

UNIVERSITÉ SAAD DAHLAB – BLIDA 1

Institut d'Aéronautique et des Etudes Spatiales



THESE DE DOCTORAT

Spécialité : Aéronautique

**MODELISATION DES FLAMMES TURBULENTES DE
PREMELANGE : APPLICATION A UNE FLAMME
STABILISEE DANS UN ECOULEMENT A POINT D'ARRET**

Par

NECHE Ahmed

Devant le jury composé de :

B.Z. BENAOUDA	Professeur, Université de Blida 1	Président
O. GUERRI	Professeur, CDER Bouzaréah	Examinatrice
A. MATAOUI	Professeur, USTHB	Examinatrice
S. LARBI	Professeur, ENP	Examineur
Z. YOUNI	Professeur, Université de Blida 1	Encadreur
A. BENKHEDDA	Professeur, Université de Blida 1	Co- Encadreur

Blida, Juillet 2018

ملخص

في إطار هذه الأطروحة، سنتطرق بواسطة نموذج جبري الى نمذجة التدرج المعاكس للتدفقات المضطربة خلال نمذجة الشعلات الممزوجة المضطربة. بما أن الاحتراق سيكون في ظروف مزيج متغير فأنا سنستعمل نموذج ليبي ويليمسبواتيه (LW-P) في هذه الظروف. إن النموذج الحاصل قد أدمج مع نموذج الدرجة الثانية للأنسيابات المضطربة قصد استشراف نوعي لمنطقة التفاعل للشعلات الممزوجة المضطربة المستقرة عند نقطة توقف.

من أجل التحقق من هذا النموذج ، قمنا بماحاكاة تجربة اوسكيدي وهدار بالنسبة للشعلات المستقرة الماسية لمستوى التوقف و تجربة شنف وشفرد بالنسبة للشعلات المستقرة بعيدا عن مستوى التدفق.

أن مقارنة النتائج المتحصل عليها مع التجارب السالفة الذكر يظهر توافقا جيدا وهو مامكنا من التحقق و إثبات نجاعة النموذج المعروض في هذه الأطروحة.

كلمات مفاتيح

الاحتراق الممزوج المضطرب، الانسياب ذو نقطة توقف، نموذج ليبي ويليمسبواتيه (LW-P) ، المحاكات الرقمية للاحتراق، التدرج المعاكس لانتشار التدفقات المضطربة.

Résumé

Dans ce travail, on va présenter un modèle algébrique de fermeture des flux turbulents tenant en compte du phénomène de diffusion à contre gradient. Comme la combustion du mélange des gaz frais va se faire en présence de l'air environnant, la richesse du mélange initial va varier surtout au niveau de la périphérie de l'injecteur ce qui nous a conduit à utiliser le modèle LW-p de prémélange partiel dans cette situation. Le modèle ainsi obtenu est conjugué avec le modèle de turbulence du second ordre pour prédire la structure moyenne de la zone réactive dans le cas des flammes partiellement prémélangées stabilisées dans un écoulement à point d'arrêt.

Dans le but de valider notre modèle de combustion, on présente deux simulations numériques : la première correspond aux conditions d'expérimentation d'Escudié et Haddar pour les flammes adjacentes à la paroi et la seconde est celle de Cheng et Shepherd des flammes stabilisées loin de la paroi.

La comparaison des résultats de simulation obtenus avec notre modèle avec les résultats expérimentaux a montré une consistance remarquable du modèle pour prédire la combustion turbulente partiellement prémélangée.

Mots clés : Combustion turbulente prémélangée ; Ecoulement à point d'arrêt ; Modèle Libby-Williams de Poitiers ; Combustion numérique ; Diffusion contre gradient.

Summary

In this work, we will present an algebraic model closure of counter gradient diffusion for the turbulent fluxes in modeling turbulent premixed flames. The combustion will occur in a variable equivalence ratio and as partially premixed combustion is highlighted as one of the most relevant and important modeling challenges in the field of turbulent premixed combustion; we will use the LW-P model of combustion for this situation. The resulting model is combined with the second order model of turbulence $R_{ij}-\varepsilon$ in order to well predict the main structure of the flame zone in the case of stagnating flames.

A numerical simulation which corresponds to the experimental conditions of the experiment of Escudié and Haddar in the case of flames adjacent to the wall and the experiment of Cheng and shepherd in the case of free standing flames are presented in order to validate the model. The comparison of the results with the measurements was showing remarkable consistency and indicates that the model is a valid approach for predicting partially turbulent premixed flames.

Keywords: Turbulent premixed combustion; Stagnation flow; Libby- Williams-Poitiers model; Numerical combustion simulation, Counter gradient diffusion turbulent fluxes.

Remerciements

Je tiens à exprimer mes vifs remerciements à mon promoteur professeur Zineddine YOUNBI pour sa patience durant ces longues années et au professeur salah BOUKRAA d'avoir accepté de co-encadrer ce travail.

Mes remerciements s'adressent également aux membres du jury qui ont consacré une part de leur précieux temps pour assister à ma soutenance et juger mon travail : professeur Zouaoui Braham BENAOUA qui m'a fait l'honneur de présider le jury, professeur Ouahiba GUERRI du CDER, professeur Amina MATAOUI de l' USTHB, professeur Salah LARBI de l'ENP Alger et notre invité professeur Younes BENKHEDDA de l'université de Blida1 qui ont accepté d'en être les examinateurs.

J'exprime ma profonde reconnaissance à messieurs Michel CHAMPION et Djamel KARMED pour m'avoir accueilli dans le Laboratoire de Combustion et de Détonique de Poitiers d'une part et pour leurs conseils et soutien d'autre part.

Je remercie également D^r Rachid RENANE de l'Institut d'Aéronautique et des Etudes Spatiales de l'université de Blida1 pour sa participation active dans la réalisation du mémoire.

Je tiens à remercier particulièrement D^r Amina BENKHEDDA, directrice de l'Institut d'Aéronautique et des Etudes Spatiales de l'université de Blida1, pour son soutien et la finalisation de ce travail.

Je rends un grand hommage au professeur Norbert PETER de RWTH de l'université d'Aachen pour toutes les discussions fructueuses avec lui pendant l'école d'été à l'université de Lund en Suède en 2013.

Un grand merci pour tous ceux qui ont contribué de près ou de loin dans l'élaboration de travail.

Ahmed NECHE

Dédicaces

Je dédie ce travail à

- *Mes chers parents*
- *Ma femme*
- *Toute ma famille*
- *Tous mes amis*

Ahmed NECHE

TABLE DES MATIERES

RESUME

REMERCIEMENTS

DEDICACES

TABLE DES MATIERES

LISTE DES ILLUSTRATIONS GRAPHIQUES

LISTE DES TABLEAUX

INTRODUCTION	14
1. SYNTHESE BIBLIOGRAPHIQUE ET FORMULATIONS MATHEMATiques	19
1.1 Synthèse bibliographique sur les écoulements à point d'arrêt	19
1.1.1 Ecoulement inerte à point d'arrêt	20
1.1.1.1 cas d'un écoulement laminaire	21
1.1.1.2 Cas d'un écoulement turbulent	21
1.1.2 Ecoulement réactif à point d'arrêt	22
1.1.2.1 Cas des flammes laminaires de prémélange	22
1.1.2.2 Cas des flammes turbulentes de prémélange	24
1.1.3 Etudes théoriques et numériques des flammes turbulentes de prémélange stabilisées dans un écoulement à point d'arrêt	26
1.2 Equations de conservation pour les écoulements réactifs	28
1.2.1 Variables de la thermochimie	28
1.2.2 Equations de conservation de masse et d'espèces	30
1.2.3 Equations de la quantité de mouvement	31
1.2.4 Equation de la conservation d'énergie	31
1.2.5 Facteurs stœchiométriques	31
1.2.6 Cinétique chimique	32
1.2.7 Différents types de flammes	33
1.2.7.1 Flammes de diffusion	34
1.2.7.2 Flammes de prémélange	35

1.2.8 Approximation de Schvab-Zeldovitch	38
1.3 Conclusion	40
2. INTERACTION ENTRE LA COMBUSTION ET LA TURBULENCE	
2.1 Caractéristiques de la turbulence	42
2.2 Echelles de la turbulence	43
2.3 Flamme turbulente de prémélange	47
2.3.1 Vitesse de flamme turbulente	47
2.3.2 Echelles caractéristiques d'une flamme	48
2.3.3 Régimes de la combustion turbulente prémélangée	50
2.3.3.1 Régime de flammelettes : ($D_a > 1$ et $K_a < 1$)	51
2.3.3.2 Régime de flammes plissées épaissies : ($D_a > 1$ et $K_a > 1$)	52
2.3.3.3 Régime de flammes épaissies : ($D_a < 1$)	52
2.4 Equations moyennes et problèmes de fermeture	55
2.5 Modélisation de la turbulence	56
2.5.1 Viscosité turbulente et modèle $k - \varepsilon$	57
2.5.2 Approche au second ordre : modèle $R_{ij} - \varepsilon$	59
2.5.2.1 La diffusion	60
2.5.2.2 La production liée aux variations de masse volumique	61
2.5.2.3 La dissipation	61
2.5.2.4 La corrélation pression-déformation	61
2.5.2.5 L'équation du taux moyen de dissipation de l'énergie cinétique turbulente	63
2.6 Conclusion	63
3. MODELISATION DE LA COMBUSTION TURBULENTE	65
3.1 Les différentes approches de modélisation	65
3.2 Approches statistiques de la modélisation des flammes turbulentes prémélangées	69

3.2.1 Prémélange Parfait avec chimie infiniment rapide :	69
3.2.1.1 Modèle Eddy-Break-Up (EBU)	69
3.2.1.2 Modèle Bray-Moss-Libby (BML)	70
3.2.2 Prémélange Partiel	73
3.2.2.1 Le modèle Libby Williams (LW)	74
3.2.2.2 Le modèle Libby Williams Poitiers (LW-P)	77
3.2.2.2.1 Cinétique chimique	78
3.2.2.2.2 Espaces des compositions	79
3.2.2.2.3 Paramètres de la PDF	80
3.2.2.2.4 Comportement de la PDF	85
3.3 Conclusion	87
4. TRANSPORTS TURBULENTS ET DISSIPATIONS SCALAIRES	88
4.1 Transports gradient et contre-gradient	88
4.1.1 Analyse physique des phénomènes gradient et contre gradient	91
4.1.2 Modélisation des flux turbulents de la variable d'avancement	95
4.2 Modélisation du terme d'interaction fluctuations de vitesse-gradient de pression moyenne	97
4.3 Modèles de fermeture des équations de transport	99
4.3.1 Modélisation des flux turbulents des variances des scalaires	101
4.3.2 Modélisation des termes dus à la réaction chimique	101
4.3.3 Modélisation des termes de dissipation scalaire	102
4.3.3.1 Modélisation de la dissipation scalaire de la fraction de mélange	102
4.3.3.2 Modélisation de la dissipation scalaire de la fraction massique du combustible $\tilde{\omega}$ et de la covariance	103
4.3.3.2.1 Prémélange Parfait	104
4.3.3.2.2 Prémélange Partiel	105
4.3.3.2.2.1 Expressions des seconds moments dans le régime des flammes plissées	107

4.3.3.2.2 Facteur de ségrégation S_y	109
4.4 Conclusion	110
5. SIMULATIONS NUMERIQUES ET COMPARAISON AVEC L'EXPERIENCE	112
5.1 Flamme adjacente à la paroi	113
5.1.1 Conditions de calcul	114
5.1.1.1 Conditions initiales	114
5.1.1.2 Conditions aux limites	115
5.1.2 Simulation de l'écoulement non réactif	117
5.1.3 Simulation de l'écoulement réactif	119
5.2 Flamme stabilisée loin de la paroi	127
5.2.1 Conditions de calcul	128
5.2.1.1 Conditions initiales	128
5.2.1.2 Conditions aux limites	128
5.2.2 Simulation de l'écoulement non réactif	129
5.2.3 Simulation de l'écoulement réactif	132
5.3 Conclusion	142
CONCLUSION	143
REFERENCES	145
NOMENCLATURE	155

LISTE DES ILLUSTRATIONS GRAPHIQUES

Figures	pages
Figure 1.1 : Schéma de l'écoulement à point d'arrêt	8
Figure 1.2 : Impact d'un jet axisymétrique contre une paroi solide	10
Figure 1.3 : Structure d'une flamme de diffusion laminaire	22
Figure 1.4 : Structure du front de flamme de prémélange laminaire	23
Figure 1.5 : Définition de la variable d'avancement	24
Figure 1.6 : Domaine d'existence des couples	27
Figure 2.1 : Cascade d'énergie de Kolmogorov	31
Figure 2.2 : Spectre d'énergie pour une turbulence homogène et isotrope	32
Figure 2.3 : Diagramme de régimes pour la combustion prémélangée	37
Figure 2.4 : Flamme plissée avec poches	38
Figure 2.5 : Diagramme de combustion prémélangée modifié	40
Figure 3.1 : Types d'analyses des flammes turbulentes d'après Veynante et Vervish	51
Figure 3.2 : Positions des pics de Dirac dans l'espace des compositions	60
Figure 3.3 : Domaine d'existence des couples (ξ, Y)	63
Figure 3.4 : Répartition des pics de Dirac dans le domaine d'existence	65
Figure 3.5 : Comportement de la PDF	69
Figure 4.1 : Représentation d'une flamme turbulente dans un écoulement monodimensionnel	72
Figure 4.2 : Front de flamme turbulente pour une faible intensité de turbulence	75
Figure 4.3 : Front de flamme turbulente pour une forte intensité de turbulence	76
Figure 4.4 : Définition des vecteurs unitaires	78
Figure 5.1: Domaine de calcul	94
Figure 5.2: Comparaison des champs des vitesses entre le cas réel et le cas d'une entrée de dilution	97
Figure 5.3 : Comparaison du profil de la vitesse axiale moyenne sur l'axe de l'injecteur avec les résultats expérimentaux d'Escudié et Haddar	98

Figure 5.4 : Profils axiaux de la vitesse axiale moyenne sur différentes positions radiales	99
Figure 5.5 : Profils axiaux de la vitesse radiale moyenne sur différentes positions radiales	99
Figure 5.6 : Comparaison du profil de la vitesse axiale moyenne sur l'axe de l'injecteur	100
Figure 5.7 : Comparaison de la variable d'avancement moyenne sur l'axe de l'injecteur avec les résultats de Lahjaily et al.	101
Figure 5.8 : Zone de réaction moyenne et terme du taux de production chimique	102
Figure 5.9 : Profils axiaux de l'évolution de la vitesse axiale moyenne	103
Figure 5.10 : Profils axiaux de l'évolution de la vitesse radiale moyenne	104
Figure 5.11 : Profils axiaux de l'énergie cinétique de turbulence moyenne	104
Figure 5.12 : Profils axiaux de la température et de la variable d'avancement moyenne	105
Figure 5.13 : Champs de la fraction massique du combustible et de la fraction de mélange, leurs variances et leur covariance	106
Figure 5.14 : Domaine de calcul	108
Figure 5.15 : Profils axiaux de l'évolution de la vitesse axiale moyenne	110
Figure 5.16 : Profils axiaux de l'évolution de la vitesse radiale moyenne	111
Figure 5.17 : Profils axiaux de l'évolution de l'énergie cinétique moyenne	112
Figure 5.18 : Comparaison des flux turbulents de masse sur l'axe de l'injecteur avec les résultats expérimentaux Shepherd et al	113
Figure 5.19 : Comparaison de la vitesse axiale moyenne sur l'axe de l'injecteur avec les résultats expérimentaux Shepherd et al	114
Figure 5.20 : Comparaison de la variable d'avancement moyenne sur l'axe de l'injecteur avec les résultats expérimentaux Shepherd et al	116
Figure 5.21 : Comparaison des fluctuations de la vitesse radiale et axiale sur l'axe de l'injecteur avec les résultats expérimentaux Shepherd et al	117
Figure 5.22 : Zone de réaction moyenne et terme du taux de production chimique	117
Figure 5.23 : Profils axiaux de l'évolution de la variable d'avancement moyenne	118
Figure 5.24 : Profils axiaux de l'évolution de la vitesse axiale moyenne	119
Figure 5.25 : Profils axiaux de l'évolution de la vitesse radiale moyenne	120
Figure 5.26 : Champs de la fraction massique du combustible et de la fraction de mélange, leurs variances et leur covariance	121

LISTE DES TABLEAUX

Titre du tableau	page
Tableau 2.1 : Constantes du modèle $k - \varepsilon$	44
Tableau 2.2 : Constantes du modèle $R_{ij} - \varepsilon$	49
Tableau 5.1 : Les propriétés physiques du mélange Méthane-Air	55

INTRODUCTION

Les phénomènes de combustion interviennent dans la majorité des systèmes de production d'énergie : les centrales thermiques pour la production d'électricité, les moteurs à combustion interne, les foyers de turboréacteurs, les fours industriels,

Dans le cadre général, les industriels des transports et de l'énergie ont intensifié les efforts de recherche dans le but de perfectionner les procédés de combustion. L'élévation du niveau technologique des chambres de combustion consiste à étudier les couplages entre les différents phénomènes physiques comme la thermodynamique, les transferts thermiques et la cinétique chimique. En outre, la combustion est fortement affectée par le caractère turbulent des écoulements qui est souvent recherché pour accroître la puissance spécifique dégagée. Cette interaction intense entre combustion et turbulence a donné lieu à une intense activité de recherche sur le plan expérimental, théorique et numérique.

Les études expérimentales et numériques concernant les écoulements turbulents réactifs se sont accrues durant ces cinquante dernières années dans le but d'augmenter les rendements et l'efficacité des systèmes d'une part et la réduction de composés polluants d'autre part. Par conséquent, ce compromis doit permettre la mise en œuvre de foyers efficaces, plus écologiques tout en assurant leur fiabilité.

Cependant, la simulation numérique de la combustion turbulente est devenue un atout majeur parce qu'elle réduit le coût et le délai de fabrication des prototypes très souvent onéreux. En outre lors des simulations numériques, un grand nombre d'informations (la température, les concentrations des espèces chimiques, les champs de vitesse, l'intensité de la turbulence, les zones de réaction et toutes autres variables moyennes) seront disponibles par rapport à des mesures expérimentales ce qui permet d'étudier la sensibilité à un paramètre

donné. Pour cela, il est bien sûr primordial que les modèles numériques soient suffisamment prédictifs.

En effet, l'étude de la combustion turbulente a eu pour objectif principal la compréhension et la modélisation des phénomènes complexes qui entrent en jeu et leurs interactions (nature de la flamme qu'elle soit de prémélange ou de diffusion, l'interaction entre la chimie et la turbulence, le type du combustible et la géométrie de la configuration).

Les écoulements réactifs turbulents sont décrits par un certain nombre de variables : les variables cinématiques (les vitesses dans les différentes directions), les variables chimiques (les fractions massiques de la particule fluide en les divers constituants) et les variables thermodynamiques (l'énergie interne ou l'enthalpie de la particule fluide). Ces variables seront calculées en tout point d'un champ d'écoulement et à chaque instant en satisfaisant les équations de bilan correspondantes qui sont le bilan de quantité de mouvement (Equations de Navier Stokes), le bilan d'énergie et les bilans de masses.

La résolution de ces équations est envisageable selon trois classes qui se différencient par la gamme des échelles de temps et d'espace résolues et modélisées :

-La DNS, Direct Numerical Simulation, est la résolution instationnaire des équations de transport. Cette méthode nécessite des tailles de cellules de calcul de l'ordre du micron (μm) et des pas de temps de l'ordre de la microseconde (μs) pour capturer la dynamique et la cinétique chimique [1]. Pour une géométrie de chambre de combustion réelle, la simulation directe n'est pas encore utilisée car elle nécessite une quantité de mémoire et un temps de calcul prohibitifs pour les ordinateurs actuels. Cette limitation technologique limite la taille des géométries à quelques mm^3 et des travaux de modélisation seront nécessaires afin de permettre le calcul des quantités moyennes ou filtrées en tenant compte des différents mécanismes physiques qui peuvent se produire aux petites échelles.

-La LES, Large Eddy Simulation, consiste à résoudre les équations de transport filtrées où les gros tourbillons sont simulés alors que les plus petits sont modélisés [2]. La taille des cellules est alors plus grande et la simulation de géométries

complexes est devenue accessible. Néanmoins cette technique est récente, en cours de développement, ce qui rend son application pour la simulation envisageable à court terme.

-Les méthodes RANS, Reynolds Average Navier Stokes, consistent à résoudre des équations de transport moyennées. C'est la technique la plus rapide et la plus utilisée dans l'industrie. Ainsi, tous les développements dans cette thèse sont valables pour cette approche.

La configuration géométrique retenue pour cette étude est celle d'un jet turbulent provenant d'un injecteur cylindrique, qui vient heurter, sous incidence normale, une paroi plane située à une distance donnée de l'injecteur. Une telle configuration permet d'obtenir une flamme plane en moyenne stabilisée entre le plan d'arrêt et le brûleur d'où est issu le mélange réactif.

Dans cette simple configuration géométrique, l'écoulement entier est décrit en distinguant trois zones principales selon la distance entre l'injecteur et la paroi [3, 4, 5] :

-La zone de jet libre où l'écoulement turbulent issu de l'injecteur n'est pas encore affecté par la présence du plan d'arrêt. Le jet évolue tout en entraînant sur ses bords le fluide environnant mais la vitesse au voisinage de l'axe de l'injecteur n'est pas influencée. Cette zone est appelée le cœur potentiel.

-La zone du point d'arrêt où la présence du plan d'arrêt influence l'écoulement. De forts gradients de pression retardent l'écoulement et le font dévier sur la paroi. Dans cette zone, l'écoulement ne possède pas de direction privilégiée.

-La zone du jet pariétal qui est, dans le cas d'un écoulement turbulent réactif, constituée des produits de combustions dilués avec l'air extérieur évolue sur la paroi à pression pratiquement constante.

Dans ce travail, la modélisation des flammes turbulentes de prémélange repose sur une analyse statistique analogue à celle utilisée en turbulence. Cette approche consiste à représenter la flamme turbulente comme une collection de flammelettes laminaires qui sont des interfaces en réaction séparant les gaz frais des gaz brûlés. Ces flammelettes évoluent et se propagent par rapport aux gaz

frais en produisant des gaz brûlés sur leur passage qui par expansion thermique modifient les propriétés de l'écoulement.

L'expansion thermique induite par ces réactions de combustion a un effet déterminant sur le champ de vitesses dans le cas des écoulements turbulents réactifs. Le mécanisme d'interaction entre la chimie et la turbulence peut conduire au phénomène connu sous le nom transport non gradient ou bien à contre gradient [6,7,8].

La représentation de ce phénomène par un modèle mathématique est envisagée dans ce travail en considérant que le champ de vitesses est constitué de deux contributions : la première est dûe au mécanisme de plissement du front de la flamme par la turbulence et la seconde est associée à l'expansion thermique à la traversée de la flammelette. Cette analyse physique va nous conduire à formuler une expression algébrique pour les termes des transports turbulents qui apparaissent dans les équations de bilan de quantité de mouvement.

Ce mémoire s'articule autour de cinq chapitres :

Le chapitre 1 est consacré à l'état de l'art des flammes turbulentes de prémélange stabilisées dans un écoulement à point d'arrêt. Il s'attache aussi aux propriétés des flammes de prémélange et aux hypothèses simplificatrices utilisées dans notre travail notamment celle de Schvab-Zeldovitch.

Dans le chapitre 2, on donne une description physique du comportement des flammes de prémélange en régime turbulent. Le comportement qualitatif des flammes turbulentes prémélangées en régime de flammelettes est détaillé et les hypothèses générales adoptées sont posées. Nous donnons par la suite la décomposition des variables du problème en une valeur moyenne et une fluctuation qui amènent des termes supplémentaires inconnus dans les équations de bilan des grandeurs moyennes : les tensions de Reynolds dans les équations de Navier Stokes, le taux de production chimique moyen et les flux turbulents dans l'équation de l'espèce réactive. Dans ce chapitre, la modélisation des tensions de Reynolds est présentée par le modèle $k - \varepsilon$ en premier lieu et puis par le modèle du second ordre $R_{ij} - \varepsilon$ qui sera utilisé par la suite de notre travail.

Le chapitre 3 est consacré aux différentes approches pour la modélisation en combustion. Nous avons rappelé le modèle BML utilisé en prémélange parfait et puis le modèle LW et LW-p pour le prémélange partiel avec l'équation du taux de production chimique.

Dans le chapitre 4, nous nous sommes concentrés sur la modélisation des transports turbulents en introduisant un modèle algébrique permettant de prendre en compte l'effet de l'expansion thermique des gaz brûlés sur la turbulence connu sous le nom de transport à contre gradient. Dans ce modèle de fermeture, on présente les flux turbulents comme une contribution de deux flux agissant en directions opposées : une est induite par les fluctuations de vitesse (transport gradient) et l'autre est due à l'expansion thermique des gaz (transport à contre gradient). Ensuite, on passe à la modélisation des flux turbulents des variances des scalaires, des termes dus à la réaction chimique et des termes de dissipation scalaire.

Le chapitre 5 est consacré à la comparaison de nos résultats de la simulation numérique avec notre modèle avec les données expérimentales d'une part et les autres résultats numériques publiés dans la littérature spécialisée d'autre part. Pour ce fait, nous avons présenté deux simulations numériques pour deux cas de flammes turbulentes de prémélange stabilisées dans un écoulement à point d'arrêt : la première est adjacente à la paroi (flamme mince très étirée) et la seconde est stabilisée loin de la paroi (flamme épaissie).

Pour chaque flamme, le calcul est réalisé avec la méthodologie suivante :

- La prédiction de l'écoulement non réactif permettant de quantifier l'influence de la modélisation de la turbulence sur les résultats.
- La prédiction de l'écoulement réactif avec notre modèle.

La comparaison réalisée dans ce chapitre va nous permettre de dégager les principales tendances du comportement de notre modèle en fonction de la configuration géométrique des écoulements considérés.

CHAPITRE 1

SYNTHESE BIBLIOGRAPHIQUE ET FORMULATIONS MATHÉMATIQUES

1.0 Introduction

Nous dressons au début de ce chapitre une synthèse bibliographique sur les écoulements turbulents à point d'arrêt autant en comportement inerte qu'en comportement réactif. Cette synthèse soulignera les sujets d'intérêt des travaux antérieurs avec et sans combustion. Ensuite, nous rappelons les différentes grandeurs caractéristiques qui interviennent dans l'étude des écoulements turbulents réactifs avec les équations mises en jeu décrivant leurs évolutions. En dernier lieu, nous décrivons l'interaction entre les flammes et la turbulence.

1.1 Synthèse bibliographique sur les écoulements à point d'arrêt

L'écoulement à point d'arrêt peut être réalisé de deux façons. La première consiste à placer une paroi matérielle perpendiculairement à un écoulement issu d'un injecteur. Le point d'arrêt sera le point d'intersection entre l'axe du jet et la paroi. La seconde est de placer deux jets axisymétriques opposés. Dans cette dernière configuration, on peut avoir deux jets de réactifs opposés (R-R) faisant vivre deux flammes de part et d'autre du plan de symétrie ou bien un jet de réactifs opposé à un jet de produits (R-P) formant une flamme unique. (Voir figure 1.1).

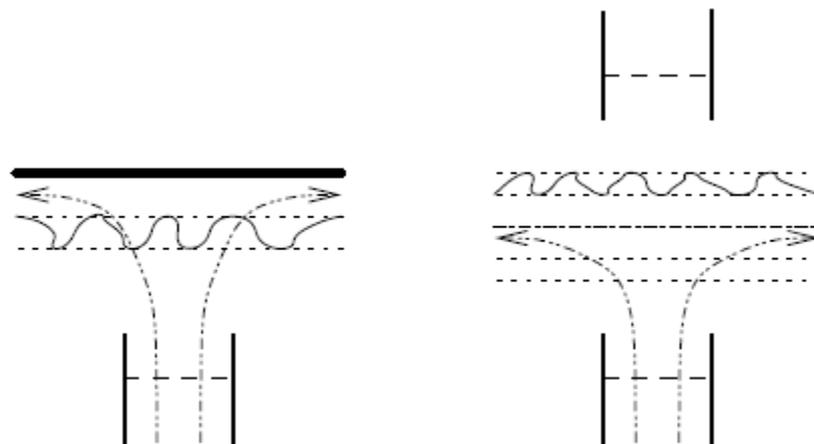


Figure 1.1 Schéma de l'écoulement à point d'arrêt [11]

Le jet provenant de l'injecteur subit une divergence sous l'influence du point d'arrêt et un écoulement pariétal est formé le long du plan d'arrêt. La région d'impact se distingue par l'absence de direction privilégiée et la divergence de l'écoulement est caractérisée par un étirement défini par :

$$2a = - \left\{ \frac{\partial w}{\partial z} \right\}_0 \quad (1.1)$$

où : a est l'étirement, w est la vitesse selon l'axe du jet et O est le point d'arrêt.

Une étude menée par Bray et al. [9] en décrivant l'écoulement au voisinage de l'axe de symétrie par une fonction de courant modifiée à aboutit à une expression simple de l'étirement :

$$a = \frac{W}{H} \quad (1.2)$$

où : W est la vitesse axiale d'injection et H est la distance entre le bruleur et le plan d'arrêt.

