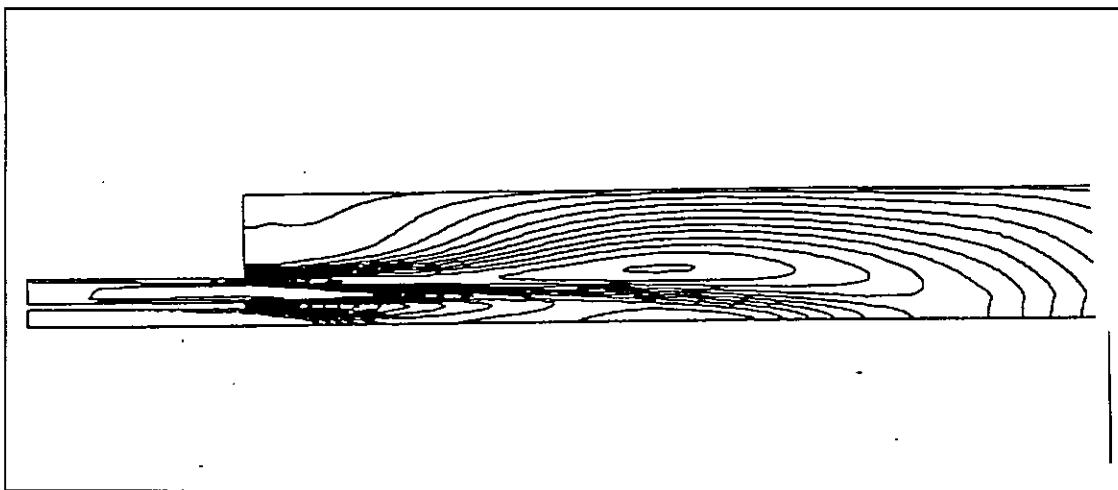


Figure 4.18. Lignes d'iso-énergie pour deux jets co-axiaux confinées

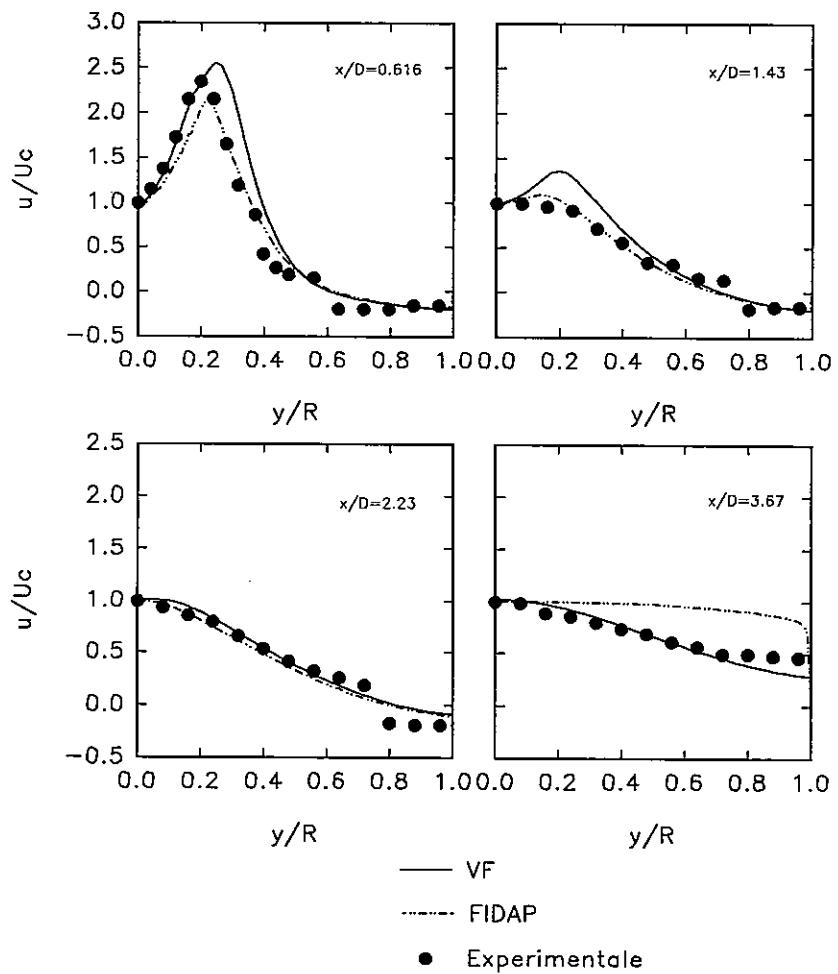


Figure 4.19. Profil de la vitesse pour un écoulement turbulent de jets co-axiaux dans un combusteur axisymétrique

