

**Chapitre III**  
**MODELISATION DE**  
**LA COMBUSTION**  
**TURBULENTE**  
**PREMELANGEE**

## Introduction :

Les différentes applications technologiques modernes de la combustion turbulente prémélangée nécessitent une meilleure connaissance de la structure de l'écoulement, des phénomènes de stabilisation de la flamme et leurs critères d'extinction. L'amélioration de chaque élément passe donc par une bonne compréhension des phénomènes relatifs à la combustion. De ce fait, il est nécessaire de comprendre les processus physiques et chimiques prépondérants au sein du système de combustion tels que la stabilité des flammes, l'interaction entre la turbulence et les réactions chimiques et le comportement dynamique. Le procédé de combustion en plusieurs étapes avec interaction turbulence et cinétique chimique a rendu très difficile pour les chercheurs de développer de meilleurs modèles numériques. L'étude et prévision de la formation des produits dont la production d'oxydes d'azote (NOx) nécessite de meilleurs outils de modélisation et d'analyses expérimentales. Cela contribue au développement de futures conceptions de moteurs plus efficaces et moins polluantes.

### III.1. Cinétique chimique :

Un processus chimique de combustion est en fait un enchaînement de coupures et de créations de liaisons entre les molécules. Ces coupures et/ou créations de liaison représentent des réactions élémentaires, ces dernières constituent le mécanisme cinétique réactionnel. L'état final du processus réactionnel correspond à l'équilibre chimique, qui est définie par les lois de la thermodynamique ainsi que les conditions de température et de pression de cet état.

Les réactions élémentaires sont caractérisées par leur taux de réaction  $\Omega_i$  qui permet de calculer l'effet de la réaction sur chaque espèce.  $\Omega_i$  traduit la variation de l'espèce  $i$  au cours du temps. Le taux de réaction élémentaire est égal au produit d'une constante de vitesse par les concentrations des espèces réactives, élevées chacune à une puissance qui correspond à leur coefficient stœchiométrique. La constante de vitesse  $k$  dépend de la température et est le plus souvent exprimée par une loi d'Arrhenius :

$$r = BT^\alpha \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) = BT^\alpha \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \quad 3.1$$

Où  $r$  est la constante de vitesse,  $B$  le coefficient pré-exponentiel,  $R$  la constante des gaz parfaits,  $E_a$  l'énergie d'activation et  $T_a = E_a/R$  la température d'activation. L'énergie d'activation

représente la quantité d'énergie nécessaire au système considère pour que les espèces puissent réagir de façon significative.

Le processus réactionnel dans les mélanges gazeux est une succession de réactions élémentaires ; une première réaction produit des espèces qui vont amorcer la chaîne en réagissant de nouveau avec les réactifs initiaux et en déclenchant de nouvelles réactions élémentaires [16].

### III.2. Interaction Turbulence combustion

La structure interne d'une flamme turbulente a tout d'abord été considérée, dès les premiers travaux de Damkhöler en 1940 [17], comme étant une flamme laminaire très fine plissée et rapidement connectée par la turbulence de telle sorte que la zone de flamme apparaisse épaisse à l'œil nu. En fait, cette façon de représenter la structure interne d'une flamme turbulente n'est pertinente que si la taille des plus petits tourbillons créés par la turbulence, est plus grande que l'épaisseur de la flamme laminaire, empêchant ainsi aux tourbillons de pénétrer dans la flamme laminaire. En comparant donc les longueurs et les temps caractéristiques de la turbulence à la longueur et au temps caractéristiques des flammes laminaires, on obtient une classification des structures de flammes turbulentes.

Les deux nombres caractéristiques les plus utilisés pour établir cette classification des régimes de combustion sont les nombres de Damkhöler  $Da$  et de Karlovitz  $Ka$  qui comparent le temps caractéristique chimique  $\tau_c$  aux temps caractéristiques de la turbulence  $\tau_T$  et  $\tau_K$  associés respectivement aux structures énergétiques et dissipatives de la turbulence :

$$Da = \frac{\tau_T}{\tau_c} = \frac{l_T S_L}{\delta_L u'} \quad Ka = \frac{\tau_c}{\tau_K} = \frac{\delta_L u_K}{l_K S_L} \quad 3.2$$