1.1.1 Ecoulement inerte à point d'arrêt

L'écoulement à point d'arrêt est réglé par le rapport géométrique entre la distance injecteur-paroi et le diamètre de l'injecteur (H/D) et l'étirement. Cet écoulement est classiquement décomposé en trois zones distinctes :

La zone de jet libre où le fluide ne ressent pas la présence de la paroi. Les propriétés de l'écoulement sont celles d'un jet libre.

La zone de déflexion où l'écoulement subit l'effet de la paroi ce qui engendre de forts gradients de pression adverses qui le ralentissent et le font diverger. Ainsi, l'écoulement ne se propage suivant aucune direction privilégiée.

La zone de jet pariétal où le fluide s'éloigne radialement du point d'arrêt.

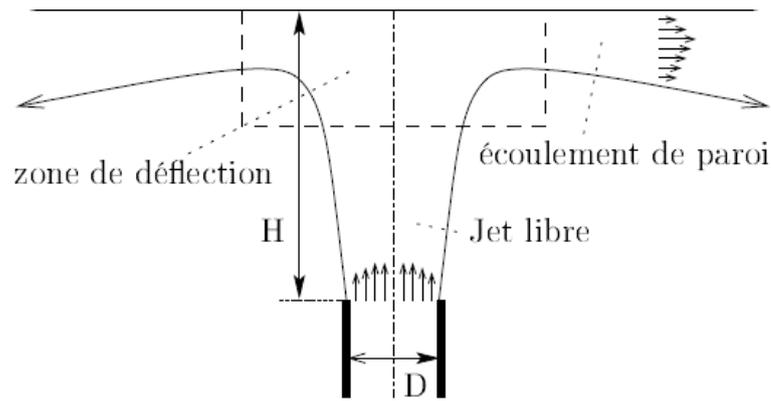


Figure 1.2 : Impact d'un jet axisymétrique contre une paroi solide [11]

1.1.1.1 cas d'un écoulement laminaire

Pour cet écoulement, la solution exacte des équations de Navier Stokes ne peut pas être obtenue analytiquement. Ce problème est décrit en détail par Schlichting [10] qui suppose que la distribution de la vitesse au voisinage du point d'arrêt dérive d'un potentiel :

$$u = -ax \quad \text{et} \quad w = -az \quad (1.3)$$

où : a est une constante qui correspond à l'étirement aérodynamique, u et w sont respectivement la vitesse radiale et la vitesse axiale et x et z les coordonnées correspondantes.

1.1.1.2 Cas d'un écoulement turbulent

L'impact d'un jet turbulent contre une paroi solide trouve beaucoup d'applications comme dans le domaine de l'aéronautique (avion à décollage vertical), ou dans l'industrie utilisant les techniques de transferts thermiques ou bien dans l'industrie relative aux traitements de surfaces (jets liquides). Kestin&Maeder puis Gardon & Akfirat [11] sont les premiers à mettre en évidence expérimentalement l'intensification des transferts thermiques. D'autres comme Schauer&Eustis [11] se concentrent sur la mesure des vitesses de l'écoulement sur l'axe du jet.

Des approches théoriques et numériques ont suivi ces études expérimentales. Traci&Wilcox [12] étaient les premiers à traiter ce type

d'écoulement comme un problème à trois régions. Dans leur étude, la méthode de résolution est basée sur le raccordement des solutions de chaque région à leurs frontières. En 1987, Strahle et al.[13] ont modélisés la turbulence par le modèle $k-\varepsilon$ en introduisant les moyennes de Favre pour tenir compte des fluctuations de la masse volumique. Leurs résultats n'étaient valables que pour les faibles nombres de Reynolds.

De même, Champion et Libby [14, 15] réalisent une analyse asymptotique et identifient les trois régions par leurs échelles caractéristiques. Ensuite, ils appliquent ces méthodes asymptotiques à la modélisation des contraintes de Reynolds en premier lieu dans le cas de deux jets turbulents opposés [16] et puis dans le cas d'un jet impactant une paroi solide [17].

1.1.2 Ecoulement réactif à point d'arrêt

Les flammes laminaires stabilisées dans un écoulement à point d'arrêt font l'objet de plusieurs études tant sur le plan théorique, expérimental et numérique. Nous nous limiterons ici au cas des flammes de prémélange.

1.1.2.1 Cas des flammes laminaires de prémélange

Une analyse théorique des flammes laminaires à point d'arrêt dans la configuration R-P, au voisinage de l'axe de symétrie, a été effectuée par Libby et Williams [18, 19, 20,21]. Leur analyse est basée sur la méthode asymptotique pour l'énergie d'activation (AEA) développée par Liñan [22]. Dans leurs travaux, Libby et Williams considèrent une flamme stabilisée entre deux jets axisymétriques opposés. L'un est un jet de gaz frais et l'autre est un jet de gaz brûlés à la température adiabatique caractéristique du jet des gaz frais. Ils concluent que pour des conditions thermochimiques fixées, la position de la flamme dépend fortement du taux d'étirement. Ainsi, pour des taux d'étirement faibles, la zone de réaction est dominée par la diffusion et elle est située du côté des gaz frais par rapport au plan d'arrêt. Au fur et à mesure que le taux d'étirement diminue, la flamme est stabilisée loin du plan d'arrêt. Dans le cas où le taux d'étirement est suffisamment grand, la zone de flamme est située cette fois-ci du côté des gaz brûlés par rapport au plan d'arrêt et elle est décrite par un équilibre diffusion – convection – réaction. En effet, dans cette zone, la convection

se fait dans le sens gaz brûlés – gaz frais et la diffusion doit équilibrer la convection et le terme source dû à la réaction chimique.

Par ailleurs, Darabiha et al. [23] ont réalisé une étude numérique de la flamme laminaire dans les mêmes conditions que celles de l'analyse théorique de Libby et Williams [18]. Les résultats de leurs calculs confirment ceux de Libby et Williams et permettent de prédire la valeur critique du taux d'étirement à partir de laquelle la flamme se situe du côté des gaz brûlés.

Les études expérimentales sur les flammes laminaires de prémélange à point d'arrêt sont nombreuses et couvrent une grande variété de types de flammes.

Parmi ces études, nous commençons par l'étude de Law et al. [24] qui considèrent le cas d'une flamme pauvre propane – air stabilisée par une paroi solide. Ils mettent en évidence deux types de flammes : une flamme accrochée au bord de l'injecteur pour les grandes richesses du mélange réactif ou pour des vitesses faibles du jet et une flamme décrochée du bord de l'injecteur et parallèle au plan d'arrêt. En effet, leur étude a montré l'évolution de la distance flamme-paroi en fonction de la vitesse d'injection et de la richesse du mélange réactif.

Une autre étude est celle d'Ishizuka et al. [25] où ils caractérisent également l'extinction en terme de vitesse d'injection et de richesse du mélange frais pour des mélanges méthane-air et propane-air dans une configuration de jets opposés axisymétriques.

Bien d'autres études expérimentales et numériques existent dans la littérature. Citons par exemple, l'étude expérimentale des flammes à point d'arrêt de type R-R proches de l'extinction menée par Tsuji et Yamaoka [26, 27] et l'investigation expérimentale menée par Sato [28] sur l'effet du nombre de Lewis sur l'extinction de ces flammes.

Plusieurs études numériques dans le cadre d'une chimie complexe concernant l'extinction des flammes de prémélange à point d'arrêt existent dans la littérature. Nous citerons ici à titre d'exemple celles de : Giovangigli et Smooke [29], Law et Wu [30] et Mendes-Lopes [31].

1.1.2.2 Cas des flammes turbulentes de prémélange

L'étude des caractéristiques des flammes turbulentes à point d'arrêt a l'avantage que la flamme est stabilisée dans la zone de divergence de l'écoulement et elle ne s'accroche à aucun obstacle matériel. Ainsi, aucune zone de recirculation qui pourrait se convecter vers la zone de flamme n'est créée. Dans la mesure où l'on reste dans le régime de flammelettes, le mécanisme de stabilisation des flammes turbulentes à point d'arrêt peut être considéré comme semblable à celui des flammes laminaires [32]. Pour des taux d'étirement relativement faibles, la zone moyenne de la flamme est située loin du point d'arrêt et seuls les gaz brûlés sont alors présents au plan d'arrêt. En revanche, pour des taux d'étirement élevés, les flammelettes touchent le plan d'arrêt et les réactifs sont alors présents pour une fraction de temps au point d'arrêt ce qui caractérise l'approche de l'extinction.

Sur le plan expérimental, les premiers travaux ont été entrepris en 1986 par Cho et al. [33, 34]. Ils considèrent un mélange frais de méthane-air de richesse allant de 0.67 à 1.16, des fluctuations de vitesse incidente de 0.1 à 0.7 m/s et des taux d'étirement variant entre 100 et 230 s⁻¹. Ils montrent que la vitesse turbulente de la flamme augmente avec l'augmentation de l'intensité de turbulence et que les flammes les plus riches se situent loin de la paroi avec un saut important de la vitesse axiale à travers la flamme. La fluctuation de la vitesse axiale augmente à travers la zone de flamme mais cette augmentation reste faible pour les mélanges les plus pauvres.

Liu et Lenze [35] ont aussi étudié l'influence de l'intensité de turbulence sur la vitesse de flamme turbulente pour des prémélanges (CH₄-H₂) dont la vitesse de la flamme laminaire varie de 18 à 72 m/s. Pour des fluctuations de la vitesse axiale variant entre 0.1 et 1.2 m/s et des taux d'étirement allant de 70 à 280 s⁻¹, ils montrent que la vitesse de flamme turbulente varie linéairement avec l'intensité de turbulence pour les mélanges pauvres.

Les expériences menées par Shepherd et al. [36, 37, 38] à Lawrence Berkeley Laboratory concernent des mélanges CH₄-air et C₂H₂-air à des richesses allant de 0.7 à 1. Ils proposent une étude comparative des flammes en V, de bec-Bunsen et des flammes stabilisées contre une paroi solide. Ces auteurs

soulignent la difficulté de modéliser la combustion turbulente à travers un modèle unifié, puisque le transport turbulent dépend de la géométrie. Ils ajoutent que les fluctuations conditionnées dans les gaz brûlés augmentent à travers la zone de flamme tandis que celles conditionnées dans les gaz frais ne subissent qu'une légère augmentation à travers la flamme.

Kostiuk [39] et Kostiuk et al. [40, 41] ont étudié expérimentalement les flammes turbulentes stabilisées dans un écoulement à jets opposés de mélange réactif méthane – air et propane-air. Les deux jets sont formés du même mélange réactif et ont des conditions dynamiques identiques. Ces auteurs ont mis en évidence deux flammes de part et d'autre du plan d'arrêt et une symétrie par rapport à ce dernier. Ces deux zones de flamme peuvent devenir tellement proches du plan d'arrêt et proches l'une de l'autre qu'elles semblent en constituer qu'une seule flamme. Cet état est obtenu soit en diminuant la distance séparant les injecteurs, soit en augmentant la vitesse de sortie des brûleurs, soit en intensifiant la turbulence ou en diminuant la richesse du mélange.

En utilisant la configuration de la flamme impactant une paroi solide, Escudié, Haddar et Brun [42, 43] ont étudié l'effet de l'étirement global sur ces flammes. Les résultats de leurs expériences concluent que la position de la flamme dépend fortement de la vitesse d'injection et par conséquent de l'étirement. Malheureusement, aucun résultat sur l'évolution de la variable d'avancement ni sur l'évolution des flux turbulents n'est donné.

L'étude de l'influence de la turbulence sur les flammes de prémélange stabilisées dans un écoulement à point d'arrêt a été entreprise en 1994 par Li, Libby et Williams [44] et ensuite par Stevens [45, 46] en 1998. Ces auteurs confirment la présence de la diffusion à contre gradient observée par Cho et al. [34] et Cheng et al. [37] dans le cas des flammes stabilisées loin de la paroi. Ils mettent aussi en évidence l'influence de l'échelle intégrale de turbulence sur l'épaisseur de la zone de flamme. Les mêmes conclusions ont été retenues par Kalt et al. [47] et Coron [11]. Ces auteurs se sont intéressés par les mesures des vitesses conditionnées et de la variable d'avancement dans l'intérêt de la détermination des transports turbulents scalaires.

En analysant les résultats les plus importants auxquels les expérimentateurs que nous avons cité ont abouti, nous pouvons conclure que :

Il existe deux types de flammes stabilisées contre une paroi : les flammes soumises à de forts taux d'étirement global seront stabilisées près du plan d'arrêt et sont proches de l'extinction. On notera, dans ce cas, une production faible d'énergie cinétique de turbulence à travers la flamme. Par contre, les flammes soumises à de faibles taux d'étirement sont stabilisées plus près de l'injecteur. Dans ce cas, Il y a une production de turbulence à travers la flamme qui s'accompagne d'une diffusion à contre gradient [37, 44].

La position de la zone de flamme est contrôlée par plusieurs paramètres à savoir : la richesse du mélange réactif [33], la vitesse de flamme laminaire [37, 35], l'échelle intégrale de turbulence incidente [44], la turbulence incidente [35] et enfin la vitesse d'injection ou bien le taux d'étirement global [42]. Les trois premiers paramètres peuvent être traités en considérant le nombre adimensionnel de Damköhler défini par :

$$D_a = \frac{L_t S_L}{\delta_L u'} \quad (1.4)$$

où : L_t est l'échelle intégrale spatiale de la turbulence, S_L la vitesse de la flamme laminaire, δ_L est l'épaisseur de la flamme et u' est la fluctuation de la vitesse.

Il est à noter que pour les grandes valeurs de ce nombre, la flamme se stabilise plus loin de la paroi.

1.1.3 Etudes théoriques et numériques des flammes turbulentes de prémélange stabilisées dans un écoulement à point d'arrêt

Une modélisation des flammes proches de la paroi a été proposée par Bray, Champion et Libby [9,48, 49, 50, 51]. Cette modélisation est basée sur le modèle de combustion Bray Moss Libby (BML) et le modèle de turbulence $k-\varepsilon$ avec une hypothèse gradient pour les flux turbulents de masse. Leurs études asymptotiques au voisinage de l'axe du jet ont permis de déterminer la position de la flamme d'une part et la caractérisation de l'extinction d'autre part.

Les calculs basés sur une étude asymptotique au voisinage de l'axe de symétrie menés par Wu [52] et utilisant le modèle de flamme cohérente ont confirmé l'hypothèse du nombre de Damköhler turbulent constant uniquement pour les flammes adjacentes à la paroi où subsistent des gaz frais au point d'arrêt. En revanche, Wu a montré que ce nombre varie considérablement dans le cas des flammes stabilisées loin de la paroi.

A la base des résultats obtenus par Wu, Bray et al. [50] qui ont analysés les expériences de Escudié et Haddar [52], de Li et al. [52] et de Cheng et Shepherd [52]. Ils ont déterminé le nombre de Damköhler turbulent moyen de ces trois expériences le long de l'axe de symétrie en se donnant les profils expérimentaux de la variable d'avancement et de la vitesse. Ils conclurent que le nombre de Damköhler turbulent moyen augmente à la traversée de la flamme et il n'est fonction que de la variable d'avancement moyenne.

Une étude numérique réalisée par Karmed [3, 53] reposant sur le modèle BML avec un nombre de Damköhler turbulent constant pour le terme de production chimique et le modèle $k-\varepsilon$ pour la turbulence a confirmé les résultats de Bray et al. [9, 49, 50, 51]

Par la suite, Karmed et al. [54] ont mené une étude numérique basée sur un modèle du second ordre $R_{ij}-\varepsilon$ pour la turbulence avec le transport de la variable d'avancement. Ils ont pu reproduire le profil de la vitesse axiale et de la variable d'avancement le long de l'axe de symétrie mais ils ont failli à reproduire le profil des flux turbulents de masse.

Dans toutes les études théoriques et numériques déjà citées, la flamme obtenue est accrochée au bord du brûleur. Ceci était dû au fait que dans le modèle BML, la description de la thermochimie du mélange réactif est basée uniquement sur la variable d'avancement c ($c=0$ dans les gaz frais et $c=1$ dans les gaz brûlés). Cette description ne permet pas de différencier les produits de la combustion de l'air environnant.

Afin de remédier au problème d'accrochage de la flamme, Lahjaily [5] et Lahjaily et al.[55] ont proposé un modèle à richesse variable pour la combustion turbulente des mélanges pauvres. Cette variation de la richesse est due au

mélange des gaz frais issus de l'injecteur et de l'air ambiant. Dans ce cas, la description thermochimique du mélange est basée sur deux variables scalaires : une fraction de mélange directement liée à la richesse du mélange frais des réactifs et une variable d'avancement qui permet de décrire les zones de réaction. Les résultats obtenus permettent de quantifier l'effet de la dilution par l'air extérieur sur la structure de la flamme.

Récemment, une étude asymptotique sur le taux de dissipation de la variable d'avancement dans le cas des flammes turbulentes stabilisées dans un écoulement à point d'arrêt a été réalisée par Dong et al., Hsieh et al. et Bray et al. [56, 57, 58]. Cette étude au voisinage de l'axe de symétrie a montré l'influence du transport contre gradient des flux turbulents de masse sur les profils de la vitesse axiale et de la variable d'avancement.

1.2 Equations de conservation pour les écoulements réactifs

1.2.1 Variables de la thermochimie

La combustion fait intervenir plusieurs espèces chimiques qui réagissent à travers plusieurs réactions élémentaires. On caractérisera ces espèces par leurs fractions massiques définies par :

$$Y_i = \frac{m_i}{m} \quad (1.5)$$

où M_i est la masse de l'espèce i présente dans un volume donné et m désigne la masse totale du gaz dans ce volume.

Les gaz que nous étudions seront considérés comme des mélanges de gaz parfaits régis par la loi :

$$p = \rho \frac{R}{M_m} T \quad (1.6)$$

où :

p est la pression totale qui est la somme des pressions partielles p_i des espèces :

$$p = \sum_{i=1}^N p_i \text{ et } p_i = \rho_i \frac{R}{M_i} T \quad (1.7)$$

$\rho_i = \rho Y_i$ et M_i sont respectivement la masse volumique et la masse molaire de l'espèce i .

$$\rho = \sum_{i=1}^N \rho_i \quad (1.8)$$

R est la constante universelle des gaz parfaits, T est la température et M_m est la masse molaire du mélange donnée par :

$$\frac{1}{M_m} = \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i} \quad (1.9)$$

L'enthalpie massique du mélange s'écrit :

$$h = \sum_{i=1}^N h_i(T) Y_i \quad \text{avec} \quad h_i = \int_{T_0}^T C_{p,i} dT + \Delta h_{f,i}^0 \quad (1.10)$$

$C_{p,i}$ et $\Delta h_{f,i}^0$ sont respectivement : la capacité calorifique massique à pression constante et l'enthalpie de formation de l'espèce i .

Finalement, l'enthalpie massique du mélange s'écrit :

$$h = \int_{T_0}^T C_{p,m} dT + \sum_{i=1}^N Y_i \Delta h_{f,i}^0 \quad (1.11)$$

Où $C_{p,m}$ est la capacité calorifique massique du mélange.

$$C_{p,m} = \sum_{i=1}^N C_{p,i} Y_i \quad (1.12)$$

R est la constante universelle des gaz parfaits.

$R = 8.3143 \text{ j/mole K}$

La masse moléculaire du mélange est M_m et le nombre total des espèces est désigné par N .

r la constante du gaz est :

$$r = \frac{R}{M_m} = R \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i} \quad (1.13)$$

Les gaz que nous étudions sont considérés comme des mélanges parfaits de gaz parfaits et obéissent à la loi :

$$p = \rho \frac{R}{M_m} T \quad (1.14)$$

1.2.2 Equations de conservation de masse et d'espèces

Du moment que la combustion ne génère pas de masse, l'équation de conservation de la masse totale pour un écoulement réactif est issue de la mécanique des fluides (équations de Navier Stokes) et elle s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.15)$$

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

Le bilan de conservation de masse pour une espèce i intervenant dans la réaction chimique s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k Y_i) = - \frac{\partial}{\partial x_k} (F_i^k) + \omega_i \quad (1.16)$$

où $\omega_i = \rho \Omega_i$ est le taux de réaction chimique et F_i^k est le flux de diffusion de l'espèce i dans l'espèce majoritaire. En négligeant la diffusion de masse due aux gradients de température, les flux de diffusion seront modélisés par la loi de Fick :

$$F_i^k = -\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \quad (1.17)$$

où D_i est le coefficient de diffusion binaire de l'espèce i .

Le bilan des espèces décrit par l'équation (1.11) s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k Y_i) = \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_k}) + \omega_i \quad (1.18)$$

1.2.3 Equations de la quantité de mouvement

L'équation exprimant la conservation de la quantité de mouvement reste inchangée pour un écoulement réactif et elle s'écrit de la façon suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k u_i) = \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k} - \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (1.19)$$

où τ_{ik} est le tenseur de contraintes visqueuses donné par :

$$\tau_{ik} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ik} \quad (1.20)$$

où μ est la viscosité dynamique et δ_{ik} est le symbole de Kronecker.

1.2.4 Equation de la conservation d'énergie

C'est l'équation la plus affectée par la réaction de combustion. Elle peut être écrite sous plusieurs formes. Nous retenons celle du transport de l'enthalpie sensible et qui est généralement la plus utilisée :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k h) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\sum_{i=1}^N \rho D_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \right) + \frac{\partial p}{\partial t} + u_k \frac{\partial p}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \quad (1.21)$$

où λ est la conductivité thermique du gaz et h_i est l'enthalpie massique de l'espèce i .

1.2.5 Facteurs stœchiométriques

La façon la plus simple permettant de décrire un mécanisme réactionnel de combustion faisant intervenir des milliers de réactions élémentaires n'agissant pas toutes à la même vitesse est d'exprimer cette réaction par le passage d'un état initial à un état final sous la forme d'une réaction globale.

Considérons la combustion d'un hydrocarbure $C_n H_m$ dans l'air où tout le combustible et l'oxygène sont consommés et les produits sont stables et qui ne sont que le dioxyde de Carbone et l'eau.



Pour un combustible de formule globale C_nH_m , les coefficients stœchiométriques sont définis par :

$$v'_f = 1 \quad v'_{O_2} = n + \frac{m}{4} \quad v''_{CO_2} = n \quad v''_{H_2O} = \frac{m}{2} \quad \text{et} \quad v''_{N_2} = 3.76 \left(n + \frac{m}{4} \right)$$

On définit le facteur stœchiométrique s comme :

$$s = \left(\frac{A}{F} \right)_{stoc} = \left(\frac{m_{air}}{m_{fuel}} \right)_{stoc}$$

Où m_{air} est la masse d'air et m_{fuel} est la masse du combustible.

Pour un rapport $\left(\frac{A}{F} \right)$ donné d'un mélange réactif, on définit la richesse Φ par :

$$\Phi = \frac{\left(\frac{A}{F} \right)_{stoc}}{\left(\frac{A}{F} \right)} \quad (1.23)$$

La richesse va permettre de classer les mélanges réactifs en 3 catégories :

Mélange pauvre : $\Phi < 1$

Mélange stœchiométrique : $\Phi = 1$

Mélange riche : $\Phi > 1$

1.2.6 Cinétique chimique

Le mécanisme cinétique du processus réactionnel est constitué d'un ensemble de réactions élémentaires. La composition du mélange à l'état final de ce processus correspondant à l'état d'équilibre chimique est alors définie par les lois de la thermodynamique. Les espèces chimiques apparaissent ou disparaissent selon les conditions de température et de pression. Les étapes élémentaires sont alors caractérisées par leurs taux de réaction Ω_i qui permet de calculer l'effet de la réaction sur chaque espèce et traduire la variation de l'espèce i au cours du temps. Le taux de réaction élémentaire est égal au produit des

concentrations des espèces réactives par une constante de vitesse élevée chacune à une puissance qui correspond à leur coefficient stœchiométrique.

Cette constante de vitesse r dépend de la température et est exprimée dans la loi d'Arrhenius par :

$$r = BT^\alpha \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) = BT^\alpha \exp\left(\frac{-T_a}{T}\right) \quad (1.24)$$

où B est le coefficient pré exponentiel, E_a est l'énergie d'activation représentant la quantité d'énergie à apporter au système pour que les espèces puissent réagir et T_a est la température d'activation.

Le processus d'une réaction de combustion fait intervenir des centaines d'espèces et des milliers de réactions élémentaires pour lesquelles il faut connaître les valeurs des constantes qui apparaissent dans les lois cinétiques. Il est à noter que ces valeurs sont déterminées expérimentalement et le logiciel le plus connu Chemkin utilise des tabulations détaillées de ces constantes.

Nous allons décrire d'une façon simple la réaction de combustion par le passage d'un état initial à un état final sous la forme d'une réaction globale où le taux de disparition du carburant est exprimé en utilisant la loi d'Arrhenius :

$$\Omega_Y = Y_{C_nH_m}^a Y_{O_2}^b BT^c \exp\left(\frac{-T_a}{T}\right) \quad (1.25)$$

où Ω_Y est le taux de disparition exprimé en kilogramme d'hydrocarbure par kilogramme de mélange et par seconde, $Y_{C_nH_m}$ et Y_{O_2} sont respectivement la fraction massique de l'hydrocarbure et la fraction massique de l'oxygène.

1.2.7 Différents types de flammes

La réaction globale décrite par l'équation (1.18) montre que pour qu'une réaction de combustion se produise, il faut d'abord que les réactifs soient en contact et que l'énergie d'activation de la réaction chimique est apportée. La zone de réaction va engendrer une flamme qui est le résultat d'une réaction chimique, d'un transport d'espèces réactives et d'un transfert thermique. Selon le

mécanisme permettant d'avoir un écoulement réactif, on distingue deux types différents de flammes :

- Les flammes de diffusion où le combustible et le comburant sont introduits séparément avant l'inflammation.
- Les flammes de prémélange où le combustible et l'oxydant sont mélangés avant l'inflammation.

1.2.7.1 Flammes de diffusion

Dans ce type de flammes, la combustion est contrôlée par la diffusion des espèces chimiques et de la chaleur. Par conséquent, la flamme est considérée comme une fine interface dans l'écoulement séparant le combustible et l'oxydant qui ne peuvent pas coexister. La structure de la flamme de diffusion est schématisée sur la figure 1.3.

L'état thermo-chimique est ainsi défini par une seule variable qui est la fraction de mélange ξ . Cette variable est un scalaire passif qui a une valeur nulle dans le comburant et une valeur égale à l'unité dans le combustible.

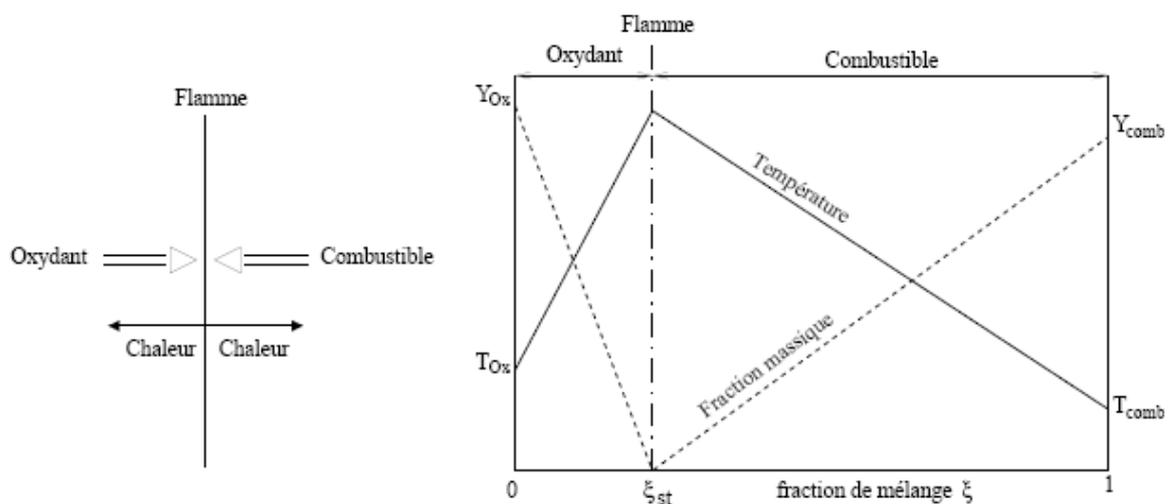


Figure 1.3 Structure d'une flamme de diffusion laminaire

La flamme se positionne, dans ce cas, sur l'iso-surface $\xi = \xi_{st}$ où ξ_{st} est la fraction de mélange correspondant à la stœchiométrie.

1.2.7.2 Flammes de prémélange

Dans ce type de flammes, le combustible et le comburant sont initialement mélangés et forment un seul mélange réactif. Lorsqu'on allume ce mélange, le front de flamme qui sépare les gaz frais des gaz brûlés se propage dans tout l'espace à une certaine vitesse.

La structure d'une flamme laminaire de prémélange monodimensionnelle est schématisée sur la figure 1.4.