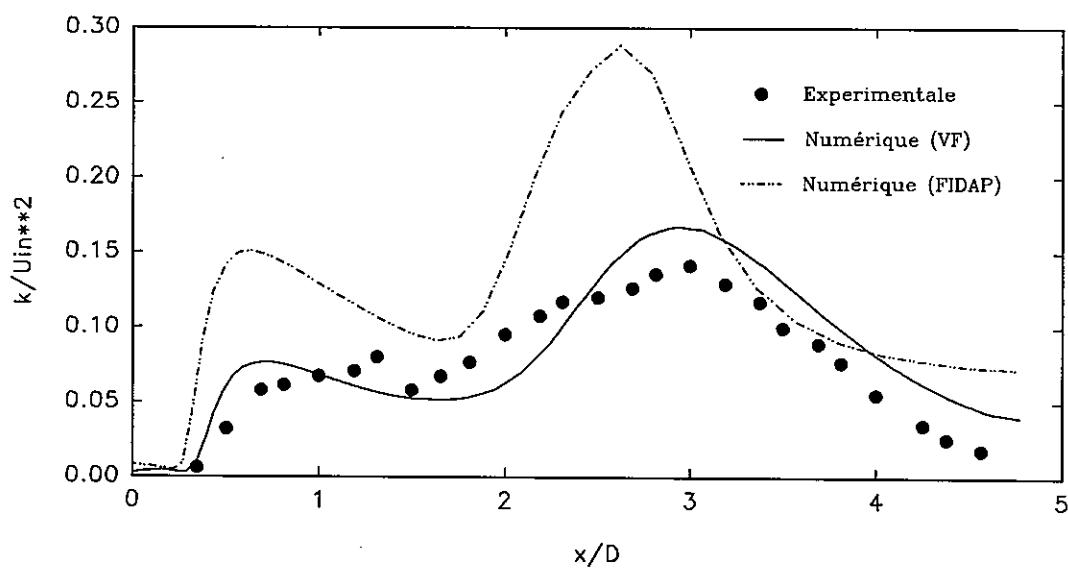


Figure 4.20. Profil de l'énergie cinétique pour un écoulement turbulent de jets co-axiaux dans un combusteur axisymétrique

4.4 Conclusion

Les validations réalisées par différents essais d'écoulements à froid ou en présence de réaction chimique nous permettent de tirer quelques conclusions sur l'interaction de la combustion et de la turbulence. En effet les variations aléatoires de certaines grandeurs (pression, température, densité, composition du mélange et surtout de la vitesse d'écoulement), affectent également la composition et la valeur locale et instantanée des termes de formation et de destruction.

Ainsi, l'objectif principal des modèles de combustion est de surmonter ou de contourner les difficultés associées à la modélisation des termes non-linéaires associés aux termes de formation. Selon Jones et Whitelaw (1982), les réactions associées à l'oxydation d'hydrocarbures à haute température ont habituellement des échelles de temps très courtes par rapport à celles qui caractérisent les mécanismes de transport. On peut alors supposer que ce sont ces dernières qui contrôlent le taux de réaction. On fait alors l'hypothèse que les réactions chimiques sont infiniment rapides ou que l'équilibre chimique est atteint (Gossman et al.(1969), Jones (1979), Jones et Whitelaw (1982), Khalil (1982)).

Conclusion

Dans ce travail il était question d'implanter un modèle de cinétique chimique dans un code d'éléments finis pour la simulation d'un écoulement réactif en régime turbulent. Ainsi, dans le but d'une prédiction correcte des variables de l'écoulement et d'une bonne description de la dynamique de l'écoulement, les deux phases de préparation qui concernent l'aéraulique et la thermochimie ont été bien intégrées afin de réaliser des simulations de flammes de diffusion.