$\tau_T$ ,  $l_T$  et  $u'$  sont respectivement le temps, l'échelle intégrale et la vitesse caractéristiques de la turbulence.  $\tau_K$ ,  $l_K$  et  $u_K$  sont le temps, la longueur et la vitesse caractéristiques de la dissipation (échelle de Kolmogorov).  $\delta_L$  et  $S_L$  sont l'épaisseur et la vitesse de la flamme laminaire. Les longueurs, temps et vitesses caractéristiques de la turbulence peuvent être exprimés en fonction de l'énergie cinétique turbulente  $k$ , de la dissipation  $\varepsilon$  et de la viscosité cinématique du fluide  $\nu$  :

$$u' = \sqrt{k} \quad l_T = \frac{u'^3}{\varepsilon} \quad u_K = (\nu\varepsilon)^{1/4} \quad l_K = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4}$$

Ces relations permettent de relier les nombres  $Da$  et  $Ka$  au nombre de Reynolds turbulent  $Re_T$  :

$$Re_T = \frac{u' l_T}{\nu} = Da^2 Ka^2 \quad 3.3$$

On admet que si  $Da > 1 \rightarrow$  chimie infiniment rapide, et si  $Da \leq 1 \rightarrow$  chimie finie.

La plupart des applications pratiques correspondent à des valeurs moyennes ou élevées du nombre de Damköhler. Mais il ne faut pas oublier que des temps caractéristiques chimiques très différents peuvent se rencontrer au sein d'une même flamme. Ainsi l'oxydation du combustible a, en général, lieu avec des réactions chimiques rapides ( $Da \gg 1$ ) tandis que la formation, ou la destruction, des espèces polluantes (oxydation de CO en  $2\text{CO}_2$ , formation des oxydes d'azote  $x\text{NO}$ ) est sensiblement plus lente ( $Da \approx 1$ ). Le domaine des faibles nombres de Damköhler relève plutôt du génie chimique, mais il existe quelques réactions très lentes (oxydation du silane Si 4, décomposition en phase vapeur ou CVD utilisée dans l'industrie des semi-conducteurs) décrites comme des réactions de combustion.

### III.3. Modélisation de la combustion turbulente prémélangée :

#### III.3.1. Définition

La description phénoménologique et les diagrammes de combustion turbulente sont nécessaires pour comprendre le phénomène, mais ils ne donnent aucune base mathématique pour la simulation numérique. Le système d'équations réactives de Navier-stokes avec un mécanisme réactionnel élémentaire décrivent le fondement physique et chimique de la combustion turbulente prémélangée [18].

D'une part, les échelles de temps des réactions chimiques sont généralement inférieures aux petites échelles de temps de la turbulence, donnant ainsi un système d'équations différentielles très complexe, non-linéaire et couplé.

D'autre part, l'effort de calcul peut être réduit à un niveau acceptable si les équations moyennes réactives sont résolues en lieu et place des équations instantanées. Comme il a été constaté dans le chapitre précédent la prise de la moyenne engendre la création d'autres termes ouverts, la modélisation est inévitable dans ce cas. Dans la combustion prémélangée, les modèles peuvent être classifiés selon leurs hypothèses de modélisation en trois groupes principaux :

Modèles contrôlés par la turbulence, modèles PDF (Probability Density function) et modèles des flammes lentes. Dans les sections suivantes un exemple de chaque groupe sera brièvement décrit.