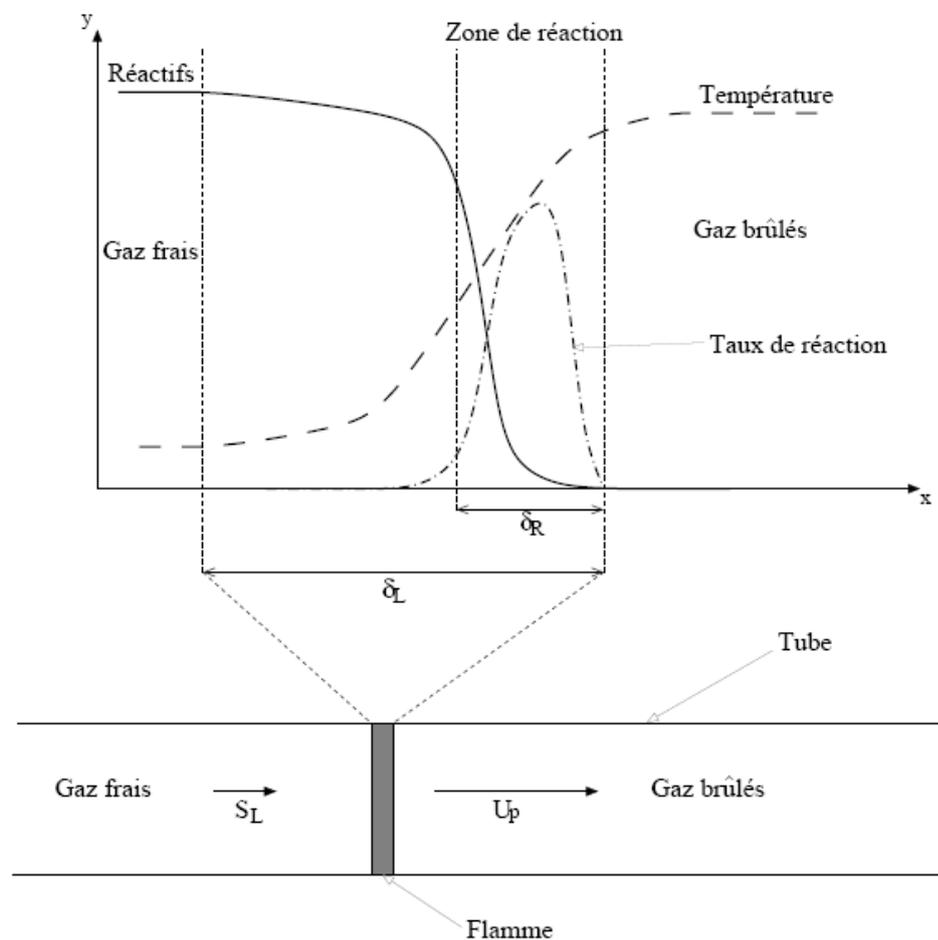


Figure 1.4 : Structure du front de flamme de prémélange laminaire [109]

Cette flamme a une épaisseur finie δ_L et une vitesse S_L . Sa vitesse est une caractéristique intrinsèque du mélange et des conditions de température et de pression.

La propagation de la flamme est décrite comme suit : tout d'abord les gaz frais sont chauffés par les gaz brûlés par conduction thermique et lorsqu'ils atteignent une température élevée, ils réagissent en dégageant de la chaleur. Une partie de cette chaleur va servir à chauffer les gaz frais plus en aval et ainsi de suite. Dans l'épaisseur de la flamme notée δ_L , la température des gaz frais augmente sous l'effet de la conduction de la chaleur par contre la concentration des gaz réactifs diminue par diffusion moléculaire des gaz brûlés ce qui fait que les réactions chimiques se produisent uniquement dans une zone d'épaisseur δ_R plus fine que la première. Dans ce cas, le taux de consommation du combustible est important dans la zone d'épaisseur δ_R où se concentrent les réactions chimiques et il est négligeable partout en dehors de cette zone.

Dans le cas où l'on considère que la température et les espèces chimiques diffusent de la même manière et que les processus de combustion sont adiabatiques, on peut représenter la flamme de prémélange par l'évolution d'une seule variable appelée variable d'avancement notée c . Cette variable d'avancement est nulle dans les gaz frais et égale à l'unité dans les gaz brûlés.

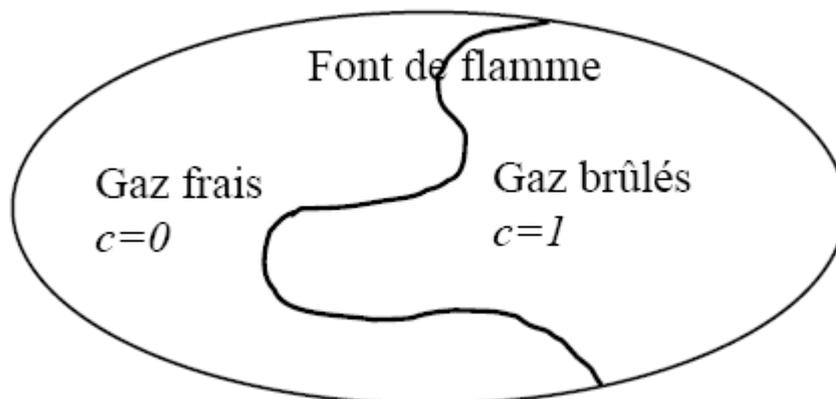


Figure 1.5 : Définition de la variable d'avancement

On définit la variable d'avancement comme une fonction de la température réduite :

$$c = \frac{T - T_f}{T_b - T_f} \quad (1.26)$$

où T représente la température locale effective, T_f la température des gaz frais et T_b la température des gaz brûlés.

On peut aussi exprimer cette variable en fonction de la fraction massique du combustible :

$$c = 1 - \frac{Y_F}{Y_{F,f}} \quad (1.27)$$

où Y_F est la fraction massique locale du combustible et $Y_{F,f}$ est fraction massique du combustible dans les gaz frais.

Dans le cas d'une seule réaction globale, la composition du mélange peut être caractérisée uniquement par la fraction massique du combustible.

Le dégagement de chaleur engendré par les réactions chimiques a un effet sur la variation de la masse volumique des gaz lors de la propagation de la flamme. Sous l'hypothèse d'un écoulement à faible nombre de Mach dans lequel on peut considérer la pression comme constante, l'augmentation de la température s'accompagne d'une diminution de la masse volumique des gaz suivant la loi : $\rho T \approx Cte$

La conservation de la masse à la traversée de la flamme conduit à une accélération des gaz brûlés par rapport aux gaz frais. Ceci s'exprime par :

$$\rho_r S_L = \rho_p U_p \quad (1.28)$$

où :

ρ_r et ρ_p sont respectivement la masse volumique dans les gaz frais et dans les gaz brûlés.

S_L et U_p sont respectivement la vitesse des gaz frais et la vitesse des gaz brûlés par rapport à la flamme.

1.2.8 Approximation de Schvab-Zeldovitch

Dans le cas des flammes laminaires de prémélange, le nombre de Mach caractéristique de l'écoulement réactif est faible ce qui fait que la pression serait considérée thermodynamiquement comme constante et si le mélange est aussi considéré comme un gaz parfait, la loi d'état du mélange réactif peut s'écrire de la façon suivante :

$$\rho T^* = Cte \quad \text{avec} \quad T^* = \frac{T}{M_m} \quad (1.29)$$

Dans ce qui suit, nous considérons le cas d'une combustion complète dans l'air représentée par une seule réaction globale où les espèces chimiques sont alors : C_nH_m , O_2 , N_2 , CO_2 et H_2O . De plus, la température et les espèces chimiques diffusent de la même manière ce qui se traduit par un nombre de Lewis égal à l'unité pour toutes les espèces chimiques :

$$L_{e_i} = \frac{\lambda}{\rho C_{p,i} D_i} = 1 \quad (1.30)$$

A la base de toutes ces hypothèses et en négligeant le terme $\frac{\partial p}{\partial t}$, nous pouvons écrire une équation simplifiée pour l'enthalpie comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k h) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x_k} \right) \quad (1.31)$$

L'équation (1.31) est identique à l'équation de transport d'une espèce chimique i non réactive ($\omega_i = 0$). L'espèce non réactive dans notre cas est l'azote.

En considérant que les parois du système sont adiabatiques et imperméables aux espèces, on peut définir une fraction de mélange notée ξ , dont l'équation de transport décrit à la fois l'évolution de l'enthalpie h et de la fraction massique de l'azote Y_{N_2} .

$$\xi = \frac{Y_{N_2} - Y_{N_2}(1)}{Y_{N_2}(2) - Y_{N_2}(1)} = \frac{h - h(1)}{h(2) - h(1)} \quad (1.32)$$

Dans le cas où les indices (1) et (2) désignent respectivement l'oxydant et le combustible, cette fraction de mélange serait nulle dans l'oxydant pur et elle est égale à l'unité dans le combustible pur.

En tenant compte de cette définition, la fraction de mélange ξ serait égale à la fraction massique du combustible C_nH_m dans les gaz frais lorsque le mélange n'a pas encore réagi.

Dans ce qui suit, on notera la fraction massique du combustible par Y (et similairement ω_Y par ω). Par conséquent, la quantité du combustible qui a réagi serait : $\xi - Y$ et la réaction globale va nous permettre de déterminer les fractions massiques de toutes les espèces chimiques.

La composition, la température et la masse volumique du mélange gazeux seront entièrement déterminées à partir de la fraction massique du combustible Y et de la fraction de mélange ξ .

Les évolutions de ces deux variables seront décrites par les équations suivantes :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k Y) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_k} \right) + \omega \quad (1.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \xi) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k \xi) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \right) \quad (1.34)$$

Ces deux variables vont nous permettre de décrire aussi bien les flammes de prémélange et aussi les flammes partiellement prémélangées.

L'état thermo-chimique local du mélange est caractérisé par le couple (ξ, Y) défini dans le domaine limité par les trois droites comme dans la figure 1.6.

La droite de mélange représente les états des gaz frais où le combustible et l'oxydant se mélangent sans brûler. La droite de combustion complète représente les états des gaz complètement brûlés.

Les couples situés à l'intérieur du domaine représentent les gaz qui sont en train de brûler.

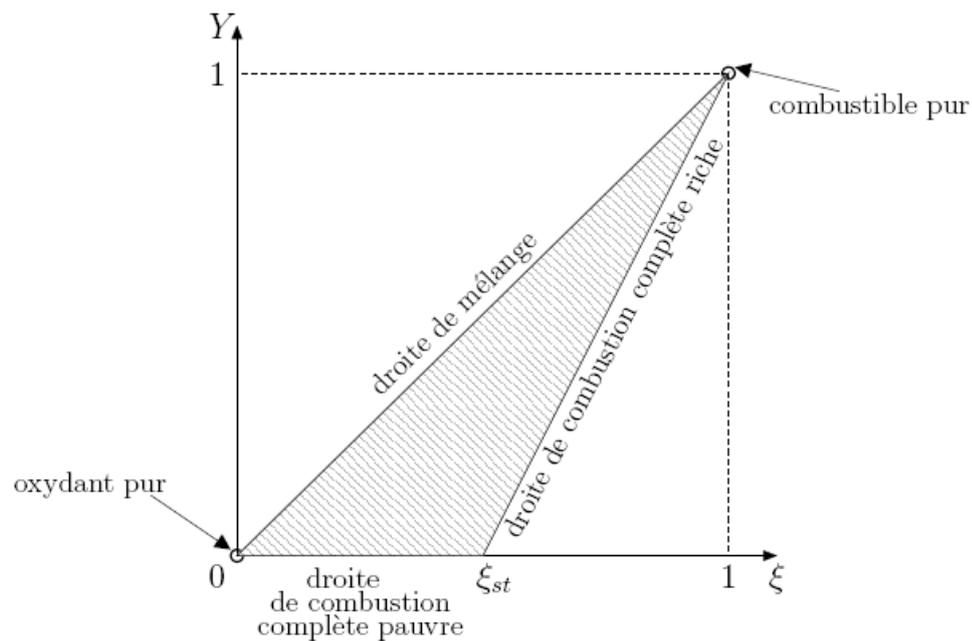


Figure 1.6 : Domaine d'existence des couples (ξ, Y) [109]

1.3 Conclusion

Après avoir rappelé les études expérimentales, théoriques et numériques des flammes turbulentes de prémélange stabilisées dans un écoulement à point d'arrêt, nous avons examiné le comportement des flammes laminaires dans un écoulement turbulent. Nous avons aussi simplifié les équations qui décrivent le phénomène de combustion en présentant certaines hypothèses concernant les propriétés de l'écoulement et des mécanismes chimiques :

- La cinétique chimique est représentée par une seule réaction globale ce qui va nous permettre de prendre un nombre limité d'espèces chimiques d'un côté et que le taux de réaction d'une seule espèce va nous permettre de caractériser la réaction globale. Il est à souligner que cette hypothèse reste trop loin de la réalité.

- Le nombre de Mach est faible et il est inférieur à 0.3
- La diffusion de la chaleur et des espèces se fait de la même manière au niveau moléculaire c'est-à-dire que le nombre de Lewis est égal à l'unité.
- Les parois du système sont adiabatiques et imperméables aux espèces.

L'ensemble de ces hypothèses va nous conduire à utiliser deux variables pour connaître la température et la concentration des espèces de toutes les espèces du mélange selon l'approximation de Schvab-Zeldovitch.

Le phénomène turbulent nous conduit à utiliser une approche statistique pour la prédiction de l'évolution des grandeurs moyennes de l'écoulement réactif. Le développement des méthodes de fermetures des équations moyennées de l'évolution des grandeurs physiques mises en jeu est l'objectif principal de notre travail ; il sera détaillé dans les prochains chapitres.

CHAPITRE 2

INTERACTION ENTRE LA COMBUSTION ET LA TURBULENCE

2.0 Introduction

Avant d'aborder la modélisation de la combustion turbulente, il est nécessaire de décrire le phénomène de turbulence avec ses échelles caractéristiques et celles de la combustion. Nous présenterons à la fin de ce chapitre deux modèles RANS de turbulence.

2.1 Caractéristiques de la turbulence

La turbulence est un phénomène présent dans la majorité des applications industrielles et en particulier dans les chambres de combustion. Ce phénomène apparaît lorsque le gradient de la vitesse augmente de telle façon que la viscosité du fluide ne peut plus maintenir le caractère laminaire du fluide. Le régime de l'écoulement est caractérisé par le nombre de Reynolds qui est fonction de la vitesse caractéristique, de la longueur caractéristique et de la viscosité cinématique du fluide. Les plus importantes caractéristiques du régime turbulent peuvent se résumer comme suit :

- La trajectoire des particules fluides présente des changements aléatoires brusques dans l'espace et dans le temps.
- Un effet de diffusion important est produit par le mouvement de ces particules fluides.
- L'écoulement turbulent est instationnaire
- Les propriétés de l'écoulement en un point et à un instant donnés ne peuvent pas être reproductibles expérimentalement.

Bien que les caractéristiques locales de l'écoulement ne soient pas reproductibles, certaines quantités moyennes comme les valeurs moyennes de la vitesse, de l'énergie et des concentrations peuvent être reproduites. De ce fait, les variables caractéristiques de l'écoulement sont décrites par une fluctuation

fluctuant autour d'une valeur moyenne reproductible. Ces fluctuations sont définies comme étant l'écart de la quantité instantanée par rapport à la moyenne :

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (2.1)$$

où : $\bar{\Phi}$ est la quantité moyenne, Φ' est la quantité fluctuante et $\bar{\Phi}' = 0$

Si on applique la relation (2.1) pour la vitesse de l'écoulement $U(x,t)$ présentant des fluctuations aléatoires $u'(x,t)$ autour de la valeur moyenne $\bar{U}(x,t)$ alors on a :

$$U(x,t) = \bar{U}(x,t) + u'(x,t) \quad (2.2)$$

A partir des fluctuations de vitesses, on exprime l'énergie cinétique de turbulence k dans l'espace 3D par :

$$k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 u_i'^2 \quad (2.3)$$

La quantité moyenne décrite dans l'équation (2.1) est celle du formalisme de Reynolds et ne peut être appliquée que dans le cas des écoulements incompressibles. Afin de retrouver les mêmes formes d'équations pour les écoulements turbulents réactifs où la masse volumique est variable, on introduit une nouvelle moyenne pondérée par la masse volumique dite moyenne de Favre :

$$\overline{\rho\Phi} = \bar{\rho}\tilde{\Phi} \quad (2.4)$$

et
$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \quad (2.5)$$

où $\tilde{\Phi}$ est la quantité moyenne au sens de Favre et Φ'' est la fluctuation autour de cette moyenne. Par conséquent, $\overline{\Phi''} \neq 0$ et $\tilde{\Phi}'' = 0$

2.2 Echelles de la turbulence

Les écoulements turbulents sont caractérisés par l'existence d'une multitude de tourbillons de tailles différentes. Plus le nombre de Reynolds est élevé, plus les grands tourbillons se divisent à leur tour en petits tourbillons. Ce mécanisme continue jusqu'à ce que les forces visqueuses dissipent facilement l'énergie cinétique des plus petits tourbillons en chaleur. Pour une turbulence

homogène et isotrope, la cascade de tourbillons a été introduite en 1941 par Kolmogorov [59]. Dans la figure 2.1, les grosses structures tourbillonnaires porteuses d'énergie vont produire d'autres structures de plus en plus petites à qui elles transmettent leurs énergies. Plus les tourbillons deviennent petits, plus les forces de viscosité dissipent facilement leur énergie cinétique en chaleur.

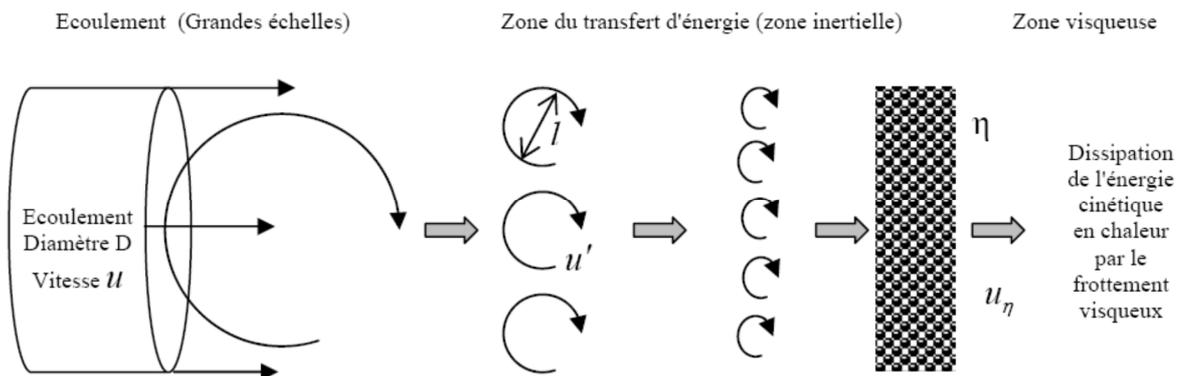


Figure 2.1 : Cascade d'énergie de Kolmogorov

La théorie de Kolmogorov va permettre de définir trois zones d'échelles différentes :

- La zone des grandes échelles qui est le siège de la production de la turbulence. Cette échelle intégrale est une caractéristique de la géométrie de l'écoulement.
- La zone inertielle qui est le siège du transfert d'énergie des grosses structures vers les petites. Cette zone correspond aux échelles intermédiaires et elle est indépendante de la géométrie de l'écoulement.
- La zone des petites échelles (échelle de Kolmogorov) où l'énergie cinétique des petites structures tourbillonnaires est dissipée en chaleur.

Cette théorie suppose que le transfert d'énergie est dans la zone inertielle et il est dans le sens où l'énergie d'un tourbillon est seulement transférée au tourbillon de plus petite taille. Cela signifie que le taux de transfert d'énergie (énergie cinétique divisée par le temps de retournement du tourbillon) est indépendant de

l'échelle de longueur des tourbillons. Cette hypothèse est intégrée dans tous les modèles de turbulence standards à grands nombres de Reynolds.

La figure 2.2 représente le spectre d'énergie $E(k)$ dans le cas d'une turbulence homogène et isotrope en fonction de la réciproque de la taille du tourbillon (le nombre d'onde k). Une étude expérimentale basée sur l'analyse dimensionnelle montre que le transfert d'énergie est constant dans la zone inertielle avec une pente de $-5/3$ [60].

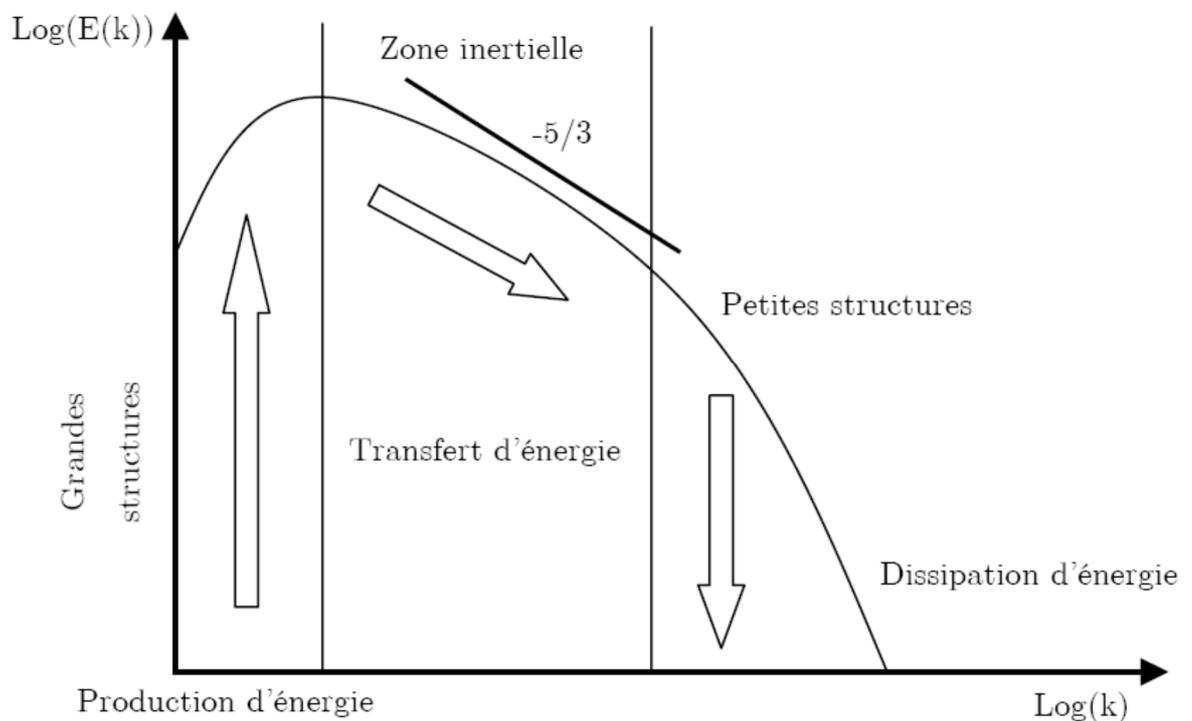


Figure 2.2 : Spectre d'énergie pour une turbulence homogène et isotrope

Deux échelles importantes limitent la zone inertielle : l'échelle de Kolmogorov η et l'échelle intégrale l_T .

L'échelle de Kolmogorov spécifie les plus petits tourbillons où les forces de viscosité sont dominantes et transforment leur énergie cinétique en énergie thermique. Cette échelle sera donc fonction de la viscosité cinématique ν et du

taux de dissipation de l'énergie cinétique ε . Son expression est déterminée par l'analyse dimensionnelle :

$$\eta = \left(\frac{v^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (2.6)$$

Par ailleurs, on détermine aussi, par analyse dimensionnelle, l'échelle de temps de Kolmogorov qui est proportionnelle au temps de retournement d'un tourbillon de Kolmogorov :

$$t_\eta = \left(\frac{v}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (2.7)$$

La vitesse de retournement d'un tourbillon de Kolmogorov serait :

$$u_\eta = \frac{\eta}{t_\eta} = (v\varepsilon)^{1/4} \quad (2.8)$$

L'échelle intégrale l est définie comme étant la taille caractéristique des tourbillons qui emmagasinent le plus d'énergie. Elle est définie à l'aide de la fonction de corrélation normalisée en deux points de la vitesse [61] :

$$R(x, r) = \frac{\overline{u'(x, t)u'(x+r, t)}}{\sqrt{u'^2(x, t)}\sqrt{u'^2(x+r, t)}} \quad (2.9)$$

La quantité $R(x, r)$ donne la corrélation des fluctuations de la vitesse mesurée dans deux points x et $x+r$ qui va indiquer le degré de corrélation des propriétés de la turbulence en deux points distants de r . L'échelle intégrale est alors définie par :

$$l = \int_0^\infty R(x, r) dr \quad (2.10)$$

L'échelle intégrale l est alors la distance à partir de laquelle les fluctuations de vitesse ne sont pas corrélées.

L'échelle intégrale du temps τ est proportionnelle au temps de retournement d'un tourbillon intégral l_T / u' et elle est définie par :

$$\tau = \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.11)$$

où k est l'énergie cinétique de turbulence donnée par :

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'u'} \quad (2.12)$$

Puisque le transfert d'énergie est constant dans la zone inertielle, le taux de dissipation de l'énergie cinétique ε est égal au taux de dissipation fourni dans la cascade d'énergie à l'échelle intégrale l . Si l'on fait une analyse dimensionnelle, la relation du taux de dissipation de l'énergie cinétique avec l'échelle intégrale l liée à la production d'énergie et donc aux grandes structures est donnée par :

$$\varepsilon = \frac{u'^3}{l_T} \quad (2.13)$$

2.3 Flammes turbulentes de prémélange

La turbulence joue un rôle très important sur la combustion. En effet, la surface de la flamme va croître lors de son plissement suivant l'écoulement d'un côté et les échanges seront augmentés par la diffusion turbulente d'un autre côté.

2.3.1 Vitesse de flamme turbulente

Dans les modèles de combustion où l'on considère le front de la flamme comme une interface très fine entre les gaz frais et les gaz brûlés, la vitesse fondamentale est une grandeur cinématique dénommée vitesse de déplacement normale au front de la flamme. Cette vitesse est définie plus précisément au niveau de la zone de préchauffage [62] et c'est par son intermédiaire que le couplage entre le taux de réaction local des flammes avec l'écoulement et la déformation de la flamme sont effectués. Elle présente l'avantage d'être déterminée localement de façon expérimentale [63] et numérique [64].

On note également la définition de la vitesse de propagation moyenne de la flamme turbulente $\langle S_T \rangle$ qui englobe le déplacement de la flamme dû à la diffusion des espèces d'un côté et à l'expansion de la flamme créée par le gradient de température d'un autre côté.

Cette vitesse dépend fortement des fluctuations de vitesses de l'écoulement et de la vitesse de la flamme laminaire [65, 66]. Son expression est donnée par :

$$\frac{\langle S_T \rangle}{S_L} = 1 + \alpha \left(\frac{u'}{S_L} \right)^n \quad (2.14)$$

où :

α est une constante qui dépend de la nature du combustible, de l'échelle intégrale de la turbulence et du nombre de Reynolds.

n est un facteur d'expansion.

α et n sont des constantes de l'ordre de l'unité.

La détermination de la vitesse de propagation moyenne de la flamme turbulente par la relation (2.14) reste approximative car la vitesse de flamme est une grandeur assez mal définie et reste dépendante de la configuration expérimentale étudiée [67].

2.3.2 Echelles caractéristiques d'une flamme

Les écoulements réactifs de prémélange sont caractérisés par le fait que le combustible et le comburant sont mélangés à une échelle moléculaire afin de former les gaz frais. Dans le cas où l'écoulement est dans les limites d'inflammabilité [68], une augmentation de la température locale peut démarrer le processus de combustion qui se manifeste sous la forme d'un front de flamme se propageant dans l'écoulement.

La structure interne de la flamme turbulente à été considérée en 1940 par Damköhler [69] comme étant une fine flamme laminaire plissée et rapidement convectée par la turbulence. Cette façon de décrire la structure interne des flammes turbulentes de prémélange n'est valable que si la taille des plus petits tourbillons créés par la turbulence de l'écoulement est plus grande que l'épaisseur de la flamme laminaire, empêchant ainsi aux tourbillons de pénétrer dans la flamme laminaire. En effet, la classification des structures des flammes turbulentes prémélangées est obtenue en comparant les longueurs et les temps

caractéristiques de la turbulence à la longueur et au temps caractéristiques de la flamme laminaire. Trois nombres adimensionnels vont permettre d'établir la classification des régimes de combustion :

- Le nombre de Reynolds turbulent qui compare l'intensité de l'agitation turbulente à celle des forces visqueuses :

$$\text{Re}_T = \frac{u' L_T}{\nu} \quad (2.15)$$

- Le nombre de Damköhler qui compare le temps caractéristique de la turbulence avec celui de la chimie :

$$D_a = \frac{\tau_T}{\tau_c} = \frac{l_T S_L}{u' \delta_L} \quad (2.16)$$

- Le nombre de Karlovitz qui compare le temps caractéristique des structures turbulentes les plus rapides avec celui de la chimie :

$$K_a = \frac{\tau_c}{\tau_k} = \frac{\delta_L u_k}{l_k S_L} = \left(\frac{u'}{S_L} \right)^{3/2} \left(\frac{\delta_L}{l_T} \right)^{1/2} \quad (2.17)$$

τ_T , l_T et u' sont respectivement le temps, l'échelle intégrale et la vitesse caractéristiques de la turbulence.