Le travail a été mené avec les caractéristiques suivantes:

- modèle de turbulence $k-\varepsilon$,
- modèle de combustion de cinétique chimique,
- résolution des équations par la méthode des éléments finis,
- maillage par éléments rectangulaires.

À l'issu de ce travail quelques modifications doivent être apportées au résoluteur ainsi que les outils de CAO et de génération de maillage disponible dans FIDAP. D'une part le modèle $k-\varepsilon$ actuel basé sur une approche classique des variables n'est pas recommandé pour des simulations d'écoulements réactifs. Ainsi on doit se tourner vers un modèle pondéré par la masse comme dans le cas du modèle utilisé dans le code VF. D'autre part la génération de maillage non structuré dans le code n'est pas possible (qu'il s'agit de distribution ou de raffinement des éléments) pour des géométries complexes comme par exemple le cas des injecteurs coaxiaux ou des combusteurs.

Dans les années à venir, plusieurs défis devront être relevés en vue de pénétrer le milieu industriel. En particulier la possibilité d'étendre les codes à des modélisations évoluées de la physique ainsi que l'optimisation des paramètres de calcul. En ce moment FIDAP se limite à inclure des termes sources tirés du modèle cinétique pour la simulation de la combustion, toutefois une variété de modèles (à micro-flammes, d'équilibre chimique à chimie infiniment rapide et de taux de réaction fini) restent encore à rajouter et dont les résultats obtenus avec le code VF sont très satisfaisants.

Enfin, il faudra bien répondre à la question: combien de points doit-on mettre dans un maillage pour résoudre le problème de façon satisfaisante ? Dans cette optique l'utilisation de maillages non structurés adaptatifs devrait permettre un raffinement le maillage là où les difficultés apparaissent.

On peut envisager l'utilisation intensive des codes de mécanique des fluides pour des applications à trois dimensions. Cela demande de grosses ressources en temps de calcul et en mémoire. Une réponse pourra venir de l'adaptation des algorithmes aux nouvelles architectures de machines et en particuliers aux machines parallèles. Mais la contrainte d'obtenir des résultats précis avec le minimum du temps CPU restera toujours. Il faudra pour cela être capable de traiter des maillages de plusieurs centaines de milliers (voire des millions) de points avec des temps de calcul raisonnables.

Bibliographie

- 1 AUTRET, A.J., GRANDOTTO, M. and DEKEYSER, I. (1987). "Finite Element Computation of a Turbulent Flow over a Two-Dimensional Backward Facing Step", Int. Jour. for Num. Meth. in Fluids, Vol. 7, pp. 89-102.
- 2 BALIGA, B.R and PATANKAR, S.V. (1980). "A New Finite-Element Formulation for Convection-Diffusion Problems," Numerical Heat Transfert, Vol. 3, pp. 393-409.
- 3 BEER, J.M and CHIGIER, N.A. (1972). "Combustion Aerodinamics", John Wiley and Sons.
- 4 BENIM, A.C. (1989). "Finite Element Solution of an Enclosed Turbulent Diffusion Flame," Int. J. Numerical Methods in Fluids, Vol. 9, pp. 289-303, 1989.
- 5 BHATA, K. and RAHMAN, M. (Juin 1993). "Numerical Analysis of Turbulent Flow in Axisymmetric Diffusers," Comptes Rendus, Conférence de la Société Canadienne de CFD Montréal.