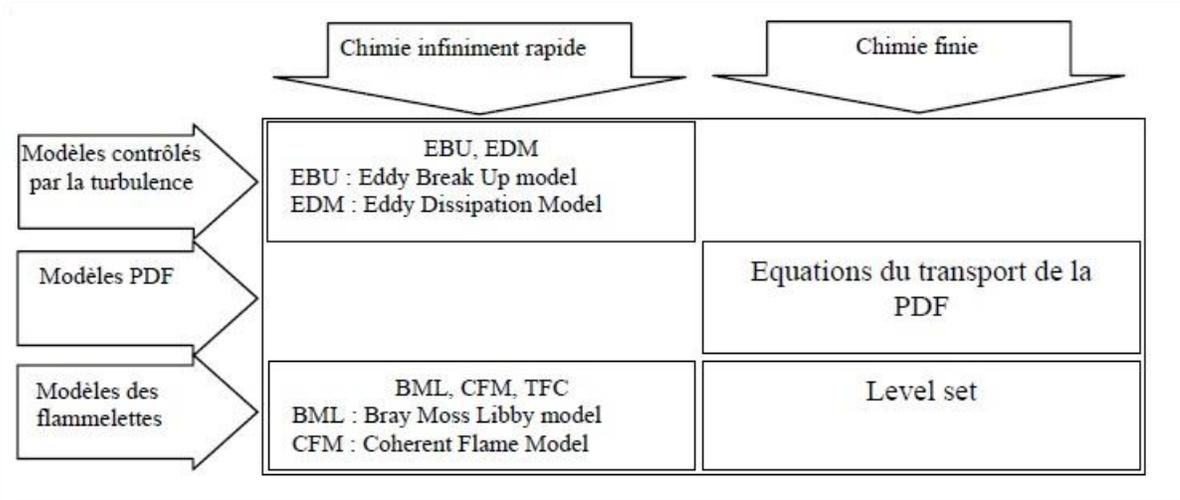


Figure (3.1) : Aperçu sur les modèles de combustion turbulente

### III.3.2. Variable d'avancement de la réaction

L'avancement de la réaction ou de la flamme est le résultat d'un grand nombre de réactions chimiques élémentaires. Pour l'hydrocarbure le plus simple, une dizaine d'espèces intermédiaires et une centaine de réactions chimiques sont nécessaires. Cependant, il faut noter que peu de réactions influentes sur le processus général. Par conséquent, l'avancement chimique peut être représenté par peu de variables et dans le cas le plus simple par une variable d'avancement de la réaction  $c$ . Cette variable doit être normalisée, elle varie entre zéro (pour le mélange frais) et un (pour le gaz brûlé).

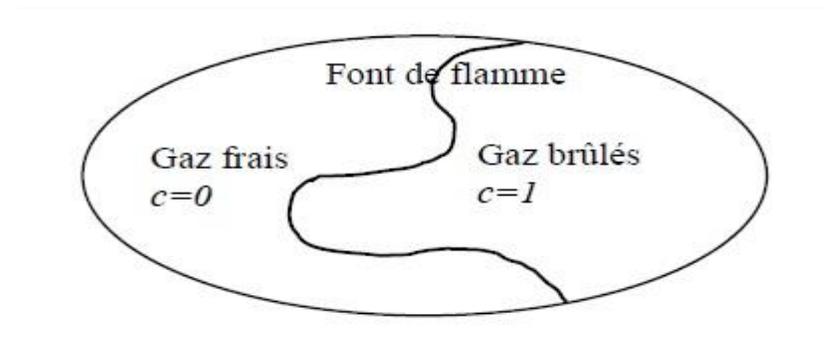


Figure (3.4) Définition de la variable d'avancement

Dans les systèmes adiabatiques fermés, la température varie d'une manière monotone en fonction du procédé chimique. Dans ce cas, une fonction de la température normalisée peut définir la variable d'avancement de la réaction  $c$  :

$$c = \frac{T - T_f}{T_b - T_f} \quad 3.4$$

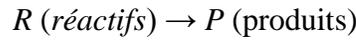
Où  $T$  représente la température locale effective,  $T_f$  la température des gaz frais et  $T_b$  la température des gaz complètement brûlés.

### III.3.3 Pré-mélange Parfait et Chimie Infiniment Rapide

#### III.3.3.1 Modèle “Eddy Break-Up”

Ce modèle est basé sur une analyse phénoménologique de la combustion turbulente aux grands nombres de Reynolds ( $Re \gg 1$ ) et de Damkhöler ( $Da \gg 1$ ). Suivant la cascade de Kolmogorov, la turbulence provoque la cassure des tourbillons des gaz frais. Une des premières approches modélisant le terme source chimique moyen est proposé par Spalding [19]. Il suppose que le mélange turbulent contrôle le taux de réaction chimique.

En prenant une réaction chimique irréversible à un pas :



Le taux de réaction moyen est donné pour les produits par :

$$\tilde{\omega}_p = C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{K} (\tilde{Y}_p^{n_2})^{\frac{1}{2}} \quad 3.5$$

Avec  $\tilde{Y}_p^{n_2}$  la variance de la fraction massique des produits et  $CEBU$  une constante du modèle. Plus tard, ce modèle est amélioré par Magnussen et Hjertager [20], donnant ainsi le modèle EDM (Eddy Dissipation Model). Dans ce dernier, la variance  $\tilde{Y}_p^{n_2}$  est remplacée par la fraction massique de l'espèce en déficit. D'où, le terme source moyen est calculé par :

$$\tilde{\omega} = A \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{K} \min \left( \tilde{Y}_F, \frac{\tilde{Y}_0}{\nu}, B \frac{\tilde{Y}_p}{\nu+1} \right) \quad 3.6$$

Où  $A$  et  $B$  sont des constantes de modélisation et  $\nu$  le coefficient stœchiométrique donné par

$$\nu = \frac{\nu_0 M_0}{\nu_F M_F} \quad 3.7$$

$\nu_0$  Est le coefficient stœchiométrique de l'oxygène et  $\nu_F$  est le coefficient stœchiométrique du combustible. Les termes de transport turbulent pour les scalaires réactifs sont modélisés par l'approximation du gradient. Dans les deux modèles l'échelle de temps chimique est remplacée par celle du temps turbulent, représentant la chimie infiniment rapide seulement. Il faut noter que les constantes des deux modèles sont libres. Elles sont déterminées par optimisation

pour chaque combustible et pour chaque géométrie. Ces modèles sont largement utilisés dans les codes, surtout pour démarrer d'autres modèles plus complexes, à cause de leurs implémentations très simples et leurs coûts en calcul négligeable.