τ_k , l_k et u_k sont respectivement le temps, la longueur et la vitesse caractéristiques de la dissipation. (Echelle de Kolmogorov)

Les longueurs, les temps et les vitesses caractéristiques peuvent être exprimés en fonction de l'énergie cinétique turbulente k , de la dissipation ε et de la viscosité cinématique du fluide ν :

$$u' = k^{1/2} l_T = \frac{u'^3}{\varepsilon} u_k = (\nu \varepsilon)^{1/4} l_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (2.18)$$

Les relations (2.18) permettent de relier le nombre de Damköhler D_a et le nombre de Karlovitz K_a au nombre de Reynolds turbulent Re_T par la relation :

$$\text{Re}_T = \frac{u' L_T}{\nu} = D_a^2 K_a^2 \quad (2.19)$$

2.3.3 Régimes de la combustion turbulente prémélangée

La combustion turbulente a pu être classifiée depuis les années 1980 sous formes de diagrammes. Ces diagrammes définissent les régimes de la combustion turbulente prémélangée en fonction des rapports de vitesses u'/S_L en ordonnées et des échelles de longueurs l_T/δ_L en abscisses.

Afin de représenter les limites des différents régimes de combustion, plusieurs diagrammes ont été proposés par plusieurs auteurs [70, 71, 72, 66, 64, 8, 73, 74, 75, 76]. Il est à noter que ces diagrammes offrent un moyen qualitatif pour le classement des écoulements turbulents réactifs suivant différents régimes de combustion.

Le diagramme le plus souvent rencontré est celui de Borghi [70] en 1984. Voir figure 2.3

Ce diagramme a permis de mettre en évidence trois grands types de flammes : les flammes plissées, les flammes plissées-épaissies et les flammes épaissies.

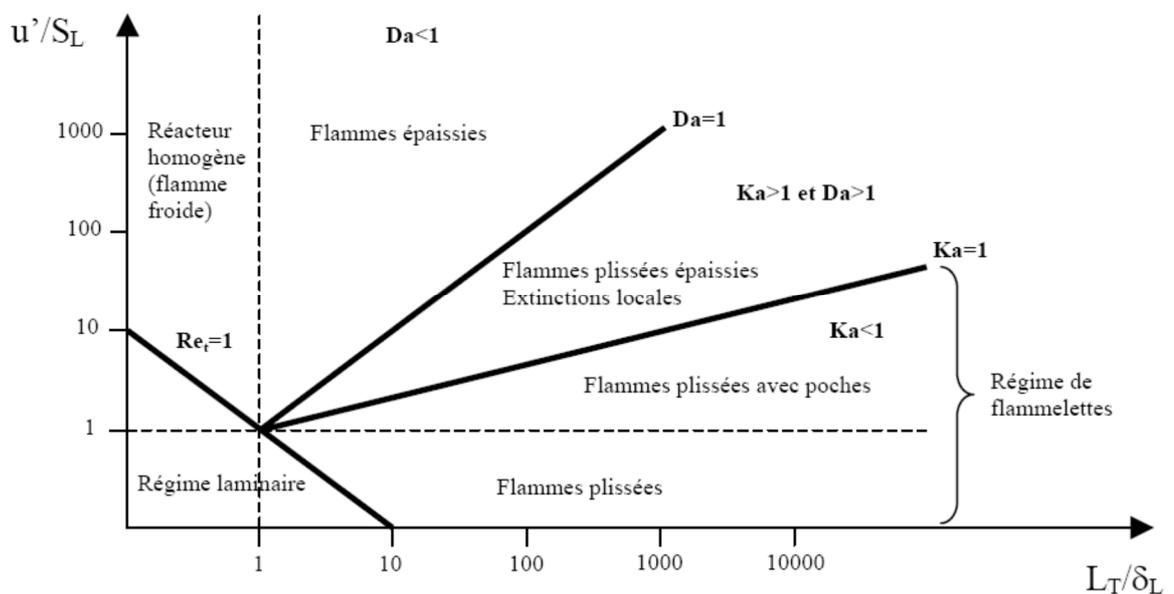


Figure 2.3 : Diagramme de régimes pour la combustion prémélangée (Borghi 1994)

La ligne $Re_T = 1$ sépare le régime des flammes laminaires $Re_T < 1$ de celui des flammes turbulentes $Re_T > 1$.

2.3.3.1 Régime de flammelettes : ($D_a > 1$ et $K_a < 1$)

Dans ce régime, l'épaisseur de la flamme est plus petite que l'échelle de Kolmogorov et par conséquent les interfaces entre les gaz frais et les gaz brûlés gardent leur aspect laminaire. Le front de la flamme est alors convecté par les structures de l'écoulement. Sur la figure 2.3, le régime de flammelettes se compose de deux régimes :

- Régime de flammelettes plissées : limité par la condition $u' / S_L < 1$. La vitesse de la flamme laminaire domine toujours la vitesse des fluctuations et par conséquent les déformations du front de flamme dues aux tourbillons sont immédiatement anéanties par la propagation du front de flamme. On n'observe alors que des petits plissements de la flamme.
- Régime de flammes plissées avec poches : limité par la condition $u' / S_L \geq 1$ et $K_a < 1$. La vitesse de rotation des tourbillons de grandes échelles est supérieure à la vitesse de la flamme laminaire ce qui va onduler le front de la flamme. Plus l'intensité de la turbulence augmente (le rapport u' / S_L devient plus grand que 1), plus la déformation de la flammelette s'accroît ce qui provoque des interactions entre deux parties adjacentes de celle-ci. Voir figure 2.4

Dans le cas de la combustion prémélangée, la structure de la flammelette est décrite par la variable d'avancement c qui est nulle dans les gaz frais et égale à l'unité dans les gaz brûlés.

Les interactions entre les parties adjacentes des flammelettes conduisent à la formation de poches de gaz entourées d'une flammelette.

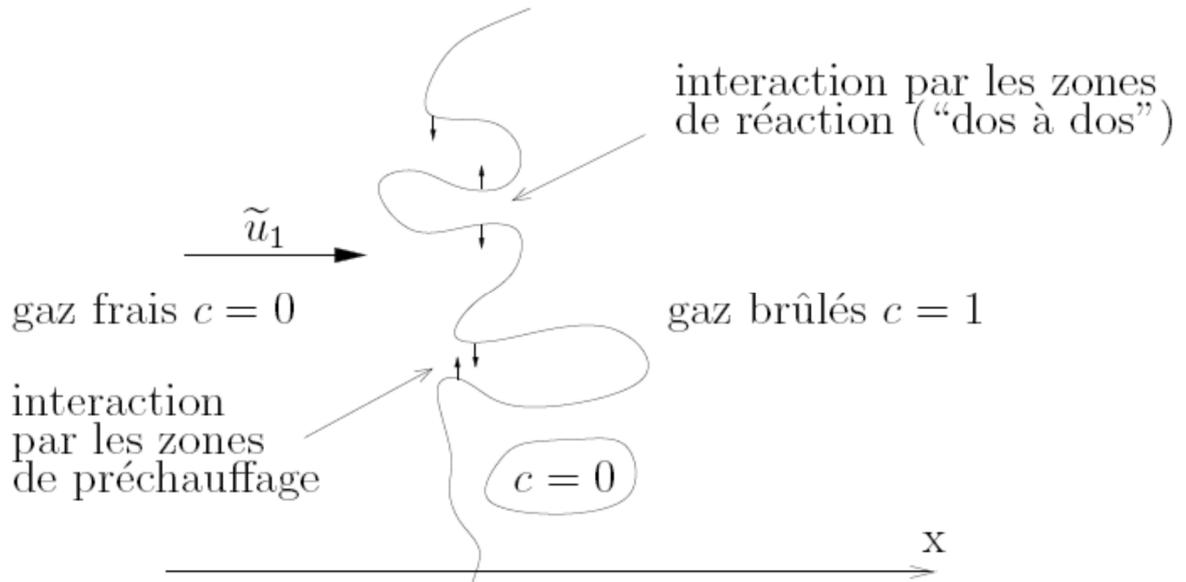


Figure 2.4 : Flamme plissée avec poches [109]

Dans le cas où l'interaction se fait au niveau des zones de préchauffage, ces poches seront constituées de gaz frais et dans le cas inverse, elles seront constituées de gaz brûlés. Du moment que ce phénomène est favorisé par la propagation de la flamme locale, l'apparition de poches de gaz frais dans les gaz brûlés est beaucoup plus fréquente que l'inverse.

2.3.3.2 Régime de flammes plissées épaissies : ($D_a > 1$ et $K_a > 1$)

Dans ce régime, l'énergie cinétique turbulente a augmenté par rapport au régime des flammelettes ce qui va diminuer l'échelle de Kolmogorov qui devient plus petite que l'épaisseur de la flammelette et va affecter la structure interne du front de flamme. Les structures turbulentes vont alors pénétrer dans la zone de préchauffage et provoquent son épaississement mais elles ne peuvent pas affecter la zone de réaction qui reste mince et proche de l'épaisseur de la zone de réaction de la flamme laminaire. Alors, il peut se produire des extinctions locales et seules les grandes échelles de turbulence vont pouvoir plisser le front de flamme.

2.3.3.3 Régime de flammes épaissies : ($D_a < 1$)

Pour ce dernier régime, les zones de préchauffage et de réaction sont perturbées par la turbulence et ne permettent pas d'identifier des structures

laminaires. Le front de flamme devient plus épais et la flamme n'est plus courbée. Toutes les fluctuations ont des échelles caractéristiques inférieures à l'épaisseur de la flamme laminaire et on est en présence de nettes modifications de la zone de préchauffage et de la zone de réaction.

Il est à noter que les limites séparant les différents régimes de combustion cités au dessus restent floues et un peu arbitraires pour les raisons suivantes :

-Concernant le critère de délimitation : on suppose que la turbulence est homogène et isotrope ce qui n'est pas le cas dans les systèmes réels.

-Concernant les réactions chimiques : on assimile les réactions chimiques à une seule étape avec quelques espèces alors que des centaines de réactions et d'espèces interviennent réellement.

-Concernant les méthodes de mesure et de calcul : certaines grandeurs ne sont pas toujours exactement les mêmes pour tous les auteurs et elles n'ont pas aussi des valeurs similaires dans toute la flamme.

Pour toutes ces raisons, d'autres études ont été menées dans le but de modifier le diagramme de Borghi. Les travaux qui ont pu élargir la zone de validité du régime de flammelles sont ceux de Abdel-Gayed en 1989 [66], O'Young en 1997[75] et Poinso en 1990 et en 1991 [77, 78].

A partir de simulations numériques directes, ces auteurs ont calculé l'effet des tourbillons sur le front de flamme et ils se sont aperçus que dans le diagramme de Borghi, on a sous estimé la résistance du front de flamme aux tourbillons car on n'a pas tenu compte des effets de la viscosité et de la courbure de la flamme. Ceci nous permet alors de dire que le critère $K_a < 1$ est trop restrictif.

De la même manière, Buschmann en 1996 [74] a comparé la taille des tourbillons des petites échelles avec l'épaisseur de la flamme laminaire et il a observé que ces tourbillons ont beaucoup moins d'influence que ce que stipule le critère $K_a < 1$.

La figure 2.5 présente un diagramme modifié de combustion prémélangée où on a introduit un nouveau nombre adimensionnel qui est le nombre de Bray [76].

Le nombre de Bray sert à délimiter le type de diffusion et s'exprime par :

$$N_B = \frac{\rho_u S_L}{2\rho_b \alpha u'} \quad (2.20)$$

où ρ_u et ρ_b sont respectivement les masses volumiques dans les gaz frais et dans les gaz brûlés ; α est un coefficient d'efficacité.

Lorsque $N_B < 1$, on se trouve dans le cas d'une diffusion de type gradient où l'écoulement est dominé par les vitesses fluctuantes.

Quand $N_B > 1$, la diffusion est de type contre gradient ou bien non gradient où l'écoulement est dominé par l'expansion thermique due à la réaction chimique.

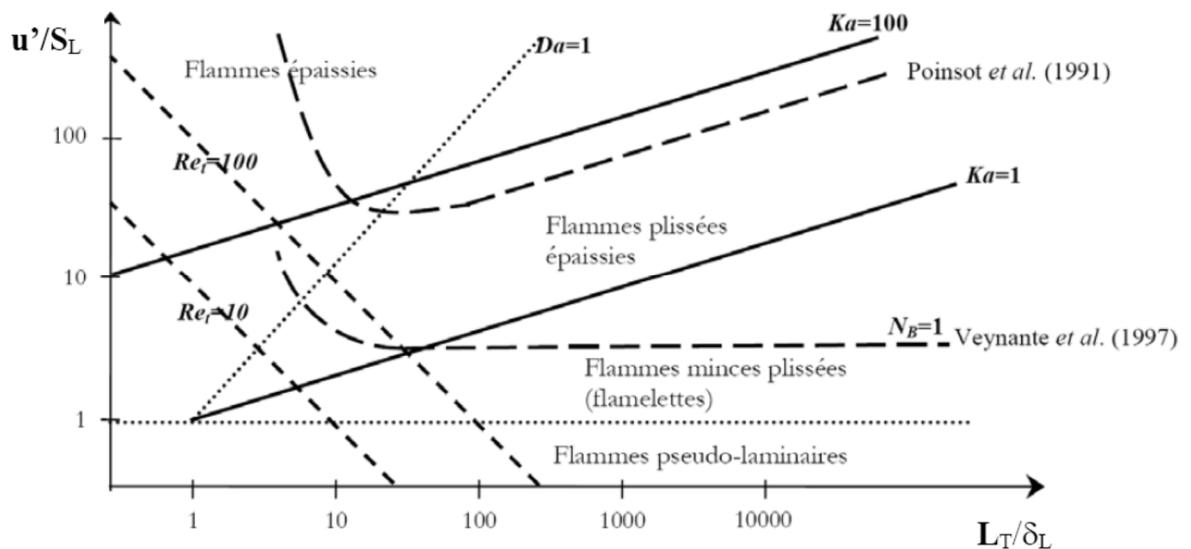


Figure 2.5 : Diagramme de combustion prémélangée modifié

Le régime des flammelettes est celui qui nous intéresse se situe maintenant au-dessous de la ligne en pointillés. Cet élargissement va nous conduire à dire que dans la majorité des cas en pratique, la combustion turbulente prémélangée se situe dans le régime des flammelettes.

2.4 Equations moyennes et problèmes de fermeture

La particularité des écoulements de gaz réactifs est la variation de la masse volumique engendré par le dégagement de chaleur du à la réaction de combustion. Afin de retrouver les mêmes formes que celles des équations (1.11), (1.15), (1.29) et (1.30), on applique l'opérateur de Favre déjà décrit au système des équations précédentes pour obtenir le système d'équations moyennées de bilan bien connu :

- L'équation de continuité :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k) = 0 \quad (2.21)$$

- L'équation de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\tau}_{ik} - \overline{\rho u_i'' u_k''}) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (2.22)$$

- L'équation d'évolution de la fraction de mélange moyenne :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\xi}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{\xi}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' \xi''} \right) \quad (2.23)$$

- L'équation d'évolution de la fraction massique moyenne du combustible :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{Y}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' Y''} \right) + \bar{\omega} \quad (2.24)$$

Les quantités transportées dans les équations (2.21), (2.22), (2.23) et (2.24) sont des quantités moyennes au sens de Favre. Dans le cas où la masse volumique est constante, les moyennes de Reynolds et de Favre sont équivalentes.

Mis à part l'équation de continuité, les autres équations moyennes (2.22), (2.23) et (2.24) sont semblables aux équations initiales sauf qu'un terme supplémentaire apparait dans chaque équation. Ces nouveaux termes

représentent le mécanisme bien connu sous le nom transport turbulent des variables :

$-\overline{\rho u_i'' u_k''}$ est le flux turbulent de la quantité de mouvement connu sous le nom Tenseur de Reynolds.

$-\overline{\rho u_k'' \xi''}$ est le flux turbulent de la fraction de mélange.

$-\overline{\rho u_k'' Y''}$ est le flux turbulent de la fraction massique du combustible.

Ces grandeurs sont apparues lors du passage à la moyenne des équations instantanées et sont liées à la nature non linéaire du terme convectif de ces mêmes équations. Une évaluation de ces termes devient nécessaire.

Concernant les tensions de Reynolds $-\overline{\rho u_i'' u_k''}$, nous avons retenu les deux approches classiques que nous allons développer dans la suite de ce chapitre : la première liée au concept de viscosité turbulente (modèle $k - \varepsilon$) et la seconde qui concerne la fermeture des équations de transport des tensions de Reynolds (modèle $R_{ij} - \varepsilon$).

Pour les flux turbulents de la fraction de mélange $-\overline{\rho u_k'' \xi''}$, on va utiliser une loi de type gradient et relier donc le flux au gradient du scalaire transporté.

Pour les flux turbulents d'espèces $-\overline{\rho u_k'' Y''}$, une attention particulière lui est réservée au chapitre IV dans le but de tenir en compte du phénomène connu sous le nom de transport contre gradient ou bien non gradient des flux turbulents.

2.5 Modélisation de la turbulence

La modélisation de la turbulence, que nous allons expliciter dans ce paragraphe, a été développé en premier lieu pour les écoulements incompressibles, puis étendue aux écoulements dilatables et enfin aux écoulements compressibles à faible nombre de Mach. Nous nous intéresserons dans ce travail qu'à son extension aux écoulements dilatables.

2.5.1 Viscosité turbulente et modèle $k-\varepsilon$

Ce modèle du premier ordre repose sur le concept de viscosité turbulente introduit en 1877 par Boussinesq [79], qui consiste à modéliser les tensions de Reynolds $\overline{\rho u_i'' u_k''}$ par analogie avec le tenseur des contraintes visqueuses $\overline{\tau_{ik}}$. Du fait que ces deux termes représentent des phénomènes de diffusion, le premier correspond à un processus de mélange par diffusion turbulente et le second correspond à la diffusion moléculaire. Puisque le transport moléculaire de la quantité de mouvement est caractérisé par la viscosité cinématique du fluide ν , le mélange turbulent va être caractérisé par la viscosité turbulente ν_T .

La viscosité cinématique est une propriété moléculaire du fluide tandis que la viscosité turbulente dépend de l'écoulement turbulent ce qui la rend variable dans le temps et dans l'espace.

Selon le concept de viscosité turbulente, les tensions de Reynolds sont alors reliées au tenseur des contraintes visqueuses en fonction des gradients moyens par :

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = -\overline{\rho} \nu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left(\overline{\rho} k + \overline{\rho} \nu_T \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} \right) \delta_{ij} \quad (2.25)$$

où $k = \frac{1}{2} \overline{u_i'' u_i''}$ est l'énergie cinétique de turbulence.

On définit le taux de dissipation moyen de l'énergie cinétique turbulente ε par :

$$\overline{\rho} \varepsilon = \overline{\tau_{ij} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}} \quad (2.26)$$

La viscosité turbulente qui ne dépend pas du fluide mais elle doit avoir la même dimension que la viscosité cinématique du fluide. Une analyse dimensionnelle menée par Launder et Spalding [80] a montré que :

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.27)$$

où C_μ est une constante déterminée expérimentalement.

La connaissance de l'énergie cinétique turbulente k et de son taux de dissipation moyen ε suffit pour le calcul de la viscosité turbulente ν_T .

Les équations de transport modélisées de l'énergie cinétique turbulente et de son taux de dissipation s'écrivent :

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P_k + G_k - \bar{\rho} \varepsilon \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \varepsilon + C_{\varepsilon 3} G_k) \quad (2.29)$$

avec :

$$P_k = \bar{\rho} \nu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \left(\bar{\rho} k + \bar{\rho} \nu_T \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} \quad (2.30)$$

$$G_k = -\overline{u_i''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (2.31)$$

Le dernier terme n'est pas fermé, nous le traitons en détail au chapitre IV.

Les constantes généralement utilisés sont répertoriées dans le tableau 2.1.

Tableau 2.1 Constantes du modèle $k - \varepsilon$

C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	σ_k	σ_ε
0.09	1.44	1.92	1.44	1	1.3

Cette première approche est de loin celle la plus utilisée pour le calcul des écoulements turbulents à cause de la simplicité du modèle. L'introduction de la viscosité turbulente en tant que quantité scalaire et non tensorielle montre que, même si l'écoulement considéré n'est pas isotrope, l'écart à l'isotropie est décrit linéairement en fonction du taux de déformation. Or cette propriété n'est pas forcément vérifiée pour certains écoulements turbulents et notamment lorsque l'échelle de temps de la turbulence n'est plus imposée par l'écoulement moyen qui correspond à une turbulence non isotrope évoluant en l'absence de gradient de

vitesse moyenne par exemple. Cette mise en défaut de la propriété de la viscosité turbulente pour certains types d'écoulements a amené les chercheurs à développer des modèles au second ordre. Cette démarche va être présentée dans la suite de ce chapitre mais auparavant, il faut souligner que les recherches entreprises sur les modèles au second ordre ont permis de proposer de nouveaux modèles au premier ordre de type $k - \varepsilon$.

2.5.1 Approche au second ordre : modèle $R_{ij} - \varepsilon$

Au lieu de relier les tensions de Reynolds $R_{ij} = \overline{u_i'' u_j''}$ au tenseur de déformation via la viscosité turbulente, on considère les équations de transport exactes des tensions de Reynolds :

$$\frac{\partial \overline{\rho u_i'' u_j''}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_k u_i'' u_j''}}{\partial x_k} = D_{ij} + P_{ij} + G_{ij} + \phi_{ij} - \varepsilon_{ij} \quad (2.32)$$

Les termes du second membre de l'équation (2.32) représentent les phénomènes physiques suivants :

- La diffusion par le champ turbulent, par les fluctuations de pression et la diffusion moléculaire :

$$D_{ij} = -\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho u_i'' u_j'' u_k''} + \overline{p' u_i''} \delta_{jk} + \overline{p' u_j''} \delta_{ik} - \overline{u_i'' \tau_{jk}} - \overline{u_j'' \tau_{ik}} \right) \quad (2.33)$$

- La production par les gradients de vitesse moyenne :

$$P_{ij} = -\overline{\rho u_i'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} - \overline{\rho u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \quad (2.34)$$

Ce terme est fermé et ne nécessite pas de modèle.

- La production liée aux variations de la masse volumique :

$$G_{ij} = -\overline{u_i''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} - \overline{u_j''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (2.35)$$

Ce terme est nul dans le cas d'un écoulement incompressible.

- La corrélation pression-déformation :

$$\phi_{ij} = \overline{p' \left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right)} \quad (2.36)$$

- La dissipation visqueuse :

$$\varepsilon_{ij} = 2\bar{\rho}\nu \frac{\partial \overline{u_i''} \partial \overline{u_j''}}{\partial x_k \partial x_k} \quad (2.37)$$

Le terme de production par les gradients de vitesse P_{ij} ne nécessite pas de relation de fermeture puisqu'il ne dépend que des variables du problème explicitement calculées. Par contre, les autres termes restent inconnus et ils doivent être modélisés.

2.5.1.1 La diffusion

La diffusion D_{ij} résulte du transport turbulent, moléculaire et de la diffusion par les fluctuations de pression. A grand nombre de Reynolds et dans les zones éloignées des parois, on peut considérer que la diffusion turbulente est prépondérante devant la diffusion.

La diffusion engendrée par les fluctuations de pression est difficile à évaluer. Parmi beaucoup d'auteurs, Strahle et Waldherr [81] ont étudié expérimentalement la corrélation pression vitesse qui intervient sous la forme d'un gradient dans le terme de diffusion D_{ij} . Les résultats obtenus sur des écoulements isothermes et pour les flammes de prémélange de type bec Bunsen montrent que ce terme est du même ordre de grandeur que le transport turbulent proprement dit. Les résultats exacts de la simulation numérique directe menée par Zhang et Rutland [82] sur une flamme plane turbulente de prémélange ont abouti à la même conclusion que précédemment.

Beaucoup d'auteurs supposent que les corrélations triples englobent le transport turbulent et le transport lié aux fluctuations de pression. A partir de l'équation de transport des corrélations triples simplifiée sous certaines hypothèses et en supposant en plus que la corrélation d'ordre 4 qui apparaît dans cette équation suit une loi de gaussianité :

$$\overline{u_i' u_i' u_i' u_i'} = \overline{u_i' u_j' u_k' u_l'} + \overline{u_i' u_k' u_j' u_l'} + \overline{u_i' u_l' u_j' u_k'} \quad (2.38)$$

Pour les écoulements à masse volumique variable, Hanjalic et Launder [83] proposent la fermeture suivante :

$$\overline{u_i'' u_j'' u_k''} = -C_s \frac{k}{\varepsilon} \left(\overline{u_k'' u_m''} \frac{\partial \overline{u_i'' u_j''}}{\partial x_m} + \overline{u_j'' u_m''} \frac{\partial \overline{u_i'' u_k''}}{\partial x_m} + \overline{u_i'' u_m''} \frac{\partial \overline{u_k'' u_j''}}{\partial x_m} \right) \quad (2.39)$$

Ce modèle semble compliqué et nous allons retenir la fermeture proposée avant par Daly et Harlow [84] :

$$D_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(C_s \bar{\rho} \frac{k}{\varepsilon} \overline{u_k'' u_m''} \frac{\partial \overline{u_i'' u_j''}}{\partial x_m} \right) \quad (2.40)$$

2.5.1.2 La production liée aux variations de masse volumique

Dans le cadre de la combustion turbulente de prémélange et en utilisant le formalisme du modèle de Bray – Moss – Libby, ce terme va se mettre sous une autre forme et ne nécessite pas alors de modélisation. Nous y reviendrons au chapitre IV.

2.5.1.3 La dissipation

La dissipation ε_{ij} est relative aux petites structures c'est-à-dire là où les gradients de fluctuations sont importants. Pour les écoulements à grands nombres de Reynolds, on peut assumer que ces petites structures sont quasiment isotrope et on aura donc :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \bar{\rho} \varepsilon \delta_{ij} \quad (2.41)$$

2.5.1.4 La corrélation pression-déformation

Le terme de corrélation pression – déformation, que l'on ne peut pas mesurer, est sans aucun doute le terme le plus délicat à évaluer. Ce terme assure la redistribution de la production d'énergie suivant les composantes du tenseur de Reynolds. Dans le cas des écoulements incompressibles, la divergence de la vitesse est nulle ce qui implique que $\phi_{ii} = 0$. Ceci montre clairement la nature redistributive de ce terme.

Une évaluation correcte des tensions de Reynolds passe par une modélisation fine de ce terme. Pour tous les modèles existant dans la littérature,

leur point de départ s'appuie sur l'équation de Poisson pour les fluctuations de pression. A la base de cette équation, on décompose ϕ_{ij} en trois termes :

$$\phi_{ij} = \phi_{ij}^I + \phi_{ij}^{II} + \phi_{ij}^{III} \quad (2.42)$$

Le terme ϕ_{ij}^I représente l'interaction du mouvement turbulent avec lui-même et avec le mouvement moyen. Il sera décomposé en deux termes : le premier dénommé rapide parce qu'il réagit instantanément avec l'écoulement moyen et second est un terme dit lent par opposition au précédent.

Le terme ϕ_{ij}^{II} est spécifique aux écoulements à masse volumique variable.

Le terme ϕ_{ij}^{III} est lié aux contraintes moléculaires et qui est négligeable à haut nombres de Reynolds loin des parois.

La modélisation de ces trois termes repose sur les travaux de Rotta [85], Launder, Reece et Rodi [86], Launder [87] et Naot, Shavit et Wolfstein [88] :

- Modélisation du terme ϕ_{ij}^I

$$\phi_{ij}^I = -C_1 \bar{\rho} \varepsilon A_{ij} - C_2 \left(P_{ij} - \frac{1}{3} P_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (2.43)$$

Le premier terme dans l'équation (2.43) représente le retour à l'isotropie [85] et le second terme sert à rendre isotrope la production [88].

Le terme A_{ij} est le tenseur représentant l'écart à l'isotropie :

$$A_{ij} = \frac{\widetilde{u_i'' u_j''}}{k} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \quad (2.43)$$

- Modélisation du terme ϕ_{ij}^{II}

Ce terme est aussi une isotropisation de la production dans le cas où la masse volumique est variable.

$$\phi_{ij}^{II} = -C_3 \left(G_{ij} - \frac{1}{3} G_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (2.44)$$

- Modélisation du terme ϕ_{ij}^{III}

Ce terme est une correction d'écho de la paroi [86, 87]:

$$\phi_{ij}^{III} = \phi_{ijw} \quad (2.45)$$

2.5.1.5L'équation du taux moyen de dissipation de l'énergie cinétique turbulente

L'équation de transport du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente est modélisée d'une façon similaire à celle du modèle sauf pour le terme de diffusion qui est fermé par Daly et Harlow [84] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \varepsilon}{\partial x_i} = C_\varepsilon \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \frac{k}{\varepsilon} \widetilde{u_i u_j} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \\ - C_{\varepsilon 1} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{u_i u_j} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} + C_{\varepsilon 3} \frac{\varepsilon}{k} \frac{G_{kk}}{2} \end{aligned} \quad (2.44)$$

Si l'on suppose que les mécanismes de production de la turbulence par les gradients de vitesse et par les variations de la masse volumique sont équivalents, alors les constantes et seront prises égales l'une à l'autre.

Les constantes qui seront utilisées pour le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ sont données dans le tableau ci-dessous :

Tableau 2.2 Constantes du modèle $R_{ij} - \varepsilon$

C_1	C_2	C_3	C_s	C_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$
1.8	0.6	0.3	0.25	0.18	1.44	1.92	1.44

2.6 Conclusion

Les écoulements turbulents réactifs sont décrits mathématiquement par un système d'équations aux dérivées partielles pour les valeurs moyennes des variables du problème.