- 6 BILGER, R. (1975). "Turbulent Diffusion Flames," Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 1, p. 87.
- 7 BILGER ,R. (1980). In: Turbulent Reacting flows, Williams F.A And Libby P.A (Eds) Topics In Applied Physics, Vol. 44, Springer Verlag, New-York.
- 8 BORGHI, R. (1974 A). "Computational Studies of Turbulent Flow with Chemical Reaction," Project SQUID On Turbulent Mixing.
- 9 BORGHI, R. (1974 B). "Chemical Calculations In Turbulent Flows-Application to CO Containing Turbojet Flame," Adv. Geophysics, Vol. 18B, pp. 349.
- 10 BORGHI, R. (Jan.15-19,1979). "Models of Turbulent Combustion for Numerical Predictions" Prediction Methods for Turbulent Flows, Lecture series 1979-2, Von Karman Institute for Fluid Dynamics.
- 11 BOWMAN, C.T. (1970). "An Experimental and Analytical Investigation of the High-Temperature Oxidation Mechanisms of Hydrocarbon Fuels," Combust. Sci . And Tech., Vol. 2, pp. 161-172.
- 12 BRAIS, N. et MCKENTY, F. (Juin 1989). "Impact environnemental de l'utilisation du gaz naturel dans l'industrie des pates et papiers", Application du gaz naturel dans l'industrie des pâtes et papiers, Troisième séminaire.
- 13 BRAY, K.N.C. (1976). "The Interaction Between Turbulence and Combustion," 16th Int. Symp. on Combustion, pp. 223-233.
- 14 BUCKMASTER, J.D. (1987). "Mathematical Modeling in Combustion Science," Lectures Notes in Physics, Takeno, T. (Eds), Springer-Verlag Alaska.

- 15 CHABARD J.P et VIOLET P.L. (Decembre 1992). "Les defis des codes de mecanique des fluides pour les années a venir", Exemples divers d'application. Direction des études et recherches, EDF.
- 16 CHELLIAH, H.K. and WILLIAMS, F.A. (1990). "Aspects of the Stucture and Extinction of Diffusion Flames in Methane-Oxygen-Nitrogen Systems," Combustion and Flame, Vol. 80, pp.17-48.
- 17 CHIENG, C.C. and LAUNDER, B.E. (1980). "On the Calculation of Turbulent Heat Transport Downstream From an Abrupt Pipe Expansion," Numerical Heat Transfer, vol. 3, pp. 189-207.
- 18 CHUNG, T.J. (1993). "Numerical Modeling in Combustion," Series in Computational and Physical Process in Mechanics and Thermal Sciences, T.J. Chung (Ed.), Washington.
- 19 CORREA, S.M., DRAKE, M.C., PITZ, R.W. and SHY, Y.W., (1984). "Prediction and Measurement of a Non-Equilibrium Turbulent Diffusion Flame," 20th Intl.Symp on Combustion.
- 20 DEAN, R.B. and BRADSHAW, P. (1976). "Measurment of Interacting Shear Layers in a Duct," J. Fluid Mech., No. 78, pp. 641-676.
- 21 De SOETE, G. (1976). Aspects fondamentaux de la combustion en phase gaseuse, Société des Editions Technip.
- 22 ELKAIM, D. (1980). "Simulation numérique d'écoulements turbulents avec réactions chimiques", Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, 1990.
- 23 FAVRE, A. (1969). "Statrical Equations of Turbulernt Gases," Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics, SIAM, pp. 231-236.

- 24 FERGUSON, C.R. (1986). "Internal Combustion Engines," John Wiley & Sons, New York.
- 25 FIDAP 7.0 (1993). Theory Manual, Fluid Dynamics International
- 26 FIDAP 7.0 (1993). Tutorial Manual, Fluid Dynamics International
- 27 GLOWSKI, R., LARROUTUROU, B. and TEMAN, R. (Editors) (1985). "Numerical Simulation of Combustion Phenomena," Lectures Notes In Physics, Vol. 241, Springer-Verlag, New York.
- 28 GOSMAN, A.D., PUN, W.M., RUNCHAL, A.K., SPALDING, D.B. and WOLFSHTEIN, M. (1969). "Heat and Mass Transfer in Recirculating Flows," Academic Press, London.
- 29 GOSMAN A.D., LOCKWOOD, F.C. and SALOOJA, A.P. (1976) "The prediction of Cylindrical Furnaces Gaseous Fueled With Premixed and Diffusion Burners," 16th Intl. Symp. on Combustion, pp. 747-760.
- 30 GRAVEL, L., Analyse Paramétrique et optimisation d'un code de simulation numérique pour les phénomènes de combustion, Thèse de Maîtrise, Ecole Polytechnique de Montréal, Décembre 1994.
- 31 HABIB, M.A. and WHITELAW, J.H. (1979). "Velocity Characteristics of a Confined Coaxial Jet," Trans. ASME, J. Fluids Eng., Vol.101, pp. 521-529.
- 32 HAUTMAN, D.J., DRYER, F.L., SCHUG, K.P. and GLASSMAN, I. (1981). "A Multiple-Step Overall Kinetic Mechanism for The Oxidation of Hydrocarbons," Combustion Science and Technology, pp. 219-235.
- 33 HAUTMAN, D.J. (1980). Pyrolysis and oxydation Kinetic Mechanisms For Propane, Thèse de doctorat, Princeton University.