### III.3.3.2 Modèle "Eddy Dissipation"

Le modèle Eddy Dissipation qui est basé sur les travaux de Magnussen et Hjertager dans lequel la chimie est considérée très rapide par rapport à la turbulence.

Dans ce cas, la combustion qui n'est contrôlée que par la turbulence, transporte le mélange des gaz frais avec les produits chauds dans la zone de réaction ou s'effectue rapidement la cinétique chimique. Cette dernière peut donc être négligée.

Le taux de réaction  $R_{i,r}$  de l'espèce  $i$  due à la réaction est donné par le minimum des expressions suivantes :

$$R_{i,r} = U'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left( \frac{Y_R}{U'_{R,r} M_{w,R}} \right) \quad 3.8$$

$$R_{i,r} = U'_{i,r} M_{w,i} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \left( \frac{\sum p Y_P}{\sum_j^N U''_{j,r} M_{w,j}} \right) \quad 3.9$$

Ou :

$Y_p$  : est la fraction massique d'une espèce  $p$  dans les produits ;

$Y_r$  : est la fraction massique d'une espèce  $r$  dans les réactifs ;

$A$  et  $B$  : sont des constantes empiriques qui ont respectivement des valeurs 4 et 5 ;

$M_{w,i}$  : est la masse molaire de l'espèce  $i$ .

### III.3.3.3 Modèle Bray-Moss-Libby

Ce modèle est connu par les initiales de ces auteurs, Bray, Moss et Libby ou de l'hypothèse physique utilisée dans sa formulation BiModal Limit. Ce modèle est proposé en premier en 1977 [21], il a fait l'objet de grandes améliorations (travaux de Bray, Moss et Libby, puis Bray, Champion et Libby). Ce modèle combine une approche statistique utilisant la fonction de densité de probabilité PDF avec une analyse physique. On se limite ici au concept de base des formulations BML.

Considérons une réaction chimique irréversible à un pas (cas du modèle EDM). Les hypothèses classiques sont supposées pour simplifier la formulation (gaz parfait, écoulement incompressible, propriétés chimiques constantes, nombres de Lewis unitaires,...). Une variable d'avancement  $c$  de la réaction chimique est introduite, elle prend la valeur  $c=0$  dans les gaz

frais et  $c=1$  dans les gaz complètement brûlés. L'idée principale du BML est de présumer la PDF de la variable d'avancement  $c$  dans une position  $(x,t)$  comme la somme des contributions des gaz frais, brûlés et en combustion

$$P(c, x, t) = \underbrace{\alpha(x, t)\delta(c)}_{\text{Gaz frais}} + \underbrace{\beta(x, t)\delta(1-c)}_{\text{gaz brûlés}} + \underbrace{\gamma(x, t)f(c, x, t)}_{\text{gaz en combustion}} \quad 3.10$$

Où  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  indiquent respectivement la probabilité d'avoir à une position  $(x,t)$ , des gaz frais, des gaz brûlés et des gaz en combustion.  $\delta(c)$  et  $\delta(1-c)$  sont respectivement des fonctions de Dirac correspondantes aux gaz frais ( $c=0$ ) et aux gaz brûlés ( $c=1$ ). La normalisation de la PDF s'écrit :

$$\int_0^1 P(c, x, t)dc = 1 \quad 3.11$$

$$\text{Ce qui donne :} \quad \alpha + \beta + \gamma = 1 \quad , \quad \int_0^1 P(c, x, t)dc = 1 \quad 3.12$$

$$\text{Avec} \quad f(0) = f(1) = 0 \quad 3.13$$

L'équation de la variable d'avancement  $c$  est écrite sous la forme :

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i c) = \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i}) + \dot{\omega}_c \quad 3.14$$

Cette équation est moyennée et le taux de réaction moyen est donné à la position  $(x, t)$  :

$$\bar{\omega}_c(x, t) = \int_0^1 \dot{\omega}(c)P(c, x, t)dc = \gamma(x, t) \int_0^1 \dot{\omega}(c)f(c, x, t)dc \quad 3.15$$

Toutes les études sur ces modèles sont basées sur cette formulation. L'objectif est de déterminer les fonctions  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  et la fonction de densité de probabilité  $f$ .