La fermeture des équations moyennées dans ce cas passe par trois problèmes fondamentaux :

- Relation de fermeture du taux de réaction moyen $\bar{\omega}$
- Relation pour fermer les flux turbulents de masse $\widetilde{u_i c''}$
- Modéliser les tensions de Reynolds $\widetilde{u_i u_j''}$

Ce dernier point, que nous avons traité dans ce chapitre, a fait l'objet de deux types de fermeture : le modèle $k - \varepsilon$ avec l'hypothèse de viscosité turbulente et le modèle $R_{ij} - \varepsilon$ où les tensions de Reynolds sont transportées. Nous avons opté pour ce dernier modèle car le modèle basé sur le concept de viscosité turbulente ne se comporte pas correctement dans le cas des écoulements impactant des obstacles.

CHAPITRE 3

MODELISATION DE LA COMBUSTION TURBULENTE

3.0 Introduction

Les deux problèmes cruciaux de la combustion turbulente se résument à obtenir des relations de fermeture du taux de production moyen $\bar{\omega}$ engendré par les réactions chimiques d'une part et pour les flux turbulents de masse d'autre part. Ces derniers feront l'objet du prochain chapitre.

Du fait de la forte non linéarité de l'expression du taux de production ou de destruction des différentes espèces donnée par la loi d'Arrhenius, il n'est pas possible de déterminer sa valeur moyenne en fonction des autres paramètres tels que la température, les fractions massiques des espèces. Il convient donc d'utiliser des modèles basés sur des approches phénoménologiques afin d'évaluer sa valeur moyenne.

Dans tout le chapitre, nous utiliserons pour la description de la flamme prémélangée : la variable d'avancement c définie de telle façon qu'elle soit nulle dans les gaz frais et égale à l'unité dans les gaz brûlés et la fraction de mélange introduite à la fin du premier chapitre qui est nulle dans l'oxydant pur et égale à l'unité dans le combustible pur.

3.1 Les différentes approches de modélisation

D'après l'article de Veynante et Vervish [89], trois approches peuvent être utilisées pour décrire les flammes turbulentes (Voir figure 3.1).

L'approche basée sur l'analyse géométrique décrit la flamme comme une surface. Cette analyse considère un front de flamme suffisamment mince comme une interface séparant les gaz frais des gaz brûlés et par conséquent elle est utilisée avec l'hypothèse du régime de combustion de flammelettes. A la base de cette approche, deux méthodes de calcul sont utilisées : la première consiste à dériver une équation de transport d'une iso-surface par exemple l'équation G [72, 90] et la seconde s'appuie sur le concept de densité de surface de flamme Σ qui mesure la surface de la flamme disponible localement par unité de volume [72, 91,

92]. La densité de surface de flamme Σ est directement reliée au taux de réaction chimique moyen :

$$\bar{\omega}_i = \Theta_i \Sigma \quad (3.1)$$

$\bar{\omega}_i$ est le taux de production chimique local moyenné le long de la direction normale à la flamme. L'avantage de cette modélisation est de découpler la description de la réaction chimique de la flamme de l'interaction de la flamme avec la turbulence.

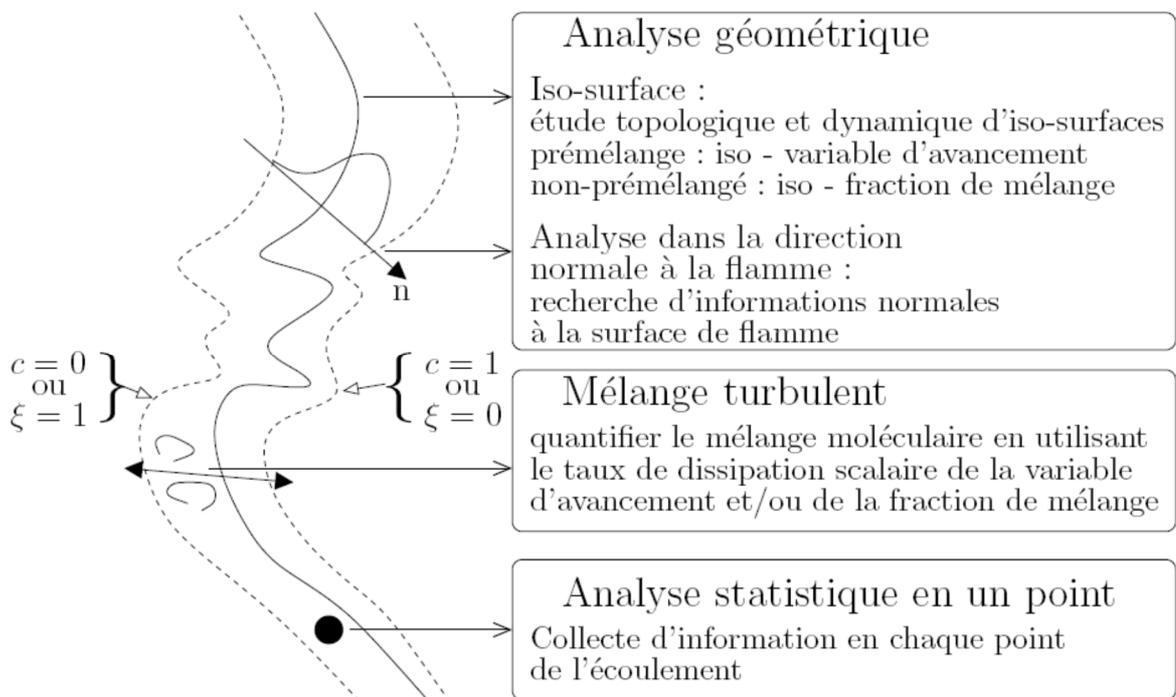


Figure 3.1 : Types d'analyses des flammes turbulentes d'après Veynante et Vervish

La seconde approche pour l'estimation du taux de production moyen consiste à quantifier précisément le mélange que la turbulence engendre entre les gaz frais et les gaz brûlés. Les termes responsables sur ce mélange sont les termes de dissipation scalaire ε_c , ε_ξ qui apparaissent dans les équations pour les variances $\widetilde{c'^2}$ et $\widetilde{\xi'^2}$. Dans le cas des flammes turbulentes plissées de

prémélange, il a été démontré qu'une relation algébrique puisse exister entre le taux de dissipation ε_c et le taux de réaction chimique moyen $\bar{\omega}_c$ et le terme $\overline{c''\omega_c}$ [93]. La réaction chimique va agir indirectement sur le taux de dissipation scalaire ε_ξ par le biais de la variation de la masse volumique alors les taux de dissipation scalaire ε_c et ε_ξ constituent des paramètres clés dans la modélisation des flammes turbulentes. Certains auteurs ont développé des méthodes où ils proposent de résoudre les équations de transport pour ces quantités [94, 95, 96].

La dernière approche utilise les propriétés statistiques des champs scalaires en un point de l'écoulement (moyennes, variances,...). Ces propriétés sont déduites de la fonction densité de probabilité (PDF). Ainsi, l'utilisation d'une méthode de PDF permet d'obtenir les propriétés statistiques des états intermédiaires c'est-à-dire dans le front de flamme.

La probabilité que la variable c^* ait une valeur comprise entre c et $c + dc^*$ au point x et au temps t est $P(c)dc^*$. Les quantités statistiques peuvent être déterminées à partir de la PDF :

$$\bar{c} = \int_0^1 cP(c; x, t)dc \quad \text{et} \quad \overline{c'^2} = \int_0^1 (c - \bar{c})^2 P(c; x, t)dc \quad (3.2)$$

La PDF doit être normalisée :

$$\int_0^1 P(c; x, t)dc = 1 \quad (3.3)$$

Dans le cas où on utilise plusieurs variables pour la description de la flamme, on utilise une PDF dite PDF jointe. Dans notre cas, la description de la structure de la flamme est en fait fonction de la variable d'avancement de la réaction et de la fraction de mélange, la PDF jointe s'écrit alors : $P(c, \xi; x, t)$.

L'expression du taux de réaction chimique moyen dont la valeur locale et instantanée est fonctions des deux variables citées précédemment s'écrit :

$$\bar{\omega}_c = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \int_0^1 \omega_c P(c, \xi; x, t) d\xi dc \quad (3.4)$$

L'introduction de la PDF conditionnée va permettre de décomposer cette PDF jointe des deux variables en deux PDF de telle façon que chaque PDF ne soit fonction que d'une seule variable. La PDF jointe de l'équation (3.4) s'exprime alors de la manière suivante :

$$P(c, \xi; x, t) = P(c \setminus \xi; x, t)P(\xi; x, t) \quad (3.5)$$

où :

$P(\xi; x, t)$ est la PDF de la fraction de mélange indépendante de la variable d'avancement.

$P(c \setminus \xi; x, t)$ est la PDF de la variable d'avancement conditionnée en une valeur particulière de la fraction de mélange.

Les moyennes statistiques conditionnées en chaque valeur particulière de la fraction de mélange sont maintenant définies :

$$\overline{c \setminus \xi} = \int_0^1 c P(c \setminus \xi; x, t) dc \quad (3.6)$$

Les modèles de la combustion turbulente basés sur l'approche statistique par le biais des PDF sont de deux types différents : les modèles à PDF présumée et les modèles à PDF transportée.

Le premier type de modélisation consiste à présumer la forme de la PDF. Si dans notre cas, on présume la PDF de la fraction de mélange à la forme de la fonction bêta alors la résolution des équations pour la valeur moyenne $\bar{\xi}$ et la variance $\overline{\xi'^2}$ suffisent, par le biais de la PDF, à déterminer toute quantité statistique dont la valeur locale et instantanée n'est fonction que de ξ .

Le deuxième type de modélisation cité au dessus consiste à résoudre une équation de transport de la PDF [97]. Ces méthodes ont l'avantage de prendre en compte la chimie de la réaction et par conséquent elles peuvent être applicables à tous les régimes de combustion.

Puisque la masse volumique est variable dans le cas des écoulements réactifs, il est indispensable d'utiliser une PDF définie au sens de Favre :

$$\tilde{P}(c; x, t) = \frac{\rho P(c; x, t)}{\bar{\rho}} \quad (3.7)$$

Dans notre travail, on ne va s'intéresser qu'à l'approche statistique à PDF présumée dans la modélisation de la combustion turbulente prémélangée.

3.2 Approches statistiques de la modélisation des flammes turbulentes prémélangées

3.2.1 Prémélange Parfait avec chimie infiniment rapide :

3.2.1.1 Modèle Eddy-Break-Up (EBU)

Les réactions chimiques se produisant au cours de la combustion sont multiples et complexes. Dans le cadre de l'étude de la combustion turbulente, il convient donc de schématiser la chimie ou bien de la considérer de façon globale. Avec ce point de vue, on peut tenter de la considérer comme connue dès que l'on connaît un temps caractéristique global de la combustion qu'on avait noté τ_c . Alors, on dit que les réactions sont très rapides, lorsque τ_c est très petit devant tous les autres temps du problème : $\tau_c \ll \tau_T$ et $\tau_c \ll \tau_K$.

Cette limite de réactions infiniment rapides a été reconnue très intéressante la première fois par Spalding [98] qui en a déduit une formule appelée « Eddy-Break-Up ». Dans ce modèle, on suppose que la réaction de combustion se produit et s'entretient grâce à la mise en contact des gaz frais et des gaz brûlés à la fréquence du mélange turbulent. Par ce raisonnement intuitif, Spalding aboutit à :

$$\bar{\omega}_c = C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{c}(1-\tilde{c})}{\tau_T} \quad (3.8)$$

où τ_T est l'échelle intégrale temporelle de la turbulence et C_{EBU} est une constante arbitraire généralement déterminée à partir de résultats expérimentaux.

La formule (3.8) a été justifiée théoriquement plus tard en 1977 par Moss et Bray [93] ce qui a permis de donner une interprétation physique à la constante C_{EBU} .

Le modèle EBU a été très utilisé dans les codes de calcul industriels et commerciaux car il est très simple à mettre en œuvre puisqu'il ne nécessite aucune équation de transport supplémentaire. L'inconvénient de ce modèle réside dans le fait que l'intervention de la chimie dans le modèle n'est possible qu'à travers la constante C_{EBU} .

Plus tard, en 1976, le modèle EBU a été amélioré par Magnussen et Hjertager [99] aboutissant au modèle dénommé Eddy Dissipation Model (EDM). Dans ce dernier, la variance est remplacée par la fraction massique de l'espèce en déficit. Le terme source du taux de réaction chimique moyen s'exprime alors par :

$$\bar{\omega}_c = A\bar{\rho}\frac{\tilde{\epsilon}}{k} \min\left(\tilde{Y}_F, \frac{\tilde{Y}_O}{\nu}, B\frac{\tilde{Y}_P}{1+\nu}\right) \quad (3.9)$$

où A et B sont des constantes de modélisation et ν désigne le coefficient stœchiométrique donné par l'expression :

$$\nu = \frac{\nu_o M_o}{\nu_F M_F} \quad (3.10)$$

Les coefficients ν_o et ν_F sont respectivement le coefficient stœchiométrique de l'oxygène et celui du combustible.

Il est à noter que les constantes dans ce modèle sont libres et elles sont adaptées par optimisation pour chaque géométrie et pour chaque combustible.

3.2.1.2 Modèle Bray-Moss-Libby (BML)

Le modèle de Bray-Moss-Libby pour le taux de réaction chimique moyen, a été introduit par Moss et Bray [93] et depuis développé par plusieurs auteurs. Les principaux résultats ont été publiés par Libby et Bray [100, 101], Libby, Bray et Moss [102], Bray, Libby et Moss [103, 49] et Bray et Libby [104]. Le modèle BML s'appuie sur une description statistique du front de flamme en régime de flammelettes où la flamme moyenne est représentée comme une collection de flammes laminaires influencées par la dynamique de l'écoulement.

A un instant t , un point quelconque de l'écoulement $M(x,t)$ est situé soit dans les gaz frais, soit dans les gaz brûlés soit dans les gaz en cours de réaction. L'idée consiste à présumer la forme de la PDF de la variable d'avancement comme une somme de gaz frais, de gaz brûlés et de gaz en train de brûler :

$$\tilde{P}(c; x, t) = \underbrace{\alpha(x, t)\delta(c)}_{\text{Gaz-Frais}} + \underbrace{\beta(x, t)\delta(1-c)}_{\text{Gaz-Brûlés}} + \underbrace{\gamma(x, t)f(c; x, t)}_{\text{Gaz-en-cours-de-réaction}} \quad (3.11)$$

où :

α , β et γ sont respectivement les probabilités de trouver des gaz frais, des gaz brûlés et des gaz en train de brûler.

$\delta(c)$ et $\delta(1-c)$ sont respectivement les distributions de Dirac correspondant aux gaz frais et aux gaz brûlés.

La normalisation de la PDF conduit à :

$$\alpha + \beta + \gamma = 1 \quad (3.12)$$

La PDF permet alors d'exprimer le terme source moyen de la variable c :

$$\bar{\omega}_c(x, t) = \bar{\rho}\gamma(x, t) \int_0^1 \frac{\omega(c)}{\rho} f(c; x, t) dc \quad (3.13)$$

Afin de pouvoir calculer ce terme source moyen, les paramètres de la PDF α , β , γ et la fonction f doivent d'abord être déterminés.

On considère maintenant le régime des flammes plissées, c'est-à-dire que les nombres de Reynolds et de Damköhler sont grands. Dans ce régime en un point donné de la flamme moyenne, on observe une intermittence de gaz frais et de gaz brûlés ; la PDF de c est alors quasiment bimodale ($\gamma \ll \alpha, \beta$), elle s'écrit :

$$\tilde{P}(c; x, t) = \alpha(x, t)\delta(c) + \beta(x, t)\delta(1-c) + O(D_a^{-1}) \quad (3.14)$$

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

$$\tilde{c} = \int_0^1 c \tilde{P}(c; x, t) dc = \beta \text{ et } \alpha = 1 - \beta \quad (3.15)$$

La masse volumique moyenne est calculée à partir de l'équation d'état (1.25) :

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \tilde{T}^* &= \rho_r T_r^* & \text{et} & & \tilde{T}^* &= \alpha T_r^* + \beta T_p^* = (1 - \tilde{c}) T_r^* + \tilde{c} T_p^* \\ \bar{\rho} &= \frac{\rho_r}{1 + \tau \tilde{c}} & \text{avec} & & \tau &= \frac{T_p^*}{T_r^*} - 1 = \frac{\rho_r}{\rho_p} - 1 \end{aligned} \quad (3.16)$$

où τ est le facteur d'expansion thermique.

Comme la connaissance de \tilde{c} suffit à définir complètement la forme de la PDF, alors n'importe quelle quantité statistique peut être calculée en fonction de \tilde{c} seulement ; notamment la variance :

$$\tilde{c}^2 = \alpha \tilde{c}^2 + \beta (1 - \tilde{c})^2 = \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad (3.17)$$

Cette valeur pour la variance correspond à la valeur physique maximale possible (Bimodalité).

La PDF ne permet cependant pas de calculer le terme source moyen car l'équation (3.13) conduit à une forme indéterminée $\gamma \rightarrow 0$ et $\int_0^1 \frac{\omega(c)}{\rho} f(c; x, t) dc \rightarrow \infty$.

Cependant, il a été démontré que dans ce cas limite, le terme source moyen est proportionnel à la dissipation scalaire. En dérivant une équation de transport pour la variance ($\tilde{c}(1 - \tilde{c})$), on obtient :

$$-2\rho D \frac{\partial c}{\partial x_k} \frac{\partial c}{\partial x_k} = \bar{\omega}_c - 2c \bar{\omega}_c \quad (3.18)$$

En posant $\bar{\rho} \varepsilon_c = 2\rho D (\partial c / \partial x_k)^2$ et $c_m = \bar{c} \bar{\omega}_c / \bar{\omega}_c$, le terme source moyen s'exprime, en supposant un nombre de Reynolds élevé, de la façon suivante :

$$\bar{\omega}_c = \frac{\bar{\rho} \varepsilon_c}{(2c_m - 1)} \quad (3.19)$$

Le terme source moyen est donc fonction de la dissipation qui caractérise le mélange et de qui caractérise la réaction chimique. La valeur de est un paramètre du modèle qui est déterminé par la structure locale de la flamme. La dissipation peut être résolue par une équation de transport ou par un modèle algébrique de relaxation linéaire. Dans ce dernier cas, on obtient :

$$\bar{\omega}_c = \frac{1}{(2c_m - 1)} \frac{\overline{\rho c^{n_2}}}{\tau_T} = \frac{1}{(2c_m - 1)} \bar{\rho} \frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}{\tau_T} \quad (3.20)$$

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

$$C_{EBU} = \frac{1}{(2c_m - 1)} \quad (3.21)$$

L'expression du taux de réaction chimique moyen est cette fois ci obtenue de façon analytique avec des hypothèses bien définies et une interprétation physique des constantes du modèle.

3.2.2 Prémélange Partiel

On peut dire que le prémélange est partiel lorsque la richesse de l'écoulement considéré est variable mais que la structure de la flamme turbulente conserve sensiblement la même structure qu'une flamme turbulente de prémélange parfait. C'est-à-dire que les flammes locales qui se propagent ne sont pas des flammes de diffusion mais elles se propagent dans des gradients de richesse. Cette représentation des flammes de prémélange partiel permet d'utiliser des modèles similaires à ceux utilisés pour les flammes de prémélange homogène mais étendus à des cas où la richesse varie [109]. Dans le cadre de variation de richesse, le modèle BML a été étendu pour prendre en compte des effets de dilution par Lahjaily [55] puis par Bigot [105].

Les phénomènes induits par les variations de richesse, que l'on cherche à représenter sont de deux natures différentes.

D'abord, la température de flamme adiabatique est fortement dépendante de la richesse du mélange et nous aurons aussi une variation du taux d'expansion thermique dans l'écoulement en fonction de la richesse locale. Ceci aura un effet important sur le champ de vitesses et rend flou la définition de la variable d'avancement c . Cette variable serait difficile à définir si à la fois des zones riches et des zones pauvres sont présentes dans l'écoulement. Cependant, l'équation de transport pour la variable c a l'avantage de faire apparaître naturellement des termes liés aux dissipations des scalaires [106].

Les hétérogénéités de richesse provoquent aussi des variations importantes du temps caractéristique chimique. Des richesses de mélanges éloignées de la stœchiométrie peuvent même mener à des extinctions. Le régime de combustion est donc très difficile à définir puisque des flammelettes peuvent coexister avec des flammes épaissies localement [109].

Pour prendre en compte précisément ces différents effets, le mélange réactif qui est caractérisé par la richesse doit être calculé à l'aide de la fraction de mélange.

Les modèles à chimie infiniment rapide décrits dans les paragraphes précédents peuvent être étendus à des configurations où la richesse est variable dans l'écoulement [55]. Dans ce cas, on assume que la combustion a lieu en régime de flammelettes quelque soit la fraction de mélange locale. Les fluctuations de la fraction de mélange sont alors décorrélées des fluctuations de la variable d'avancement et on peut alors adopter l'hypothèse que $\overline{\xi''c''} = 0$. Cependant, ces modèles ne permettent pas, en aucun cas, de prendre en compte de façon satisfaisante les effets dus aux variations du temps caractéristique chimique.

Toutefois les méthodes de PDF paraissent plus appropriées pour le calcul des flammes turbulentes partiellement prémélangées. La difficulté est alors de présumer ou de calculer la PDF jointe de la fraction de mélange et de la variable d'avancement de la réaction [109].

3.2.2.1 Le modèle Libby Williams (LW)

Libby et Williams en 2000 [107] ont proposé un modèle (LW) applicable à la combustion turbulente en prémélange partiel basé sur une PDF présumée et sur

une thermochimie fonction de deux variables, la fraction massique du combustible Y et la fraction de mélange ξ .

En considérant les hypothèses déjà introduites au chapitre 1, hypothèses de Schvab-Zeldovitch. La PDF jointe des deux variables Y et ξ est composée de deux pics de Dirac :

$$\tilde{P}(\xi, Y) = \alpha \delta(Y - Y_1) \delta(\xi - \xi_1) + (1 - \alpha) \delta(Y - Y_2) \delta(\xi - \xi_2) \quad (3.22)$$

La PDF sera donc définie par cinq paramètres : Y_1 , ξ_1 , Y_2 , ξ_2 et α . En résolvant les premiers et seconds moments des scalaires, les positions des pics de Dirac peuvent être obtenues par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \tilde{\xi} - \left(\frac{(1-\alpha)}{\alpha} \cdot \overline{(\rho \xi^{n_2})} / \bar{\rho} \right)^{1/2} & Y_1 &= \tilde{Y} - \left(\frac{(1-\alpha)}{\alpha} \cdot \overline{(\rho Y^{n_2})} / \bar{\rho} \right)^{1/2} \\ \xi_2 &= \tilde{\xi} + \left(\frac{\alpha}{(1-\alpha)} \cdot \overline{(\rho \xi^{n_2})} / \bar{\rho} \right)^{1/2} & Y_2 &= \tilde{Y} + \left(\frac{\alpha}{(1-\alpha)} \cdot \overline{(\rho Y^{n_2})} / \bar{\rho} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (3.23)$$

La seule inconnue restante maintenant est l'amplitude α .

En considérant la pente d de la droite support des deux pics de Dirac (D) $(Y - \tilde{Y}) / (\xi - \tilde{\xi}) = \pm d$, il en découle qu'elle est fonction des variances des scalaires :

$$d = \left(\frac{\overline{(\rho Y^{n_2})}}{\overline{(\rho \xi^{n_2})}} \right)^{1/2} \quad (3.24)$$

En introduisant l'abscisse g le long de la droite (D), les positions des pics seront exprimées par :

$$g_1 = \tilde{g} - \left(\frac{(1-\alpha)}{\alpha} \cdot \overline{(\rho g^{n_2})} / \bar{\rho} \right)^{1/2} \quad g_2 = \tilde{g} + \left(\frac{\alpha}{(1-\alpha)} \cdot \overline{(\rho g^{n_2})} / \bar{\rho} \right)^{1/2} \quad (3.25)$$

Les moments de g sont définis de la façon suivante : $\tilde{g} = 0$ et $\overline{\rho g^{n_2}} = \overline{\rho \xi^{n_2}} + \overline{\rho Y^{n_2}}$.

Dans le cas d'un prémélange partiel pauvre, la figure 3.2 représente un exemple des pics de Dirac dans l'espace des compositions. Pour déterminer l'amplitude α , Libby et Williams ont proposé de résoudre une équation de transport pour la corrélation croisée $\overline{\rho Y'' \xi''}$.

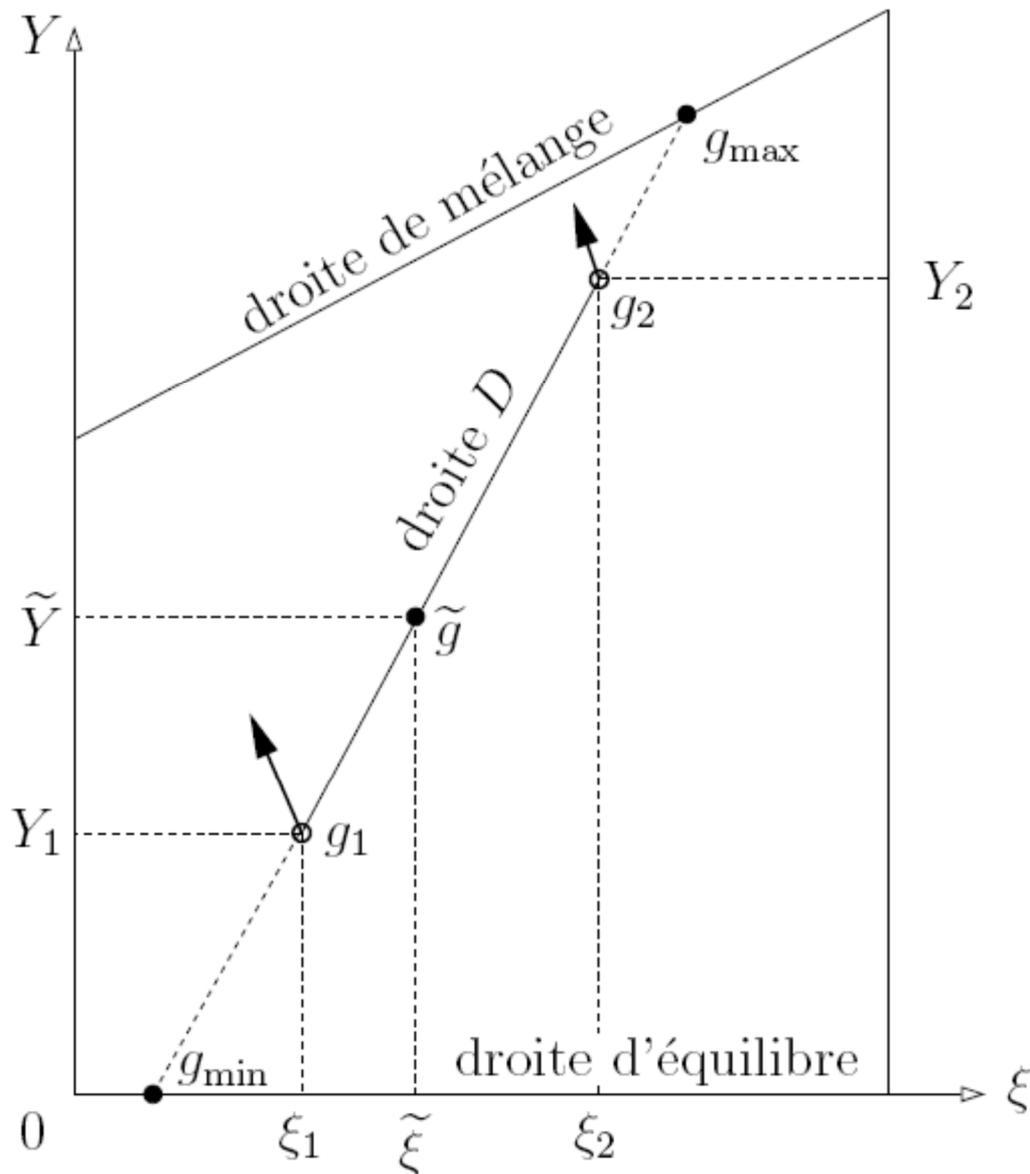


Figure 3.2 : Positions des pics de Dirac dans l'espace des compositions [109]

Cependant, cette proposition n'est pas réalisable car la PDF à deux pics de Dirac impose une relation de dépendance entre la covariance $\overline{\rho Y'' \xi''}$ et les variances : $\overline{\rho \xi''^2}, \overline{\rho Y''^2}$ [108] :

$$\overline{\rho Y'' \xi''} = \sqrt{\overline{\rho \xi''^2} \cdot \overline{\rho Y''^2}} \quad (3.26)$$

Au laboratoire de combustion et détonique de Poitiers, Ribert et al. [108] ont alors proposé de déterminer l'amplitude α en considérant que la valeur de α obtenue lorsque les pics sont à leur position extrême sur la droite D est valable quelque soient les positions des pics :

$$\alpha = \frac{g_{\max} - \tilde{g}}{g_{\max} - g_{\min}} \quad (3.27)$$

Les valeurs limites de g , g_{\max} et g_{\min} , seront déterminées par les différentes droites de l'espace des compositions. Voir figure 3.2

L'analyse introduite par Libby et Williams puis le modèle LW-P à deux pics de Dirac utilisé par Ribert et al., sont à l'origine du modèle LW-P à quatre pics de Dirac détaillé dans la thèse de doctorat de Robin Vincent [109].