- 34 HEYWOOD, J.B. (1986). "Internal Combustion Engine Fundamentals," McGraw- Hill, New York.
- 35 HUGHES, T. J. R. and MALLET, M. (1986). "A New Finite Element Formulation for Computational Fluids: IV. A Discontinuity Capturing Operator for Multidimensional Advection-Diffusion systems," Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 58, : 329-336.
- 36 JOHNSON, K. (Nov 1985). "A Mathematically Simple Turbulence Closure Model for Attached and Separated Turbulent Boundary Layers," AIAA Journal, vol. 23.
- 37 JONES, W.P. and PRIDDIN, C. Jan. (15-19, 1979). "Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion," Predictions Methods for Turbulent Flows, Lecture series 1979-2, Von Karman Institute for Fluid Dynamics.
- 38 JONES, W.P., and WHITELAW, J.H. (1982). "Calculation Methods for Reacting Turbulent Flows: a Review," Combustion and Flame, pp. 1-26.
- 39 KHALIL, E.E., SPALDING, D.B., and WHITELAW, J.H. (1975). " The Calculation of Local Flow Properties in Two-Dimensional Furnaces," Int. J. Heat mass transfer, vol. 18, pp. 775-791.
- 40 KHALIL, E.E. (1981). "Flow and combustion Characteristics of Turbulent Reacting flow," Fluid Mechanics of Combustion System, pp. 217-225.
- 41 KHALIL, E.E. (1982). "Modeling of furnaces and Combustors," Abacus Press, Turnbridge Wells, U.K., 1982.

- 42 KENT, J.H and BILGER, R.W. (1976). "The prediction of Turbulent Diffusion Flame Fields and Nitric Oxide Formation," 16th Intl. Symp. on Combustion, pp. 1643-1656.
- 43 KONDRATIEV, V.N. (1964). "Chemical Kinetics of Gas Reactions", Pergamon Press.
- 44 LAUNDER B.E. and SPALDING, D.B. (1974). "The Numerical Computation of Turbulent Flows," Comput. Meth. in Appl. Mech. Eng., vol.3, pp.269-289.
- 45 LEWIS, B. and VON ELBE, G. (1961). "Combustion, Flames and explosions of Gases," Academic Press, New York.
- 46 LEWIS, M.H. and SMOOT, L.D. (1981). "Turbulent Gaseous Combustion Part I: Local species Concentration Measurements," Combustion and Flame, vol.42, pp.183-196.
- 47 LIBBY, P.A and WILLIAMS, F.A. (1981). In : Turbulent Reacting Flows, Williams F.A. and Libby P.A. (Eds), Topics in Applied Physics, vol. 44, Springer-Verlag, New-York.
- 48 LINÀN, A., WILLIAMS, F.A. (1993). "Fundamental Aspects of Combustion," Oxford Engineering Science Series 34, New York 1993.
- 49 LOCHWOOD, F.C., EL-MAHALLAWY, F.M. and SPALDING, D.B. (1974). "An Experimental and Theoretical Investigation of Turbulent Mixing in a Cylindrical Chamber," Combustion and Flame, vol.23, pp.283-293.