En utilisant le nombre de Damköhler  $Da$ , et en comparant les échelles de temps de turbulence et chimique et le nombre de Reynolds turbulent  $Re_t$ , deux cas particuliers émergent :

$Re \gg Da \gg 1$  : La combustion est contrôlée par le transport turbulent et la zone de réaction peut être supposée infiniment fine. Ce qui veut dire que  $\gamma \ll 1$  (i.e.  $\alpha \gg \gamma$ ,  $\beta \gg \gamma$  on peut négliger  $\gamma$ )

**$Re \gg Da > 1$  ou  $Re > Da \gg 1$**  : Dans le premier cas, l'épaisseur de la flamme n'est pas négligeable.

Dans le second, les réactions chimiques ne sont pas infiniment rapides comparées au transport turbulent. Cette situation correspond aux "modèles des flammelettes". La zone de réactions est analysée comme une collection de flammes laminares.

Pour le cas où  $Re \gg Da \gg 1$ , l'analyse permet de donner :

$$\alpha = \frac{1-\tilde{c}}{1+\tau\tilde{c}} \quad 3.16$$

$$\beta = \frac{(1+\tau)\tilde{c}}{1+\tau\tilde{c}} \quad 3.17$$

$$\bar{\omega}_c = \frac{2}{2c_m-1} \frac{\bar{\rho}\tilde{c}(1-\tilde{c})}{\tau_t} \quad 3.18$$

avec

$$\tau = \frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 = \frac{T_b}{T_u} - 1 \quad 3.19$$

$$\tau_t = \frac{\varepsilon}{k} \quad \text{et} \quad c_m = \frac{\int_0^1 c\omega_c f(c)dc}{\int_0^1 \omega_c f(c)dc} \quad 3.20$$

On remarque que l'équation (3.16) démontre le modèle EBU. Le modèle BML est une dérivation théorique, où des suppositions sont clairement faites, tandis que EBU est basé initialement sur une approche phénoménologique.

### III.3.4 Pré-mélange Parfait et Temps Chimique Fini

#### III.3.4.1 Modèles en fonction de densité de probabilité PDF

Le calcul numérique des écoulements réactifs turbulents d'intérêt technique est généralement basé sur les méthodes stochastiques de la turbulence [18]. La fonction de densité de probabilité (PDF) est souvent utilisée pour considérer la probabilité de distribution de la quantité stochastique. En écoulement turbulents, la fonction de densité de probabilité  $P$  est fonction de la position dans l'espace  $x$  et du temps  $t$ . Alors,  $P(u, x, t)dU$  signifie la probabilité de trouver à la position  $x$  et au temps  $t$  une valeur  $u$  dans l'intervalle  $U \leq u \leq U + dU$ . Si  $P$  est connue, la valeur moyenne d'une quantité est définie par le moment d'ordre un,

$$\bar{u} = \int_{-\infty}^{+\infty} uP(u, x, t)du \quad 3.21$$

Et la variance de  $u$  par le moment central d'ordre deux,

$$\overline{u'^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (u - \bar{u})(v - \bar{v})P(u, v, x, t)dudv \quad 3.22$$

Puisque toutes les quantités de l'écoulement sont connectées les unes aux autres par les équations de Navier-Stokes, il est nécessaire de considérer les PDF jointes de ces quantités.

Par exemple, pour deux quantités  $u$  et  $v$ , la PDF jointe est définie par :

$$\overline{u'v'} = \int_{-\infty}^{+\infty} (u - \bar{u})(v - \bar{v})P(u, v, x, t)dudv \quad 3.23$$

En plus des quantités de l'écoulement, les gradients peuvent être aussi inclus dans la PDF jointe. Cette description stochastique a plusieurs avantages théoriques :

- La PDF peut être définie dans n'importe quel champ d'écoulement turbulent.

- Elle contient toute l'information pour décrire un écoulement instationnaire et réactif.
- Ces fonctions peuvent être aussi extraites des données expérimentales et des simulations DNS.

La difficulté réside dans la détermination de la PDF qui change d'un point à l'autre dans l'écoulement. Actuellement, deux approches sont utilisées :

- Présumer une forme de la PDF.
- Résoudre une équation de transport pour la PDF.