3.2.2.2 Le modèle Libby Williams Poitiers (LW-P)

Le modèle qui sera décrit dans cette partie est un développement du modèle décrit dans le paragraphe ci-dessus. Il utilise une approche de PDF présumée qui permet de prendre en compte un temps chimique fini sans utiliser une équation pour la PDF. Le taux de réaction chimique moyen est alors facilement calculé mais un modèle algébrique pour la dissipation scalaire serait nécessaire puisque l'équation pour ce terme n'est pas résolue.

Le modèle est basé sur l'analyse originale de Libby et Williams [107], ensuite beaucoup de travaux ont été poursuivis au LCD à Poitiers et ont abouti au modèle LW-P.

Le modèle se repose sur les approximations de Schvab-Zeldovitch (une réaction globale, $Le=1$ et $Ma < 0.3$) et toutes les hypothèses introduites dans le premier chapitre de ce mémoire. Par conséquent, l'état thermochimique du mélange est déterminé par deux variables : la fraction de mélange et la fraction massique du combustible.

Les paramètres de forme de la PDF jointe $\tilde{P}(\xi, Y)$ seront déterminés à partir des premiers et seconds moments de ξ et Y : la fraction de mélange moyenne $\tilde{\xi}$,

sa variance ξ'^2 , la fraction massique moyenne du combustible \tilde{Y} , sa variance Y'^2 et la covariance $\widetilde{Y'\xi'}$.

La résolution d'équations de transport pour ces cinq quantités moyennes serait donc nécessaire.

Le principal avantage de l'utilisation de cette méthode est de ne pas imposer un régime de combustion particulier. Le modèle est donc théoriquement applicable à des configurations allant des flammes parfaitement prémélangées aux flammes non prémélangées quelque soit le nombre de Damköhler. La forme présumée de la PDF à plusieurs pics de Dirac permet d'évaluer les différents termes non fermés des équations de transport, notamment les termes liés à la réaction chimique. La PDF utilisée sera composée de quatre pics de Dirac en prémélange partiel [109].

3.2.2.2.1 Cinétique chimique :

Comme ça a été fait dans les travaux de Ribert et al. [110] et Robin et al. [111], le temps chimique a été introduit dans les équations par l'expression instantanée du taux de consommation du combustible qui était exprimé par la loi d'Arrhenius (1.21). Dans les travaux cités ci-dessus, les constantes a et b sont prises égales à l'unité et le coefficient pré-exponentiel est ajusté au mélange réactif considéré dans chaque étude. Les variations de richesse sont prises en compte dans cette expression du taux de disparition du combustible par le biais de la température $T(\xi, Y)$ et des fractions massiques de réactifs Y et $Y_{O_2}(\xi, Y)$.

Cependant, cette représentation globale de la cinétique chimique n'est pas valable sur tout le domaine de variation de la richesse. Parallèlement, les travaux de Fernandez-Tarrazo et al. [112] ont prouvé qu'une représentation globale de la cinétique pouvait donner des résultats satisfaisants sur tout le domaine de variation de la richesse à condition d'utiliser un facteur pré-exponentiel et une température d'activation adéquats qui soient des fonctions de la richesse.

De façon à rendre la loi d'Arrhenius pour la réaction globale applicable à un large domaine de richesse, Robin et al. l'expriment de la façon suivante [109, 111] :

$$\omega = \rho\Omega = \rho K(\xi)(Y - Y_{\min}(\xi)) \exp(-T_a / T) \quad (3.28)$$

La température d'activation est considérée constante mais le coefficient pré-exponentiel K est fonction de la fraction de mélange. La valeur minimale possible pour la fraction massique du combustible est également fonction de la fraction de mélange.

Cette valeur limite est définie par les droites de combustion complète du domaine de définition des couples (ξ, Y) . Voir figure 1.6

Une tabulation du facteur pré-exponentiel est créée à l'aide d'un logiciel de calcul de flamme laminaire 1D de type Chemkin (Premix ou Cantera). Les valeurs de $K(\xi)$ sont ajustées de façon à obtenir les mêmes vitesses de propagation que celles obtenues avec des schémas cinétiques détaillés (le GRI 2.11 dans le cas de la combustion du méthane dans l'air) [109].

Les raisons pour lesquelles la loi d'Arrhenius est exprimée sous cette forme et les détails du calcul Chemkin sont explicités dans le paragraphe 9.2.2 du chapitre 9 de la thèse de Robin Vincent [109].

3.2.2.2.2 Espace des compositions

Le domaine de définition de la PDF est limité par trois droites comme montré sur la figure 1.6. qui est reprise sur la figure 3.3

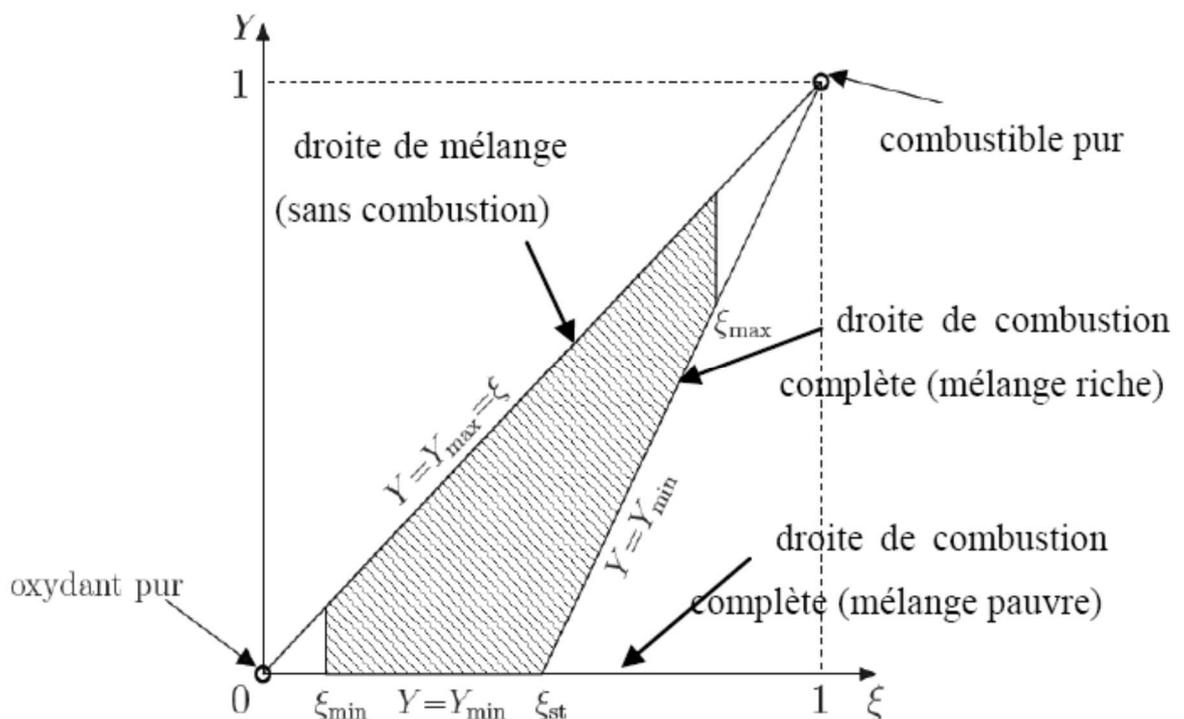


Figure 3.3 : Domaine d'existence des couples (ξ, Y) [107].

La droite de mélange où Y atteint sa valeur maximale $Y = Y_{\max} = \xi$, la droite de combustion complète pauvre où Y atteint sa valeur minimale pour des cas pauvres $Y = Y_{\min} = 0$ et la droite de combustion complète riche où Y atteint sa valeur minimale pour des cas riches $Y = Y_{\min} = (\xi - \xi_{st}) / (1 - \xi_{st})$

La variable d'avancement Y est donc comprise entre Y_{\min} (gaz entièrement brûlés) et Y_{\max} (gaz frais). Ces limites sont des fonctions connues de la fraction de mélange ξ [109].

$$Y_{\max}(\xi) = \xi \text{ et } Y_{\min}(\xi) = A(\xi)(\xi - \xi_{st}) \quad (3.29)$$

$A(\xi)$ représente le coefficient directeur de la droite $Y_{\min}(\xi)$, il est donc discontinu.

$A(\xi) = 0$ en prémélange pauvre et $A(\xi) = 1 / (1 - \xi_{st})$ en prémélange riche.

En introduisant la fonction de Heaviside $H(\xi - \xi_{st})$, l'expression suivante est obtenue [109] :

$$A(\xi) = \frac{1}{1 - \xi_{st}} H(\xi - \xi_{st}) \quad (3.30)$$

Il est à noter que, dans le cas des flammes turbulentes partiellement prémélangées, la fraction de mélange n'atteint pas systématiquement les valeurs extrêmes correspondant à l'oxydant pur ($\xi = 0$) et au combustible pur ($\xi = 1$). Le domaine de définition serait alors délimité par deux droites verticales supplémentaires $\xi = \xi_{\min}$ et $\xi = \xi_{\max}$. Dans le cas limite de flammes parfaitement prémélangées, le domaine se réduit alors à une seule droite verticale $\xi = \xi_{\min} = \xi_{\max}$

3.2.2.2.3 Paramètres de la PDF

Le modèle LW-P est basé sur l'existence d'une PDF formé de quatre distributions de Dirac. On assume que pour chaque valeur de la richesse, il existe deux avancements (Y_a, Y_b) différents. Voir figure 3.4.

Les paramètres de la PDF, c'est-à-dire les positions et les amplitudes des pics de Dirac dans l'espace des compositions, sont déterminés à partir des premiers et seconds moments des scalaires : $\tilde{\xi}$, $\tilde{\xi}''^2$, \tilde{Y} , Y''^2 , $\tilde{\xi}''\tilde{Y}''$.

La PDF jointe de la fraction de mélange et de la fraction massique du combustible $\tilde{P}(\xi, Y)$ est tout d'abord exprimée par deux distributions de Dirac en deux valeurs de la fraction de mélange [109] :

$$\tilde{P}(Y, \xi) = \alpha \tilde{P}_a(Y) \delta(\xi - \xi_a) + (1 - \alpha) \tilde{P}_b(Y) \delta(\xi - \xi_b) \quad (3.31)$$

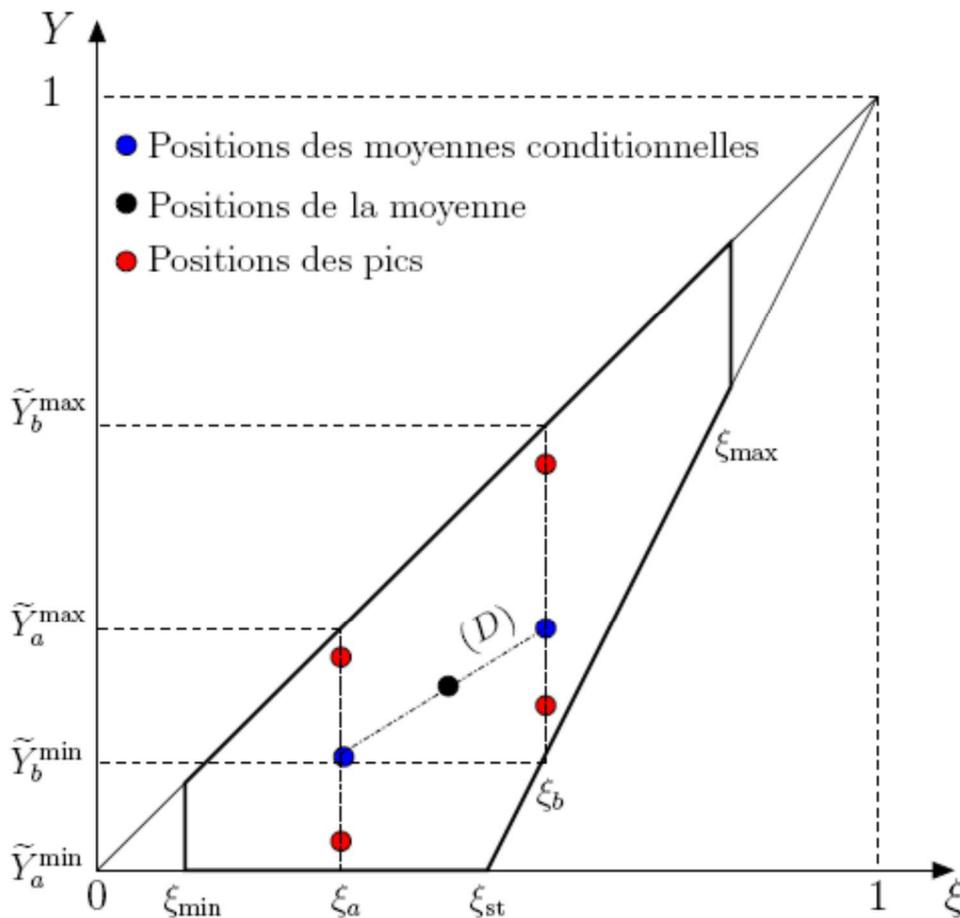


Figure 3.4 : Répartition des pics de Dirac dans le domaine d'existence [109]

L'expression (3.31) a fait apparaître les PDF de Y conditionnées en ξ_a et ξ_b . Ces PDF seront aussi exprimées par deux distributions de Dirac [109] :

$$\tilde{P}_a(Y) = \beta \delta(Y - Y_{a1}) + (1 - \beta) \delta(Y - Y_{a2})$$

$$\tilde{P}_b(Y) = \gamma \delta(Y - Y_{b1}) + (1 - \gamma) \delta(Y - Y_{b2}) \quad (3.32)$$

Les quatre pics de Dirac résultant de la PDF jointe sont représentés dans l'espace des compositions sur la figure 3.4.

Finalement, la PDF jointe est définie par neuf paramètres α , β , γ , ξ_a , ξ_b , Y_{a1} , Y_{a2} , Y_{b1} et Y_{b2} qui sont à déterminer.

Les quantités moyennes transportées $\tilde{\xi}$, $\tilde{\xi}''^2$, \tilde{Y} , Y''^2 et $\widetilde{\xi''Y''}$ fournissent alors cinq relations [109] :

$$\begin{aligned}\tilde{\xi} &= \alpha\xi_a + (1-\alpha)\xi_b \\ \widetilde{\xi''^2} &= \alpha\xi_a^2 + (1-\alpha)\xi_b^2 - \tilde{\xi}^2 = \alpha(1-\alpha)(\xi_a - \xi_b)^2\end{aligned}\quad (3.33)$$

$$\begin{aligned}\tilde{Y} &= \alpha\tilde{Y}_a + (1-\alpha)\tilde{Y}_b \\ \widetilde{Y''^2} &= \alpha(Y_a''^2 + \tilde{Y}_a^2) + (1-\alpha)(Y_b''^2 + \tilde{Y}_b^2) - \tilde{Y}^2\end{aligned}\quad (3.34)$$

$$\widetilde{\xi''Y''} = \alpha\tilde{Y}_a\xi_a + (1-\alpha)\tilde{Y}_b\xi_b - \tilde{Y}\tilde{\xi} = \alpha(1-\alpha)(\tilde{Y}_b - \tilde{Y}_a)(\xi_b - \xi_a) \quad (3.35)$$

Ces expressions font apparaitre les moyennes et variances conditionnées en ξ_a et ξ_b notées \tilde{Y}_a , \tilde{Y}_b , $Y_a''^2$, $Y_b''^2$. Les PDF conditionnées permettent d'exprimer ces quantités en fonction des paramètres recherchés [109] :

$$\begin{aligned}\tilde{Y}_a &= \beta\tilde{Y}_{a1} + (1-\beta)\tilde{Y}_{a2} \\ Y_a''^2 &= \beta Y_{a1}^2 + (1-\beta)Y_{a2}^2 - \tilde{Y}_a^2 = \beta(1-\beta)(Y_{a2} - Y_{a1})\end{aligned}\quad (3.36)$$

$$\begin{aligned}\tilde{Y}_b &= \gamma\tilde{Y}_{b1} + (1-\gamma)\tilde{Y}_{b2} \\ Y_b''^2 &= \gamma Y_{b1}^2 + (1-\gamma)Y_{b2}^2 - \tilde{Y}_b^2 = \gamma(1-\gamma)(Y_{b2} - Y_{b1})\end{aligned}\quad (3.37)$$

La sixième relation est obtenue en égalisant les variances normalisées conditionnées en ξ_a et ξ_b [110] :

$$\frac{\tilde{Y}_a''^2}{(\tilde{Y}_a^{\max} - \tilde{Y}_a)(\tilde{Y}_a - \tilde{Y}_a^{\min})} = \frac{\tilde{Y}_b''^2}{(\tilde{Y}_b^{\max} - \tilde{Y}_b)(\tilde{Y}_b - \tilde{Y}_b^{\min})} \quad (3.38)$$

\tilde{Y}_a^{\max} , \tilde{Y}_a^{\min} , \tilde{Y}_b^{\max} , \tilde{Y}_b^{\min} désignent les valeurs maximales et minimales possibles pour les moyennes conditionnées en ξ_a et ξ_b .

Finalement, les relations (3.33), (3.34), (3.35) et (3.38) ont permis d'obtenir les six paramètres de la PDF [109] :

$$\begin{aligned}\xi_a &= \tilde{\xi} - \sqrt{\frac{(1-\alpha)}{\alpha}} \tilde{\xi}^{\prime\prime 2} \\ \xi_b &= \tilde{\xi} + \sqrt{\frac{\alpha}{(1-\alpha)}} \tilde{\xi}^{\prime\prime 2}\end{aligned}\quad (3.39)$$

$$\begin{aligned}Y_{a1} &= \tilde{Y}_a - \sqrt{\frac{(1-\beta)}{\beta}} \tilde{Y}_a^{\prime\prime 2} \\ Y_{a2} &= \tilde{Y}_a + \sqrt{\frac{\beta}{(1-\beta)}} \tilde{Y}_a^{\prime\prime 2}\end{aligned}\quad (3.40)$$

$$\begin{aligned}Y_{b1} &= \tilde{Y}_b - \sqrt{\frac{(1-\gamma)}{\gamma}} \tilde{Y}_b^{\prime\prime 2} \\ Y_{b2} &= \tilde{Y}_b + \sqrt{\frac{\gamma}{(1-\gamma)}} \tilde{Y}_b^{\prime\prime 2}\end{aligned}\quad (3.41)$$

Il reste toujours trois paramètres inconnus qui sont les amplitudes α , β et γ des distributions de Dirac. Afin les exprimer, trois relations seront donc nécessaires pour que les paramètres de la PDF soient entièrement déterminés.

Deux méthodes sont proposées pour la détermination des amplitudes.

Dans la première méthode, on assume que les expressions des amplitudes, lorsque les pics sont sur les bords du domaine, sont valables quelque soient leurs positions. L'expression des amplitudes est alors donnée par les relations suivantes [109] :

$$\alpha = \frac{\xi_{\max} - \tilde{\xi}}{\xi_{\max} - \xi_{\min}} \quad \beta = \frac{Y_a^{\max} - Y_a}{\tilde{Y}_a^{\max} - \tilde{Y}_a^{\min}} \quad \gamma = \frac{Y_b^{\max} - Y_b}{\tilde{Y}_b^{\max} - \tilde{Y}_b^{\min}} \quad (3.42)$$

Les valeurs maximales et minimales sont déterminées à partir du domaine de définition de la PDF. Cette méthode peut poser d'énormes problèmes dans le cas où les positions des distributions s'écartent de leurs positions limites. En effet,

on peut se retrouver dans des situations où on obtient la valeur moyenne avec des amplitudes de distribution très différentes [111].

La seconde méthode qui est utilisée dans le modèle LW-p, proposée par Champion et Libby [113], consiste à utiliser le moment du troisième ordre. Afin d'éviter de dériver des équations de transport supplémentaires, le moment d'ordre 3 est exprimé en fonction des deux premiers moments. Dans ce cas, la relation utilisée pour calculer le moment d'ordre 3 est issue des propriétés des fonctions β . Pour une variable H , comprise entre H_{\min} et H_{\max} , on a démontré que [113] :

$$\widetilde{H}^{\prime 3} = 2\widetilde{H}^{\prime 2} \frac{H_{\max} - 2\widetilde{H} + H_{\min}}{(H_{\max} - \widetilde{H})(\widetilde{H} - H_{\min}) + \widetilde{H}^{\prime 2}} \quad (3.43)$$

Le moment d'ordre 3 peut également être exprimé en considérant une PDF à deux pics de Dirac H_1 et H_2 d'amplitudes respectives μ et $1-\mu$ [109] :

$$\widetilde{H}^{\prime 3} = \mu(1-\mu)(2\mu-1)(H_2 - H_1)^3 \quad (3.44)$$

A l'aide de ces deux relations on a pu exprimer l'amplitude μ en fonction des deux premiers moments [109] :

$$\mu = 0.5 \pm 0.5\sqrt{b} \quad \text{avec} \quad b = \frac{\widetilde{H}^{\prime 3 2}}{4\widetilde{H}^{\prime 2 3} + \widetilde{H}^{\prime 3 2}}$$

et

(3.45)

$$b = \frac{\widetilde{H}^{\prime 2} (H_{\max} - 2\widetilde{H} + H_{\min})^2}{\widetilde{H}^{\prime 2} (H_{\max} - 2\widetilde{H} + H_{\min})^2 + \left((H_{\max} - \widetilde{H})(\widetilde{H} - H_{\min}) + \widetilde{H}^{\prime 2} \right)^2}$$

La relation (3.45) serait utilisée dans le modèle LW-p pour déterminer les amplitudes α , β et γ avec respectivement le premier et le second moments $\widetilde{\xi}$ et $\widetilde{\xi}^{\prime 2}$, \widetilde{Y}_a et $\widetilde{Y}_a^{\prime 2}$, \widetilde{Y}_b et $\widetilde{Y}_b^{\prime 2}$. Les valeurs maximales et minimales seront déterminées à partir du domaine de définition de la PDF.

Les positions et les amplitudes des pics de Dirac dans l'espace des compositions sont alors maintenant connues.

3.2.2.2.4 Comportement de la PDF

Comme illustré sur la figure 3.5, la méthode de construction de la PDF doit permettre de retrouver les différents cas limites. Dans le cas d'un prémélange parfait, la variance de fraction de mélange est nulle et la PDF se réduit à deux pics de Dirac positionnés sur une droite verticale (cas 1 sur la figure 3.5). Les positions des différentes distributions sont alors contrôlées uniquement par la fraction massique moyenne du combustible et sa variance. Si la variance de fraction massique est nulle alors tous les pics sont sur le point moyen (cas 2 sur la figure 3.5). Dans le cas où la variance de la fraction massique du combustible tend vers sa valeur maximale, les pics sont rejetés près des bords du domaine (cas 3 sur la figure 3.5). Dans ce cas, le modèle LW-P tend vers le modèle BML et les formes finales des taux de réaction chimique moyen seront les mêmes [114].

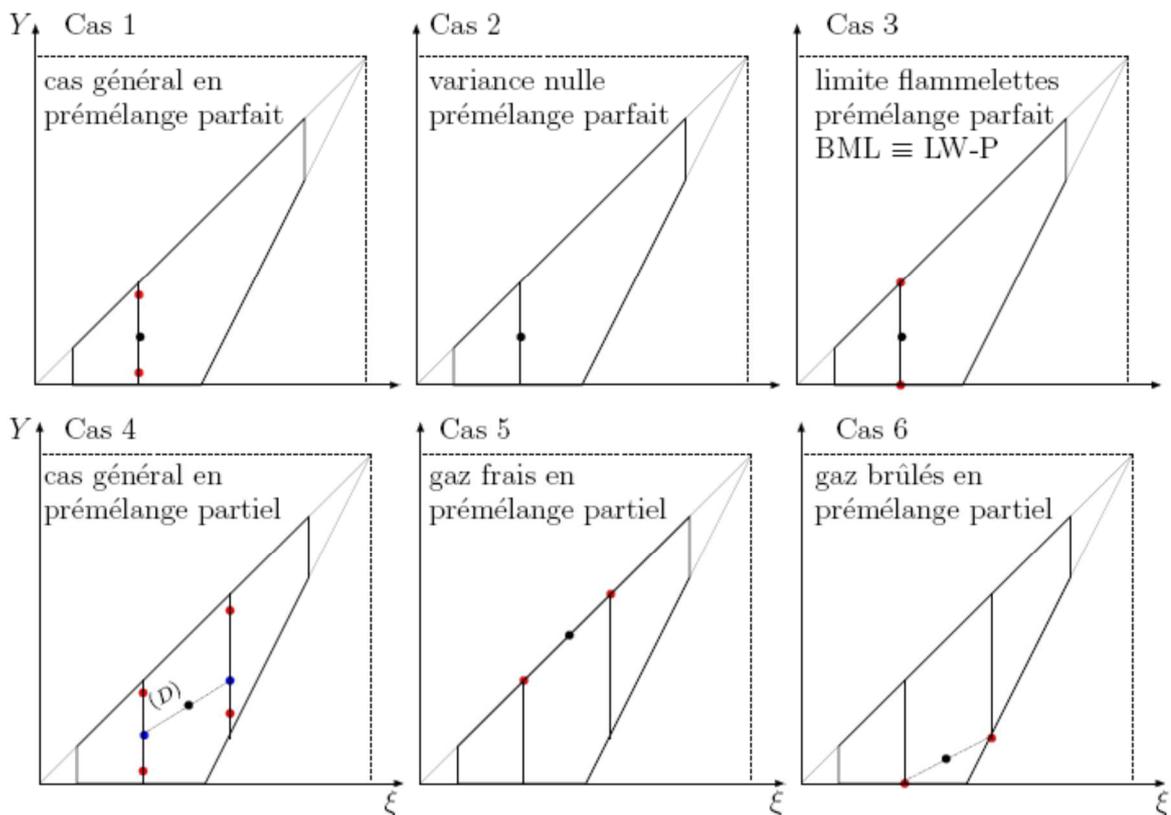


Figure 3.5 : Comportement de la PDF[109]

La différence importante entre les modèles LW-P et BML est que le modèle BML est constitué de deux pics dans des états non réactifs (Gaz frais et Gaz

brulés) et d'un fond réactif alors que le modèle LW-P n'est constitué que de deux pics réactifs. Mais à la limite où γ tend vers zéro (BML), les deux pics de LW-P tendent vers les états non réactifs. Dans ce cas, la variance de fraction massique tend vers sa valeur maximale théorique : il n'y a plus de réaction chimique, la flamme est devenue si mince qu'elle a disparu [109].

Lorsque le point moyen est dans les gaz frais (cas 5 sur la figure 3.5) ou dans les gaz brulés (cas 6 sur la figure 3.5) et que la variance de la fraction de mélange est non nulle, la PDF se réduit encore à deux pics de Dirac. Dans ces cas, deux des quatre pics de Dirac sont sur la moyenne conditionnelle \tilde{Y}_a et les deux autres sur la moyenne conditionnelle \tilde{Y}_b [109].

Le modèle à PDF présumée présenté dans la thèse de V. Robin [109], qui consiste à répartir quatre distributions de Dirac dans l'espace des compositions permet une analyse approfondie des phénomènes induits par la combustion turbulente prémélangée à richesse variable. Le deuxième avantage de cette approche mathématique réside dans la simplicité avec laquelle les différents termes non fermés des équations de transport sont modélisés.

Pour simplifier davantage les relations lors de la fermeture des différents termes des équations, les quatre états a1, a2, b1 et b2 seront aussi notés q ($q \in [1, 4]$). Les valeurs moyennes s'exprimeront alors de la manière suivante :

$$\tilde{\xi} = \sum_{q=1}^4 \alpha_q \xi_q \quad \tilde{Y} = \sum_{q=1}^4 \alpha_q Y_q \quad \tilde{u}_i = \sum_{q=1}^4 \alpha_q \bar{u}_{iq} \quad (3.46)$$

Les amplitudes α_q sont reliées aux amplitudes α , β et γ par les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \alpha_{a1} = \alpha\beta \\ \alpha_2 &= \alpha_{a2} = \alpha(1-\beta) \\ \alpha_3 &= \alpha_{b1} = (1-\alpha)\gamma \\ \alpha_4 &= \alpha_{b2} = (1-\alpha)(1-\gamma) \end{aligned} \quad (3.47)$$

3.3 Conclusion

Nous avons présenté les différentes approches possibles pour la modélisation des flammes turbulentes de prémélange. Le modèle LW-p qui sera utilisé est une approche de PDF présumée qui permet de prendre un temps chimique fini sans utiliser une équation pour cette PDF.

Le taux de réaction chimique moyen est calculé facilement mais un modèle de fermeture de la dissipation scalaire est nécessaire.

Le modèle décrit dans ce chapitre représente l'effet de la turbulence sur la flamme (transport gradient des flux turbulents) mais il ne tient pas compte de l'effet de la flamme sur la turbulence (transport à contre gradient).