- 50 LOCKWOOD, F.C. (1977). "The Modeling of Turbulent Premixed and Diffusion Flames in the Computation of Engineering Flows," Combustion and flame, vol.29, pp.111-122.
- 51 LUDFORD, G.S.S., (Editor) (1986). "Reacting Flows: Combustion and Chemical reactors," Lectures in Applied Mathematics, volume 24.
- 52 MAHALINGHAM, S., CANTELL, B.J. and FERZIGER, J.H. (May 1990). "Full Numerical Simulation of Coflowing, Axisymmetric Jet Diffusion Flames," Phys. Fluids A, vol.2, no.5,
- 53 MCKENTY, F. (Décembre 1992). Modèles de combustion pour la simulation numérique d'écoulements reactifs en atmosphère confinée, Thèse de Doctorat, École Polytechnique de Montréal, Canada.
- 54 MENG, F.L., MCKENTY, F., ELKAIEM, D. and CAMARERO, R. (1992). "Predicting Radiative Heat Transfer in Two-Dimensional Rectangular and Axisymmetric Enclosures Using the Discrete transfer Method," Advanced Computational Methods in Heat Transfer II vol.1: Conduction, Radiation and phase Change, Computational Mechanics Publications, Elsevier, U.K.
- 55 MOULIN, V. (Décembre 1992). "Modelisation De La Turbulence Dans Les Turbomachines," Direction des études et recherches, EDF.
- 56 MOON, L.F. and RUDINGER, G. (1977). "Velocity Distribution in an Abruptly Expanding Circular Duct," ASME J. of Fluids Engineering.
- 57 PACZKO G., LEFDAL, P.M. and PETERS, N. (1986). "Reduced Reaction Schemes for Methane, Methanol and Propane Flames," Twenty-first Symposium (Intl) on Combustion, pp.739-748.

- 58 PICART, A., BORGHI, R., and CHOLET, J.P. (1988). "Numerical Simulation of Turbulent Reacting Fluid," Computers and Fluid, vol. 16, no 4, pp. 475-484.
- 59 REDDY, J.N. (1993). "An introduction to finite element method," second edition.
- 60 REGGIO, M., AGOUZOUL, M. and CAMARERO R. (1987). "Computation of Incompressible Turbulent Flows by an Opposed-Differencing Scheme," Numerical Heat Transfer, vol.12, pp307-320.
- 61 RIDA, S. (Juin 1993). Méthode de volumes finis pour la simulation numérique d'écoulements turbulents sur des maillages non structurés, Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal
- 62 SCHLICHTING, H. (1979). "Boundary Layer Theory," McGraw Hill Series in Mechanical Engineering, Seventh Edition.
- 63 SMITH, R.. (1984). "A Practical Method of Two-Equation Turbulence Modeling Using Finite Elements," Int. J. Num. Meth. Fluids, Vol. 4.
- 64 SPALDING, D.B. (1971). "Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames," 13th Intl. Symp. on Combustion, pp. 649-675.
- 65 SPALDING, D.B. (1976). "The Influences of Laminar Transport and Chemical Kinetics on the Time-Mean Reaction Rate in a Turbulent Flame", 16th Int. Symp. on Combustion, pp. 431-440, 1976 B.
- 66 SPALDING, D.B. (1979) "Theories of Turbulent Combustion," AIAA Conference, New Orleans.

- 67 STIEGLMEIER, M., TROPEA, C., WEISER, N. and NITSCHE, W. (1989). "Experimental Investigation of The Flow Through Axisymmetric Expansions," ASME J. of Fluids Engineering.
- 68 STREHLOW, R.A. (1968). "Fundamentals of Combustion," International Textbook Company.
- 70 VIOLET, P.L. (1968). "Modélisation numérique de flames de diffusion en régime turbulent", Bulletin de la direction des études et recherches - Serie A, vol.2, pp. 5-21, France.
- 71 WESTBROOK, C.K., DRYER, F.L. (1981). "Chemical Kinetics and Modeling of Combustion Processes," Eighteeth Symposium (Int) on Combustion pp.749-767.
- 72 WILLIAMS, F.A. (1975). "In: Turbulent Mixing in nonreactive and reactive Flows," Murthy S.N.B. (Ed), plenum Press, New York.
- 73 WILLIAMS, F.A and LIBBY, P.A. (1980). (Eds) "Turbulent Reacting Flows," Topics in Applied Physics, vol. 44, Springer-Verlag, New-York.
- 74 ZELDOVICH, Y.B., BARENBLATT, G.I., LIBROVICH, V.B., MAKHVILADZE, G.M. (1985). "The Mathematical Theory of Combustion And Explosions," (traduit par D.H. McNeil), Academy of Science of USSR.