CHAPITRE 4

TRANSPORTS TURBULENTS ET DISSIPATIONS SCALAIRES

4.0 Introduction

Les équations moyennes pour la fraction de mélange (2.23) et pour la fraction massique du combustible (2.24) font apparaître les flux scalaires turbulents $\overline{u_i \xi''}$ et $\overline{u_i Y''}$. L'équation moyenne pour la variable d'avancement c fait aussi apparaître le flux de la variable d'avancement $\overline{u_i c''}$. Ces termes doivent être donc modélisés.

Par analogie avec la loi de Fick, l'expression du flux de diffusion turbulente de la variable d'avancement c est couramment approchée par une loi de type gradient, soit :

$$\overline{u_i c''} = -\frac{\nu_T}{\sigma_T} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \quad (4.1)$$

où σ_T est le nombre de Schmidt turbulent qui, dans le cas d'écoulements réactifs, est compris entre 0.5 et 1. Concernant les écoulements turbulents réactifs dans le cas des flammes de prémélange, de nombreuses études ont montré que le phénomène de diffusion non gradient et plus particulièrement à contre gradient pouvait se produire [115, 116, 117], c'est-à-dire que le transport turbulent de la variable d'avancement s'opère dans la direction opposée à celle de la relation (4.1). De plus, ces mêmes études ont montré que ce phénomène engendrait une production de turbulence par la flamme. En effet, le développement d'une approche statistique pour les variables aérothermochimiques du mélange réactif associée aux équations de transport des flux turbulents de masse permettent de mieux caractériser le problème.

4.1 Transports gradient et contre-gradient

Ce phénomène de transport turbulent à contre gradient peut être expliqué théoriquement par l'approche de Bray, Moss et Libby décrite au paragraphe 3.2.1.2. La zone de réaction est considérée comme composée de gaz frais et de gaz brûlés séparés par des flammes laminares infiniment minces. Dans l'hypothèse de ce

régime de flammèches, on peut exprimer la PDF jointe de $c - u$ sous forme bimodale [100, 101] par :

$$\tilde{P}(u_i, c; x, t) = \alpha(x, t)\delta(c)P(u_i \setminus c = 0) + \beta(x, t)\delta(1-c)P(u_i \setminus c = 1) + O(1/D_a) \quad (4.2)$$

où u_i représente la i -ème composante de la vitesse de l'écoulement réactif ; les coefficients α et β étant donnés par les relations

Exprimons la vitesse moyenne de l'écoulement via l'équation (4.2) :

$$\bar{\rho}\tilde{u}_i = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^1 \rho u_i P(u_i, c; x, t) du_i dc \quad (4.3)$$

$$= \bar{\rho}(1-\tilde{c})\bar{u}_{ir} + \bar{\rho}\tilde{c}\bar{u}_{ip} + O(\gamma)$$

$$\tilde{u}_i = \alpha\bar{u}_{ir} + \beta\bar{u}_{ip} = (1-\tilde{c})\bar{u}_{ir} + \tilde{c}\bar{u}_{ip} \quad (4.4)$$

\bar{u}_{ir} et \bar{u}_{ip} sont respectivement les composantes de la vitesse moyenne conditionnées dans les gaz frais et les gaz brûlés :

$$\bar{u}_{ir} = \int_{-\infty}^{+\infty} u_i P(u_i \setminus c = 0) du_i \text{ et } \bar{u}_{ip} = \int_{-\infty}^{+\infty} u_i P(u_i \setminus c = 1) du_i \quad (4.5)$$

Cette PDF jointe permet d'exprimer les flux turbulents de la variable d'avancement c :

$$\widetilde{u_i c^n} = \tilde{c}(1-\tilde{c})(\bar{u}_{ip} - \bar{u}_{ir}) \quad (4.6)$$

Afin de mieux discuter l'équation (4.6), considérons un écoulement unidirectionnel turbulent réactif normal au front de flamme moyen comme représenté sur la figure 4.1 :

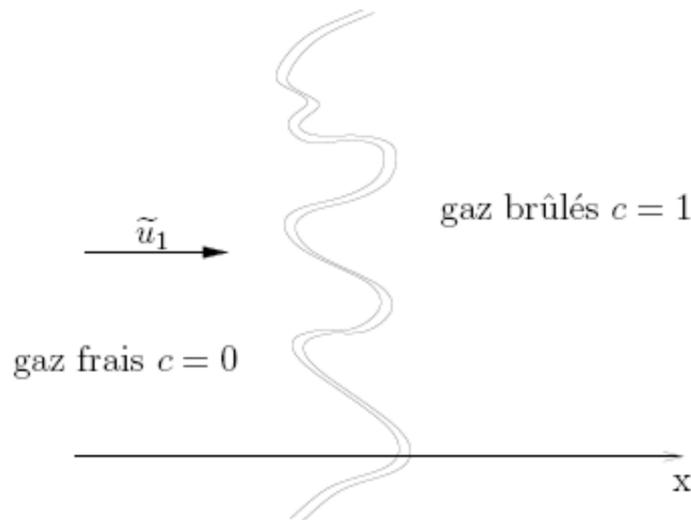


Figure 4.1 : Représentation d'une flamme turbulente dans un écoulement monodimensionnel

La variable d'avancement moyenne \tilde{c} augmente à la traversée de la flamme moyenne c'est-à-dire qu'elle passe de la valeur 0 dans les gaz frais à la valeur unité dans les gaz brûlés et par conséquent son gradient $\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x}$ serait positif.

L'expression (4.1) conduit alors à une valeur de signe négatif pour le flux turbulent $\overline{u_i'' c''}$.

Du fait de l'expansion thermique, la masse volumique des gaz brûlés est exprimée en fonction de la masse volumique des réactifs par :

$$\rho_p = \frac{\rho_r}{1 + \tau} \quad (4.7)$$

La conservation de la masse à la traversée du front de flamme local nous permet d'écrire :

$$\rho_p \bar{u}_p = \rho_r \bar{u}_r \quad (4.8)$$

En combinant les relations (4.7) et (4.8), on peut donc exprimer la vitesse moyenne conditionnée dans les gaz brûlés en fonction de la vitesse moyenne conditionnée dans les gaz frais par :

$$\bar{u}_p = (1 + \tau) \bar{u}_r \quad (4.9)$$

La relation (4.9) montre que $\bar{u}_p > \bar{u}_r$, ce qui nous permet de dire que la vitesse moyenne conditionnée dans les gaz brûlés est donc susceptible d'être plus

importante que celle conditionnée dans les gaz frais et par conséquent la relation (4.6) conduit donc à un signe positif pour le flux turbulent : $\overline{u_i''c''} > 0$

La modélisation du flux turbulent par le type gradient comme dans l'équation (4.1) fournit une valeur du flux turbulent opposée à celle obtenue par la relation (4.6), la diffusion est donc dans ce cas est à contre gradient.

Lorsque le facteur d'expansion thermique τ augmente, l'écart entre $\overline{u_{ip}}$ et $\overline{u_{ir}}$ augmente aussi ; le transport turbulent à contre gradient sera d'autant plus important que le facteur d'expansion thermique est élevé [118, 119]. En revanche, au fur et à mesure que le rapport u' / S_L augmente, la diffusion du scalaire redevient contrôlée par le mélange turbulent de type gradient. Cette situation a été confirmée aussi par les simulations numériques directes [118]. En conséquence, le nombre de Bray $N_B = \tau S_L / u'$ a ainsi été introduit dans le but de caractériser la transition d'un type de transport à un autre.

Le phénomène de transport turbulent à contre gradient est lié à l'effet du gradient de pression à travers le front de flamme turbulente [115] qui a pour effet de convecter plus rapidement les poches de gaz légers (gaz brûlés) que les poches de gaz lourds (gaz frais). Dans beaucoup de configurations pratiques, la combustion a lieu en milieu confiné, les gaz brûlés subissent donc une forte accélération qui entraîne un fort gradient de pression et peut encore augmenter l'effet du transport à contre gradient [117].

Pour prendre en compte le transport turbulent à contre gradient dans les simulations numériques, on va développer un modèle algébrique permettant de prendre en considération les effets agissant dans des directions opposées simultanément.

4.1.1 Analyse physique des phénomènes de transport gradient et contre gradient

On va se reporter à l'analyse faite par Veynante et Vervisch en 2002 [89] dans le but de dériver un modèle algébrique permettant de prédire le phénomène contre gradient dans la diffusion turbulente des flux de masse.

Cette analyse repose sur les travaux de Bray, toujours dans le contexte du modèle BML, dans le cas de l'approche de densité de surface de flamme pour la modélisation des flammes turbulentes de prémélange. Le modèle des flux turbulents est déduit du modèle pour les fluctuations de la vitesse de surface de flamme est donné par l'expression [89]:

$$\langle u_i'' \rangle_s = \langle u_i \rangle_s - \tilde{u}_i = (c^* - \tilde{c})(\bar{u}_{ip} - \bar{u}_{ir}) \quad (4.10)$$

où $\langle u_i \rangle_s$ et $\langle u_i'' \rangle_s$ sont respectivement la vitesse moyenne de surface de flamme et la moyenne des fluctuations de la vitesse de surface de flamme.

Afin d'exploiter la relation (4.10), notre analyse va porter sur les deux cas extrêmes qui peuvent se présenter :

Le premier cas considéré serait lorsque l'intensité de la turbulence est faible et par conséquent la flamme n'est contrôlée que par l'expansion thermique des gaz brûlés.

Le second cas serait, en revanche, lorsque l'intensité de turbulence est forte et la flamme n'est contrôlée que par les fluctuations de la vitesse.

- Cas d'une intensité faible de turbulence :

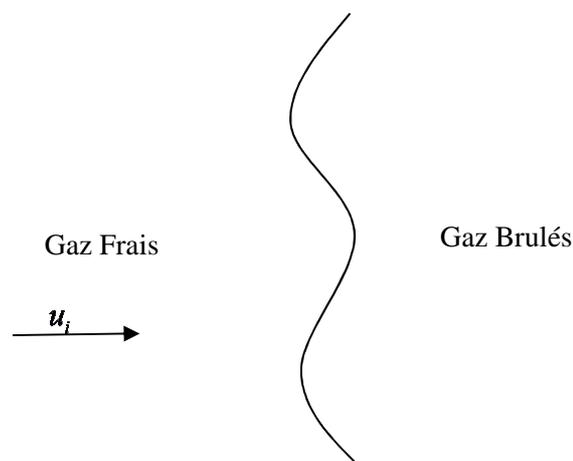


Figure 4.2 : Front de flamme turbulente pour une faible intensité de turbulence

Dans ce cas, le front de flamme est très régulier et légèrement plissé comme montré sur la figure 4.2 et le bond de la vitesse conditionnée entre les gaz brûlés et les gaz frais $(\bar{u}_p - \bar{u}_r)$ peut être alors déterminé en premier lieu par l'expansion thermique des gaz brûlés.

La valeur de $(\bar{u}_p - \bar{u}_r)$ correspond à celle obtenue dans le cas des flammes planes laminaires [89] et elle est donnée par:

$$(\bar{u}_p - \bar{u}_r) = \tau S_L \quad (4.11)$$

En reportant l'expression (4.11) dans l'équation (4.10), les fluctuations de la vitesse de surface de flamme seront exprimées par :

$$\langle u_i'' \rangle_s = (c^* - \tilde{c}) \tau S_L \quad (4.12)$$

- Cas d'une intensité forte de turbulence :

Dans ce cas la dissipation visqueuse des tourbillons dans les gaz brûlés est importante et par conséquent le mouvement du front de flamme est dominé par les propriétés de la turbulence en amont de la flamme.

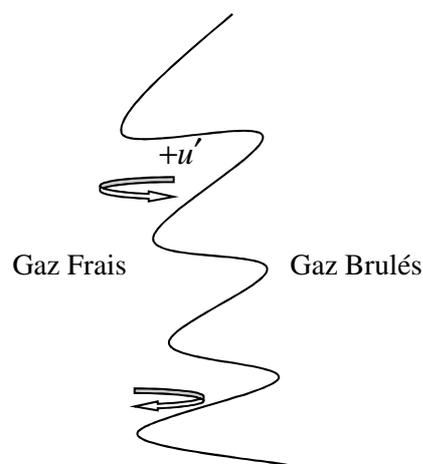


Figure 4.3 : Front de flamme turbulente pour une forte intensité de turbulence

Du coté des gaz frais ($\tilde{c} = 0$), le front de flamme est convecté vers les gaz frais avec une vitesse moyenne estimée égale à $-u'$ (u' : rms dans les gaz frais) et le bond de la vitesse conditionnée entre les gaz brûlés et les gaz frais ($\bar{u}_p - \bar{u}_r$) peut être alors donné par :

$$(\bar{u}_p - \bar{u}_r) = -u' \quad (4.13)$$

Du coté des gaz brûlés ($\tilde{c} = 1$), le front de flamme est alors convecté vers les gaz brûlés par le mouvement turbulent avec une vitesse estimée à $+u'$ et le bond de la vitesse conditionnée entre les gaz brûlés et les gaz frais ($\bar{u}_p - \bar{u}_r$) sera alors donné par :

$$(\bar{u}_p - \bar{u}_r) = +u' \quad (4.14)$$

Les expressions (4.13) et (4.14) vont nous conduire au modèle simple linéaire de la moyenne des fluctuations de la vitesse de surface de flamme $\langle u_i'' \rangle_s$:

$$\langle u_i'' \rangle_s = -2(c^* - \tilde{c})\alpha u' \quad (4.15)$$

où :

α : est une fonction d'efficacité tenant compte de l'aptitude faible des petites échelles de turbulence à plisser et convecter la flamme. Sa valeur est de l'ordre de l'unité (valeur attendue pour de larges échelles de turbulence).

2: le facteur 2 a été introduit en assumant que $c^* = 0.5$

Alors, à la base de ces deux situations extrêmes, la modélisation des fluctuations des vitesses de la surface dans n'importe quelle situation serait la somme des deux contributions. Ceci va nous conduire à l'expression suivante :

$$\langle u'' \rangle_s = (c^* - \tilde{c})(-2\alpha u' + \tau S_L) \quad (4.16)$$

L'expression du flux turbulent donnée par l'équation (4.6) s'écrit maintenant :

$$\overline{u_i''c''} = \tilde{c}(1-\tilde{c})(\tau S_L - 2\alpha u') \quad (4.17)$$

Cette expression confirme parfaitement les résultats de l'analyse asymptotique de Bray et al.[51] en 2000 pour le calcul des flux turbulents dans le cas des écoulements à point d'arrêt.

L'équation (4.17) présente les flux turbulents comme une contribution de deux flux agissant en directions opposées : une est induite par les fluctuations de vitesse et l'autre est due à l'expansion thermique des gaz.

Dans le cas où l'intensité de turbulence est élevée, la valeur de l'expression du flux turbulent donné par l'équation (4.17) est de signe négatif et par conséquent le transport du flux turbulent est de type gradient. Si l'intensité de turbulence est faible, la valeur de l'expression du flux turbulent donné par l'équation (4.17) est de signe positif et le transport du flux turbulent est dominé par l'expansion thermique ce qui correspond au cas de transport de type contre gradient.

4.1.2 Modélisation des flux turbulents de la variable d'avancement

Nous allons maintenant généraliser cette analyse monodimensionnelle pour le cas tridimensionnel [120] :

Considérons l'équation du transport de la variable d'avancement c qui est similaire à l'équation d'évolution de la fraction massique moyenne du combustible (2.24) :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{c}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} - \overline{\rho u_i'' c''} \right) + \bar{\omega} \quad (4.18)$$

On assume que le facteur α correspondant à la fonction d'efficacité comme constant et égal à l'unité c'est-à-dire : $\alpha = 1$, l'équation (4.17) s'écrit [120]:

$$\overline{u''c''} = \tilde{c}(1-\tilde{c})\tau S_L - 2u'\tilde{c}(1-\tilde{c}) \quad (4.19)$$

Le terme $-2u'\tilde{c}(1-\tilde{c})$ représente la contribution induite par les fluctuations de la vitesse et il sera modélisé par une diffusion de type gradient : $-\frac{\mu_t}{\sigma} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i}$

Le terme $\tilde{c}(1-\tilde{c})\tau S_L$ représente la contribution due à l'expansion thermique des gaz brûlés et il sera modélisé comme suit : $\tau S_L \langle \overrightarrow{n_f} \cdot \overrightarrow{x_i} \rangle \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i}$

où :

$\overrightarrow{n_f}$ représente le vecteur unitaire normal à la surface de la flammelette dirigé des gaz frais vers les gaz brûlés comme montré sur la figure 4.4 :

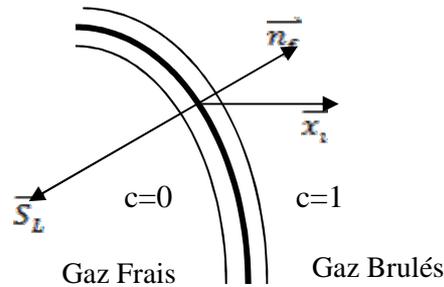


Figure 4.4 : Définition des vecteurs unitaires

et

$\langle \overrightarrow{n_f} \cdot \overrightarrow{x_i} \rangle$ représente le cosinus de l'angle entre les vecteurs unitaires $\overrightarrow{n_f}$ et $\overrightarrow{x_i}$.

Le vecteur unitaire normal à la surface de la flammelette $\overrightarrow{n_f}$ sera porté par le vecteur gradient de la variable d'avancement et il est exprimé comme [120]:

$$\overrightarrow{n_f} = \frac{\overline{\nabla c}}{\|\overline{\nabla c}\|} \quad (4.20)$$

L'équation du transport de la variable d'avancement (4.18) va s'écrire maintenant comme suit [120] :

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{c}}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u_i \tilde{c}}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \left(\frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_t}{\sigma} \right) \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} - \overline{\rho} \tau S_L \langle \overrightarrow{n_f} \cdot \overrightarrow{x_i} \rangle \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \right) + \overline{\omega} \quad (4.21)$$

Similairement, si on l'on considère l'évolution de la fraction massique du combustible, l'équation (4.21) devient : [120]

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \left(\frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_r}{\sigma} \right) \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_i} - \bar{\rho} \tau S_L \langle \overrightarrow{n_f} \cdot \overrightarrow{x_i} \rangle \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_i} \right) + \bar{\omega} \quad (4.22)$$

4.2 Modélisation du terme d'interaction fluctuations de vitesse-gradient de pression moyenne

Les calculs de Libby et Bray [100] pour la flamme plane normale montrent clairement que pour une combustion isenthalpique avec un taux d'expansion thermique de l'ordre de 6, le phénomène du transport gradient apparait et il s'accompagne en plus de la production de turbulence par la flamme. En effet, l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente contient le terme d'interaction fluctuations de vitesse – gradient de pression moyenne (équation 2.31):

$$G_k = -\overline{u_i''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (4.23)$$

en utilisant l'équation d'état, on a :

$$\overline{u_i''} = \tau \frac{\rho_r}{\bar{\rho}} \overline{u_i'' c''} \quad (4.24)$$

L'équation (4.23) donne [120]:

$$-\overline{u_i''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = -\tau \frac{\rho_r}{\bar{\rho}} \overline{u_i'' c''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (4.25)$$

Dans le cas où il y a une diffusion contre gradient, le terme $-\tau \frac{\rho_r}{\bar{\rho}} \overline{u_i'' c''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}$ sera positif et par conséquent on assiste à une production de la turbulence à la traversée du front de flamme.

Ainsi, la prise en compte de la génération de turbulence par la flamme passe par le terme d'interaction fluctuations de vitesse – gradient de pression moyenne, lié à la masse volumique variable, des équations des tensions de Reynolds (équation (2.35)) :

$$G_{ij} = -\overline{u_i''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} - \overline{u_j''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} \quad (4.26)$$

Compte tenu des propriétés de la moyenne de Favre et en utilisant l'équation d'état, il vient avec le formalisme du modèle BML que :

$$\overline{u_i''} = \overline{\left(\frac{\rho u_i''}{\rho} \right)} = \frac{1}{\rho_r} \overline{\rho(1+\tau c)u_i''} = \frac{\tau}{\rho_r} \overline{\rho u_i'' c''} \quad (4.27)$$

et finalement l'équation (4.26) s'écrira [120]:

$$G_{ij} = -\frac{\tau}{\rho_r} \overline{\rho} \left(\overline{u_i'' c''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} + \overline{u_j'' c''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} \right) \quad (4.28)$$

L'équation (4.28) constitue une expression fermée lorsque les équations des flux turbulents de masse sont considérées et utilisées.

L'équation (4.28) montre que la diffusion à contre gradient est liée au gradient de la pression moyenne mais elle est aussi fortement dépendante du taux d'expansion thermique comme l'a déjà montré Masuya [118].

On peut se demander si justement des effets bidimensionnels ou tridimensionnels ne viennent pas accentuer ou diminuer le phénomène de transport à contre gradient. Masuya et Libby [118] ont étendu la théorie de la flamme plane normale à la vitesse de l'écoulement amont à la flamme plane oblique ou le front de flamme fait un angle θ avec la vitesse amont. En supposant que les lignes de courant ne sont pas défléchis à la traversée du front de flamme et qu'il n'y a pas de cisaillement dans les gaz frais, ces auteurs ont montré que la composante normale des flux turbulents de masse est identique à celle de la flamme normale c'est-à-dire qu'elle est indépendante de l'inclinaison. Par contre, la composante tangentielle est inversement proportionnelle à la tangente de l'angle θ .

Trouvé et al. [121] ont étudié la diffusion à non gradient en comparant les résultats de deux simulations 3D directes différentes. Les bases de données obtenues correspondent à une flamme de prémélange statistiquement plane placée dans un écoulement turbulent isotrope. En revanche, la première base de données par Trouvé et Poinso [62] donne une diffusion gradient à la traversée du front de

flamme tandis que la seconde base de données de Rutland et Cant [122] a montré une diffusion à contre gradient. La vitesse de la flamme laminaire étant la même dans les deux cas mais les deux simulations diffèrent par l'intensité de turbulence initiale et le taux d'expansion thermique.

La conclusion principale donnée par Trouvé et al. [121] est que la diffusion de la moyenne de la variable d'avancement \tilde{c} est influencée par l'intensité de la turbulence dans les gaz frais. Si l'intensité de turbulence est faible, c'est la dynamique propre du front de flamme, contrôlée par l'expansion thermique et responsable de la diffusion à contre gradient, qui gouverne la diffusion turbulente de \tilde{c} . En revanche, lorsque l'intensité de la turbulence est forte, la diffusion turbulente de \tilde{c} est guidée par les structures turbulentes des gaz frais dont l'effet contrebalance celui du saut de pression à la traversée du front de flamme induisant donc une diffusion gradient. A tout cela s'ajoute l'effet du taux d'expansion thermique qui, lorsqu'il augmente, contribue à la diffusion à contre gradient.

Toutefois, la diffusion turbulente de \tilde{c} ne peut être entièrement à contre gradient car dans ce cas et pour la flamme plane, la dynamique (la convection et la diffusion) dirige le front de flamme vers les gaz brûlés et la flamme ne peut pas s'entretenir. Les calculs de Libby et Bray [116] montrent que sur les bords de la flamme plane, la diffusion est de type gradient alors qu'elle est à contre gradient dans la flamme elle-même et ceci pour des taux d'expansion thermique supérieurs à 3.

4.3 Modèles de fermeture des équations de transport

Concernant les quantités transportées dans le système d'équations moyennées du bilan décrites dans le chapitre 2, il ne reste que la fermeture du terme $\overline{\rho u_i'' \xi''}$ qui apparaît dans l'équation d'évolution de la fraction de mélange moyenne (2.23). Ce terme représente le flux turbulent de la fraction de mélange et il sera modélisé en utilisant une loi gradient :

$$\overline{\rho u_i'' \xi''} = -\bar{\rho} D_T \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \quad (4.29)$$

où : D_T représente le coefficient de diffusion turbulente et qui est égal au rapport de la viscosité turbulente μ_T sur le nombre de Schmidt turbulent σ_T :

$$D_T = \frac{\mu_T}{\sigma_T} \quad (4.30)$$

et $\mu_T = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}}$ avec $C_\mu = 0.09$ et $\sigma_T = 0.7$

La connaissance de la seule valeur moyenne d'un scalaire n'est pas toujours suffisante pour représenter correctement les phénomènes associés à la turbulence. De ce fait, on introduit alors les équations de bilan pour les variances et les covariances de ces scalaires.

En adoptant l'hypothèse que le coefficient de diffusion moléculaire est constant, les équations moyennes pour ces quantités peuvent s'écrire :

- Equation d'évolution de la variance de la fraction de mélange moyenne:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \xi''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{u}_i \overline{\rho \xi''^2}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi''^2}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' \xi''^2} \right) + \\ &- 2 \overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial \xi''}{\partial x_i}} - 2 \overline{\rho u_i'' \xi''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (4.31)$$

- Equation d'évolution de la variance de la fraction massique moyenne:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho Y''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{u}_i \overline{\rho Y''^2}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Y''^2}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' Y''^2} \right) + \\ &- 2 \overline{\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_i} \frac{\partial Y''}{\partial x_i}} - 2 \overline{\rho u_i'' Y''} \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_i} + 2 \overline{Y'' \omega} \end{aligned} \quad (4.32)$$

- Equation d'évolution de la covariance :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho Y'' \xi''}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{u}_i \overline{\rho Y'' \xi''}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Y'' \xi''}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' Y'' \xi''} \right) + \\ &- 2 \overline{\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_i} \frac{\partial \xi''}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' Y''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} - \overline{\rho u_i'' \xi''} \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_i} + \overline{\xi'' \omega} \end{aligned} \quad (4.33)$$

Là encore, des termes de flux scalaires inconnus apparaissent dans les équations (4.31), (4.32) et (4.33) et qui doivent être modélisés.

4.3.1 Modélisation des flux turbulents des variances des scalaires

Par analogie avec la loi de Fick de la diffusion moléculaire, les flux turbulents des variances des scalaires seront exprimés par une loi gradient car les flux seront directement reliés aux gradients des scalaires transportés.

$$\begin{aligned}\overline{\rho u_i'' Y''^2} &= -\bar{\rho} D_T \frac{\partial \tilde{Y}''^2}{\partial x_i} \\ \overline{\rho u_i'' \xi''^2} &= -\bar{\rho} D_T \frac{\partial \tilde{\xi}''^2}{\partial x_i} \\ \overline{\rho u_i'' \xi'' Y''} &= -\bar{\rho} D_T \frac{\partial \tilde{\xi}'' Y''}{\partial x_i}\end{aligned}\quad (4.34)$$

Le coefficient de diffusion turbulente D_T est déjà donné par l'équation (4.30).

4.3.2 Modélisation des termes dus à la réaction chimique

Les paramètres de la PDF présentée au paragraphe 3.2.2.1.3 du chapitre précédent et l'expression pour le taux de production chimique (3.28) permettent de calculer les différents termes moyens faisant intervenir la réaction chimique.

Tout d'abord, nous commençons par le terme de production chimique moyen $\bar{\omega}$ intervenant dans l'équation (4.21) pour la fraction massique du combustible moyenne. Ce terme s'exprime en fonction des paramètres de la PDF comme suit :

$$\bar{\omega} = \bar{\rho} \tilde{\Omega} = \bar{\rho} \iint \Omega(\xi, Y) \tilde{P}(\xi, Y) d\xi dY = \bar{\rho} \sum_{q=1}^4 \alpha_q \Omega(\xi_q, Y_q) \quad (4.35)$$

De la même manière, le terme $\overline{Y'' \omega}$ intervenant dans l'équation d'évolution de la variance de la fraction massique moyenne du combustible (4.32) peut être exprimé par :

$$\overline{Y'' \omega} = \bar{\rho} \tilde{Y'' \omega} = \bar{\rho} \sum_{q=1}^4 \alpha_q (Y_q - \tilde{Y}) \Omega(\xi_q, Y_q) \quad (4.36)$$

En dernier lieu, le terme $\overline{\xi''\omega}$ intervenant dans l'équation d'évolution de la covariance (4.33) va s'écrire comme :

$$\overline{\xi''\omega} = \overline{\rho\xi''\Omega} = \overline{\rho} \sum_{q=1}^4 \alpha_q (\xi_q - \tilde{\xi}) \Omega(\xi_q, Y_q) \quad (4.37)$$

4.3.3 Modélisation des termes de dissipation scalaire

Les termes de dissipation scalaire de la fraction de mélange $\tilde{\epsilon}_\xi$, de la fraction massique du combustible $\tilde{\epsilon}_Y$ et de la covariance $\tilde{\epsilon}_{Y\xi}$ qui interviennent respectivement dans les équations (4.31), (4.32) et (4.33) ne peuvent pas être fermés directement par la PDF car celle-ci fournit une information définie en un point alors que les termes de dissipation qui font intervenir les gradients instantanés des variables Y et ξ nécessitent une information définie au moins en deux points [109]. Pour cette raison, un modèle algébrique est donc nécessaire pour fermer ces termes.

4.3.3.1 Modélisation de la dissipation scalaire de la fraction de mélange $\tilde{\epsilon}_\xi$

L'expression de la dissipation scalaire de la fraction de mélange intervenant dans l'équation (4.31) est donnée par :

$$\overline{\rho\tilde{\epsilon}_\xi} = \overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i} \frac{\partial \xi''}{\partial x_i}} \quad (4.38)$$

Lors de la représentation de l'évolution de la dissipation d'un scalaire passif, on utilise habituellement un modèle de relaxation linéaire. Ce modèle va relier le taux de dissipation à un temps de mélange caractéristique, lui-même relié au temps caractéristique de la turbulence :

$$\overline{\rho\tilde{\epsilon}_\xi} = \frac{\overline{\rho\xi''^2}}{\tau_\xi} = \frac{\overline{\rho\xi''^2}}{R_\xi \tau_T} \quad (4.39)$$

avec :

$$\tau_T = k/\varepsilon$$

La constante R_ξ a été déterminée dans plusieurs expériences. Nous allons retenir la valeur de 1.25 donnée par Launder [123] pour cette constante.

L'expression de la dissipation scalaire de la fraction de mélange (4.39) s'écrit alors :

$$\overline{\rho \tilde{\varepsilon}_\xi} = \frac{\overline{\rho \xi^{m_2}}}{R_\xi} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} = 0.8 \overline{\rho \xi^{m_2}} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \quad (4.40)$$

La représentation donnée par l'équation (4.40) suppose une très forte similarité des spectres turbulents pour les scalaires et pour le champ de vitesse. Cette similarité n'est pas toujours vérifiée même pour un scalaire passif.

Pour un scalaire réactif, la modélisation de la dissipation est trop compliquée par le fait qu'elle est totalement pilotée par la réaction de combustion.

Des modèles de fermeture algébrique pour ces termes de dissipation, spécifiques à la combustion, seront proposés dans les paragraphes suivants.

4.3.3.2 Modélisation de la dissipation scalaire de la fraction massique du combustible $\tilde{\varepsilon}_Y$ et de la covariance $\tilde{\varepsilon}_{Y\xi}$

Les termes de la dissipation scalaire de la fraction massique du combustible $\tilde{\varepsilon}_Y$ et de la covariance $\tilde{\varepsilon}_{Y\xi}$ qui apparaissent respectivement dans les équations (4.32) et (4.33) sont donnés par :

$$\overline{\rho \tilde{\varepsilon}_Y} = \rho D \overline{\frac{\partial Y''}{\partial x_i} \frac{\partial Y''}{\partial x_i}} \quad (4.41)$$

et

$$\overline{\rho \tilde{\varepsilon}_{Y\xi}} = \rho D \overline{\frac{\partial Y''}{\partial x_i} \frac{\partial \xi''}{\partial x_i}} \quad (4.42)$$

Il est à rappeler que dans le cas d'un prémélange parfait et du régime des flammellettes, la dissipation scalaire de la fraction massique du combustible est directement reliée au taux de production chimique moyen par la relation (3.19).

Dans le cas où l'on s'écarte du régime des flammes plissées et où le mélange n'est que partiel, la relation (3.19) ne peut représenter qu'un cas limite de la combustion prémélangée. Pour cette raison, nous allons utiliser un modèle de

dissipation applicable à tous les régimes de combustion déjà implanté dans le code Saturne par Robin et al. [109]. Ce modèle doit permettre de retrouver les deux limites des flammes plissées et des flammes épaissies d'une part et il doit être étendu pour prendre en compte les prémélanges partiels. Ce modèle consiste à dériver une équation de transport pour la dissipation scalaire de la fraction massique du combustible $\tilde{\varepsilon}_Y$ puis la fermer [95, 96]. La fermeture d'une telle équation dans toute sa généralité pose encore des problèmes et pour des raisons de simplicité du modèle, une fermeture algébrique proposée par Mura et al. [124] a permis de retrouver les comportements limites tels qu'ils peuvent à priori être obtenus à partir de la résolution de l'équation de transport de la dissipation $\tilde{\varepsilon}_Y$.

L'analyse qu'on va décrire dans les paragraphes suivants sera celle de Mura et al. [124] qui a été validé par Robin et al. [125] dans le cadre de la simulation des flammes turbulentes stratifiées.

4.3.3.2.1 Prémélange Parfait

Dans ce cas, la dissipation scalaire est pilotée par le mélange turbulent. Le modèle de dissipation proposé pour les mélanges parfaits [124] tient compte des deux régimes limites des flammes plissées et des flammes épaissies. Dans la limite des flammes plissées, Mura et al. [124] ont montré que :

$$\bar{\rho}\varepsilon_Y = -2\bar{\rho}D \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_i} - \bar{\omega} (Y_{\max} - 2\tilde{Y} + Y_{\min}) + 2\overline{\omega Y''} \quad (4.43)$$

La démonstration analytique de l'équation (4.43) concernant la dissipation en régime de flammes plissées peut être retrouvée aussi dans l'annexe A de la thèse de doctorat de Robin [109].

Pour un nombre de Reynolds élevé, les termes de gradients moyens peuvent être négligés et l'équation (4.41) va s'écrire :

$$\bar{\rho}\varepsilon_Y = -\bar{\omega} (Y_{\max} - 2\tilde{Y} + Y_{\min}) + 2\overline{\omega Y''} \quad (4.44)$$

Dans le cas limite des flammes épaissies, un modèle de relaxation linéaire est utilisé:

$$\bar{\rho}\varepsilon_Y = \frac{\overline{\rho Y'^{n2}}}{\tau_Y} = \frac{\overline{\rho Y'^{n2}}}{R_Y \tau_T} \quad (4.45)$$

où R_Y est le rapport des échelles de temps scalaire et turbulent. Sa valeur est similaire à celle de R_ξ .

Sous l'hypothèse que le passage d'une limite à l'autre dépend d'un facteur de ségrégation S_Y définissant l'état des fluctuations de la fraction massique du combustible Y :

$$\bar{\rho}\varepsilon_Y = S_Y \left(-\bar{\omega} (Y_{\max} - 2\tilde{Y} + Y_{\min}) + 2\overline{\omega Y'^n} \right) + (1 - S_Y) \left(\frac{\overline{\rho Y'^{n2}}}{R_Y \tau_T} \right) \quad (4.46)$$

Ce facteur de ségrégation est normalisé entre 0 et 1 et va s'exprimer par :

$$S_Y = \frac{\overline{Y'^{n2}}}{(Y_{\max} - \tilde{Y})(\tilde{Y} - Y_{\min})} \quad (4.47)$$

Quand $S_Y \rightarrow 0$, on retrouve la fermeture (4.45) pour la dissipation où on atteint le régime des flammes épaissies.

Lorsque $S_Y \rightarrow 1$, on est en régime des flammes plissées et on retrouve la fermeture (4.44) pour la dissipation.

4.3.3.2.2 Prémélange Partiel

Dans le cas où le prémélange est partiel, l'état de l'écoulement réactif dépend des deux variables : la fraction massique du combustible Y et la fraction de mélange ξ . La dissipation scalaire de la fraction de mélange est modélisable par l'équation (4.39).

Les termes de la dissipation scalaire de la fraction massique du combustible $\tilde{\varepsilon}_Y$ et de la covariance $\tilde{\varepsilon}_{Y\xi}$ peuvent être modélisés par le modèle de relaxation linéaire dans le cas du régime de flammes épaissies. Pour ces deux dissipations, on peut écrire :

$$\begin{aligned}\bar{\rho}\varepsilon_Y &= \frac{\overline{\rho Y'^2}}{\tau_Y} = \frac{\overline{\rho Y'^2}}{R_Y \tau_t} \\ \bar{\rho}\varepsilon_{Y\xi} &= \frac{\overline{\rho Y'' \xi''}}{\tau_{Y\xi}} = \frac{\overline{\rho Y'' \xi''}}{R_{Y\xi} \tau_T}\end{aligned}\quad (4.48)$$

En revanche, il reste à établir des expressions pour les deux dissipations $\bar{\rho}\varepsilon_Y$ et $\bar{\rho}\varepsilon_{Y\xi}$ dans le cas du régime des flammes. Pour les obtenir, Mura et al. [124] ont conduit une analyse analogue à celle qui a mené à l'équation (4.44). La bimodalité de la PDF est supposée exister quelle que soit la richesse du mélange avec Y_{\max} et Y_{\min} fonctions de la fraction de mélange données par les équations (3.31) et (3.32).

Mura et al.[123] ont démontré que :

$$\begin{aligned}2\rho D \frac{\partial(Y_{\max} - Y)}{\partial x_i} \frac{\partial(Y - Y_{\min})}{\partial x_i} &= \omega(Y_{\max} - 2Y + Y_{\min}) + \\ &+ \frac{(Y_{\max} - Y)}{1 - \xi_{st}} \left(2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) \delta(\xi - \xi_{st})\end{aligned}\quad (4.49)$$

La démonstration de l'équation (4.49) peut être retrouvée aussi dans l'annexe A de la thèse de doctorat de Robin [109].

En remplaçant Y_{\max} et Y_{\min} par leurs expressions données par les équations (3.31) et (3.32), on obtient :

$$\begin{aligned}2A(\xi) \rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} + 2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial Y}{\partial x_i} + 2A(\xi) \rho D \frac{\partial Y}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} + 2\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_i} \frac{\partial Y}{\partial x_i} \\ = \omega(Y_{\max} - 2Y + Y_{\min}) + \frac{(\xi - Y)}{1 - \xi_{st}} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) \delta(\xi - \xi_{st})\end{aligned}\quad (4.50)$$

Le terme $\frac{(\xi - Y)}{1 - \xi_{st}} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right) \delta(\xi - \xi_{st})$ fait intervenir la dissipation du scalaire

passif conditionnée à la stœchiométrie et il peut être négligé dans le cas des flammes de prémélange.

Les fluctuations de A autour de la stœchiométrie sont aussi négligées :
 $A'' = 0$ et $A = \tilde{A}$

Comme le coefficient directeur moyen \tilde{A} est considéré constant, on peut écrire :

$$\begin{aligned}\tilde{Y}_{\min} &= \tilde{A}(\tilde{\xi} - \xi_{st}) \\ Y''_{\min} &= \tilde{A}\xi''\end{aligned}\quad (4.51)$$

En moyennant l'équation (4.50) en tenant compte des hypothèses précédentes et en ne considérant pas les termes conditionnés à la stœchiométrie, on obtient :

$$-(1 + \tilde{A})\bar{\rho}\varepsilon_{Y\xi} + \tilde{A}\bar{\rho}\varepsilon_{\xi} + \bar{\rho}\varepsilon_Y = -\bar{\omega}(\tilde{Y}_{\max} - 2\tilde{Y} + \tilde{Y}_{\min}) - (1 + \tilde{A})\overline{\omega\xi''} + 2\overline{\omega Y''} \quad (4.52)$$

L'équation (4.52) fournit une relation entre les trois dissipations moyennes $\bar{\rho}\varepsilon_{\xi}$, $\bar{\rho}\varepsilon_Y$ et $\bar{\rho}\varepsilon_{Y\xi}$ en régime des flammelettes. La dissipation du scalaire passif est fermée mais les deux autres dissipations $\bar{\rho}\varepsilon_Y$ et $\bar{\rho}\varepsilon_{Y\xi}$ restent toujours inconnues.

Afin d'avoir une idée sur les expressions des dissipations $\bar{\rho}\varepsilon_Y$ et $\bar{\rho}\varepsilon_{Y\xi}$ à la limite du régime des flammes plissées, Mura et al. [124] ont établi les expressions des seconds moments pour exprimer les valeurs de la variance et de la covariance à la limite de ce régime.

Dans le cas d'un prémélange parfait, $\xi = Cte$ et $\xi'' = 0$, l'équation (4.52) dégénère bien vers l'équation (4.44).

4.3.3.2.2.1 Expressions des seconds moments dans le régime des flammes plissées

Dans le cas d'un prémélange partiel, les fluctuations de la fraction massique du combustible Y sont dues à la fois à la réaction chimique et au mélange turbulent. Dans le mélange frais, ces fluctuations sont directement reliées aux fluctuations de la fraction de mélange ξ : $\widetilde{Y''^2} = \widetilde{Y''\xi''} = \widetilde{\xi''^2}$.

A la limite où le régime des flammes minces, Mura et al. [124] ont démontré que les valeurs de la variance $\widetilde{Y''^2}$ et de la covariance $\widetilde{Y''\xi''}$ s'expriment par :

$$\begin{aligned}\widetilde{Y}''^2 &= (\widetilde{Y}_{\max} - \widetilde{Y})(\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{\min}) + (\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A}^2)\widetilde{\xi}''^2 \\ \widetilde{Y}''\widetilde{\xi}'' &= (\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A}^2)\widetilde{\xi}''^2\end{aligned}\quad (4.53)$$

avec

$$\lambda = \frac{\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{\min}}{\widetilde{Y}_{\max} - \widetilde{Y}_{\min}} \text{ et } 1 - \lambda = \frac{\widetilde{Y}_{\max} - \widetilde{Y}}{\widetilde{Y}_{\max} - \widetilde{Y}_{\min}} \quad (4.54)$$

En examinant l'expression de la variance \widetilde{Y}''^2 dans l'équation (4.53), le terme $(\widetilde{Y}_{\max} - \widetilde{Y})(\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{\min})$ représente la part de la variance due à la réaction chimique tandis que le terme $(\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A}^2)\widetilde{\xi}''^2$ représente la part due au mélange turbulent.

Dans le cas d'un prémélange parfait, on retrouve bel et bien la relation habituelle : $\widetilde{Y}''^2 = (\widetilde{Y}_{\max} - \widetilde{Y})(\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_{\min})$.

Par analogie avec les valeurs limites des variances et covariances quand le régime de flammlettes est atteint, Mura et al. [124] ont exprimé les dissipations $\overline{\rho\varepsilon_Y}$ et $\overline{\rho\varepsilon_{Y\xi}}$ de telle façon à ce que les relations proposées soient en accord avec l'équation (4.52) :

$$\overline{\rho\varepsilon_Y} = \left(-\overline{\omega}(Y_{\max} - 2\widetilde{Y} + Y_{\min}) + 2\overline{\omega Y''}\right) + 2\overline{\omega Y''} + (\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A}^2)\overline{\rho\varepsilon_{\xi}} \quad (4.55)$$

$$\overline{\rho\varepsilon_{Y\xi}} = \overline{\omega\xi''} + (\lambda + (1-\lambda)\widetilde{A})\overline{\rho\varepsilon_{\xi}} \quad (4.56)$$

Les relations (4.55) et (4.56) vérifient bien l'équation (4.52) mais Robin et al. [109] ont obtenu des expressions exactes de $\overline{\rho\varepsilon_Y}$ et $\overline{\rho\varepsilon_{Y\xi}}$ en dérivant des équations de transport pour les valeurs limites de la variance et de la covariance données par l'équation (4.53). Les relations ainsi obtenues sont fermées et très complexes. (Toute la démonstration se trouve dans l'annexe A de la thèse de Robin Vincent [109]).

Dans le cas d'un écoulement à grand nombre de Reynolds et en négligeant les termes d'ordre élevé, Mura et al. [124] ont obtenu :

$$\begin{aligned}
\bar{\rho}\varepsilon_Y &= -\bar{\omega}\left(\tilde{Y}_{\max} - 2\tilde{Y} + \tilde{Y}_{\min}\right) + 2\overline{\omega Y''} - \frac{(1+\tilde{A})(1-\tilde{A})}{\tilde{Y}_{\max} - \tilde{Y}_{\min}} \tilde{\xi}''^2 \bar{\omega} \\
&+ (1+\tilde{A})(\lambda + (1-\lambda)\tilde{A}) \left(\bar{\rho}\varepsilon_\xi + 2\overline{\rho u_i'' \xi''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \right) + \\
(1+\tilde{A}) &\left(-\overline{\rho u_i'' Y''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} - \overline{\rho u_i'' \xi''} \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_i} \right) + \tilde{A} \bar{\rho}\varepsilon_\xi
\end{aligned} \tag{4.57}$$

$$\begin{aligned}
\bar{\rho}\varepsilon_{Y\xi} &= \overline{\omega \xi''} + (\lambda + (1-\lambda)\tilde{A}) \left(\bar{\rho}\varepsilon_\xi + 2\overline{\rho u_i'' \xi''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} \right) \\
&- \frac{(1-\tilde{A})}{\tilde{Y}_{\max} - \tilde{Y}_{\min}} \tilde{\xi}''^2 \bar{\omega} - \overline{\rho u_i'' Y''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_i} - \overline{\rho u_i'' \xi''} \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_i}
\end{aligned} \tag{4.58}$$

Maintenant, on va introduire un facteur de ségrégation S_Y qui va nous permettre de passer de la limite des flammes plissées à celle des flammes épaissies :

$$\begin{aligned}
\bar{\rho}\varepsilon_Y &= S_Y \left([\bar{\rho}\varepsilon_Y]_f \right) + (1-S_Y) \left(\frac{\overline{\rho Y''^2}}{R_Y \tau_t} \right) \\
\bar{\rho}\varepsilon_{Y\xi} &= S_Y \left([\bar{\rho}\varepsilon_{Y\xi}]_f \right) + (1-S_Y) \left(\frac{\overline{\rho Y'' \xi''}}{R_{Y\xi} \tau_T} \right)
\end{aligned} \tag{4.59}$$

où $[\bar{\rho}\varepsilon_Y]_f$ et $[\bar{\rho}\varepsilon_{Y\xi}]_f$ sont les taux de dissipation scalaire, à la limite des flammes infiniment minces, fournis par les équations (4.57) et (4.58).

La proposition donnée par la relation (4.59) a été employée pour simuler les flammes en V stratifiées turbulentes étudiées expérimentalement au CORIA [125].

4.3.3.2.2 Facteur de ségrégation S_Y

Le facteur de ségrégation donné par l'équation (4.47) utilisé dans le cas d'un prémélange parfait n'est plus valide dans le cas d'un prémélange partiel. En effet, dans ce dernier cas et lorsque le régime de flammes épaissies est atteint, la variance du scalaire réactif n'est pas nulle ; elle est contrôlée par le mélange

turbulent et par conséquent elle est exprimée en fonction de la variance du scalaire passif par :

$$\overline{\rho Y''^2} = \left(\frac{\tilde{Y} - \tilde{Y}_{\min}}{\tilde{Y}_{\max} - \tilde{Y}_{\min}} + \frac{\tilde{Y}_{\max} - \tilde{Y}}{\tilde{Y}_{\max} - \tilde{Y}_{\min}} \tilde{A}^2 \right) \overline{\rho \xi''^2} \quad (4.60)$$

Le facteur de ségrégation est exprimé comme suit :

$$S_Y = \frac{\overline{\rho Y''^2} - \left(\overline{\rho Y''^2} \right)_{\min}}{\left(\overline{\rho Y''^2} \right)_{\max} - \left(\overline{\rho Y''^2} \right)_{\min}} \quad (4.61)$$

où $\left(\overline{\rho Y''^2} \right)_{\min}$ représente la variance minimale possible c'est à dire celle qui est atteinte à la limite du régime des flammes épaissies et elle est exprimée par l'équation (4.60).

$\left(\overline{\rho Y''^2} \right)_{\max}$ représente la variance maximale possible donnée par l'équation (4.53); celle atteinte en régime de flammes infiniment minces.

Finalement, le facteur de ségrégation va s'exprimer par :

$$S_Y = \frac{\overline{Y''^2} - \left(\left(\tilde{Y} - \tilde{Y}_{\min} \right) / \left(\tilde{Y}_{\max} - \tilde{Y}_{\min} \right) + \left(\tilde{Y}_{\max} - \tilde{Y} \right) / \left(\tilde{Y}_{\max} - \tilde{Y}_{\min} \right) \tilde{A}^2 \right) \overline{\xi''^2}}{\left(\tilde{Y}_{\max} - \tilde{Y} \right) \left(\tilde{Y} - \tilde{Y}_{\min} \right)} \quad (4.62)$$

Il est tout à fait clair que dans le cas d'un prémélange parfait, l'équation (4.62) dégénère correctement vers l'équation (4.47).

4.4 Conclusion

Ce chapitre a été consacré au problème très important rencontré en combustion turbulente prémélangée : la modélisation des flux turbulents de masse.

L'hypothèse gradient employée pour la diffusion turbulente de la variable d'avancement moyenne est mise en défaut dans le cas des flammes prémélangées. Un modèle algébrique de fermeture des flux turbulents a été présenté tenant compte de la contribution de la diffusion à contre gradient qui s'accompagne d'une

production de turbulence par la flamme. Ce modèle a été implémenté dans le modèle LW-p pour tenir en compte de la combustion en prémélange partiel.

CHAPITRE V

RESULTATS DES SIMULATIONS NUMERIQUES ET COMPARAISON AVEC L'EXPERIENCE

5.0 Introduction

Le modèle décrit dans le chapitre IV sera implanté dans le code Saturne [126]. Le Code Saturne est un logiciel de résolution des équations de Navier Stokes pour les écoulements de fluide incompressible c'est-à-dire à faible nombre de Mach basé sur une approche de discrétisation de type volume fini. Il permet l'utilisation d'une large gamme de maillage (avec n'importe quel type de maille). Dans notre travail, le maillage du domaine a été réalisé à l'aide du logiciel libre sur internet Gmsh. L'avantage de ce logiciel réside dans le fait qu'il dispose d'une capacité à prendre en compte des équations paramétriques simples dans son pré-traitement et d'un système de visualisation efficace dans son mécanisme post-traitement.

Le Code Saturne est parallélisé et peut être exécuté sur des architectures à mémoire distribuée. La parallélisation consiste à diviser le domaine de calcul en sous domaines et chaque CPU exécute le code sur un sous domaine.

Le code Saturne ainsi que sa documentation spécifique sont téléchargeables sur Internet : <http://rd.edf.com/72494i/Accueil-fr/Recherche-et-Developpement/Pour-la-communaute-Scientifique/Telechargements/Code-Saturne.html>

La géométrie réelle du domaine est projetée dans un référentiel de coordonnées cylindriques (o, r, θ, Z) . Du fait que notre écoulement est à symétrie axiale (écoulement axisymétrique), nous allons traiter le problème à deux dimensions r et Z .

Dans toutes les simulations qui vont suivre, l'axe des abscisses désignera la direction radiale r et l'axe des ordonnées va désigner la direction axiale de l'écoulement Z .

Afin de valider notre nouveau modèle implémenté dans le modèle LW-P, nous avons choisi deux cas limites de flammes turbulentes de prémélange stabilisées dans un écoulement à point d'arrêt : une flamme adjacente à la paroi [42, 43, 53, 55] et une flamme stabilisée loin de la paroi [36, 37, 54].

Pour les deux cas, on calcule en premier lieu l'écoulement non réactif c'est-à-dire l'écoulement isotherme pour tester le modèle de turbulence et les conditions aux limites.

Ensuite, pour enflammer le mélange, on applique une source de chaleur dans une cellule de l'axe de l'écoulement pour 50 itérations puis on laisse la flamme se stabiliser numériquement.

5.1 Flamme adjacente à la paroi

On se réfère aux conditions correspondantes à l'expérience de Escudié et Haddar [42, 43].

Les conditions d'expérimentation consistent à un écoulement de gaz frais à une richesse égale à 0.9 sortant d'un injecteur de diamètre 66 mm impactant une paroi solide de diamètre 400 mm située à une distance H égale au diamètre de l'injecteur.

Le domaine de calcul à été élargi dans notre cas à 10 fois le diamètre du brûleur. Pour la raison de symétrie, le domaine de calcul est pris égal à la moitié du domaine physique comme montré sur la figure 5.1. Le maillage est raffiné sur l'axe et à la sortie de l'injecteur. La première étape dans un calcul CFD est de réaliser un maillage permettant d'avoir une solution indépendante du nombre de cellules.

Dans ce premier cas, la plus petite cellule est de 0.5×0.1 (mm x mm) avec un nombre total de cellules égal à 27575. A partir de ce nombre de cellules, la solution a été devenue indépendante du maillage.

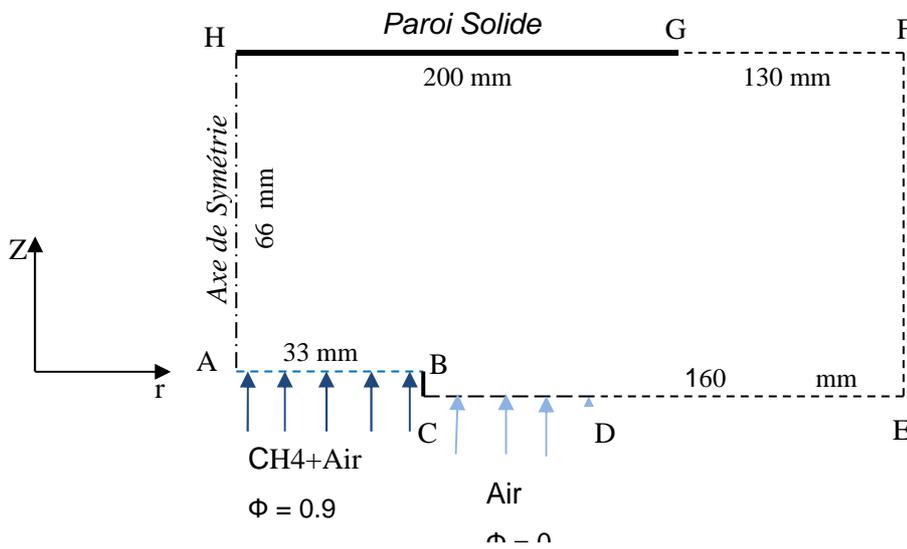


Figure 5.1: Domaine de calcul

5.1.1 Conditions de calcul

5.1.1.1 Conditions initiales

L'initialisation du calcul ($t=0$) est réalisée en imposant dans les gaz frais ce qui suit:

La pression en tout point du domaine est la pression atmosphérique prise égale à 1.013 bars.

La température en tout point du domaine est prise égale à 300 K.

Les propriétés physiques du mélange Méthane-Air à la richesse de 0.9 sont déduites par une interpolation linéaire entre les valeurs extraites des annexes de la thèse de Lachaux [127] :

Φ	$C_p \left(\frac{J}{KgK} \right)$	$\nu \left(\frac{m^2}{s} \right)$	$\rho \left(\frac{Kg}{m^3} \right)$
1	1070.62	0.0000161	1.126
0.8	1057.77	0.000016	1.135

où :

Φ : est la richesse du mélange

C_p : est la chaleur massique à pression constante

ν : est la viscosité cinématique

ρ : est la masse volumique

Après interpolation linéaire, on obtient pour $\Phi=0.9$:

$$C_p = 1064.195 \text{ J / KgK}, \nu = 0.00001605 \text{ m}^2 / \text{s}, \rho = 1.1305 \text{ Kg / m}^3 \text{ et } \mu = \rho \nu = 0.00001814 \text{ Kg / ms}$$

Dans toutes les cellules du domaine, la fraction massique moyenne du combustible est prise égale à celle de la fraction de mélange :

$$\tilde{Y} = \tilde{\xi}$$

Leurs variances ainsi que leur covariance sont nulles.

$$\widetilde{Y''^2} = \widetilde{\xi''^2} = \widetilde{Y''\xi''} = 0$$

5.1.1.2 Conditions aux limites

Les conditions aux limites pour chaque frontière du domaine de calcul sont comme suit :

A la sortie du brûleur représentée par la frontière AB, la vitesse de sortie W , l'énergie cinétique de turbulence et l'échelle intégrale de turbulence L_T sont fixées respectivement à 4 m/s, 0.135 m²/s², 1 mm [53, 55]. Le taux de dissipation est

déduit de la relation : $\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{L_t}$ avec $C_\mu = 0.09$. Sa valeur sera alors de :

$$8.150468 \text{ m}^2 / \text{s}^3.$$

Du fait que la turbulence est une turbulence de grilles, des profils plats sont pris pour la vitesse, l'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente.

La température d'entrée du mélange réactif est égale à 300 K.

Dans le cas d'un mélange méthane-air, la fraction massique du combustible est donnée par la relation [8] : $Y = \frac{\Phi}{\Phi + 17.6}$. A la stœchiométrie, la fraction massique du combustible est notée FS(1) dans le code et sa valeur est de 0.05506. Pour notre mélange qui est à une richesse de 0.9, la fraction massique du combustible notée FMENT dans le code sera de 0.049833887. $FMENT = 0.049833887 = 0.905 * FS(1)$.

La frontière CD matérialise une entrée de dilution qui correspond au phénomène de l'entraînement de l'air ambiant par l'écoulement principal issu du brûleur.

Pour créer cette entrée, on a réalisé un calcul inerte dans un domaine de calcul où le segment BC qui représente la surface extérieure du brûleur est égal à la distance de l'injecteur à la paroi solide. Dans ce calcul, les segments CD et DE constituent une sortie libre. En plaçant des capteurs à 5 mm en dessous du plan de sortie de l'injecteur, on a relevé les valeurs de tous les scalaires de toutes les

cellules de cette surface. Les valeurs ainsi relevées seront interpolées par des polynômes fonctions de la position radiale r .

Avec une interpolation polynomiale sous MATLAB, on obtient pour les composantes radiale et axiale de la vitesse, l'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence les polynômes suivants :

$$U(r) = 610r^4 - 340r^3 + 62r^2 - 5r + 0.068$$

$$W(r) = 1400r^4 - 98r^3 + 230r^2 - 19r + .63$$

$$k(r) = 6.7r^3 - 3.1r^2 + 0.52r + 0.015$$

$$\varepsilon(r) = 29r^3 - 6.3r^2 + 44r + 0.052$$

La validation des conditions imposées sur l'entrée matérialisant la dilution est obtenue en comparant tous les résultats obtenus par les conditions imposées sur l'entrée CD avec le cas réel c'est-à-dire sans dilution. Par exemple, la figure 5.2 montre une comparaison des champs des vitesses confirmant la validité de cette entrée de dilution.

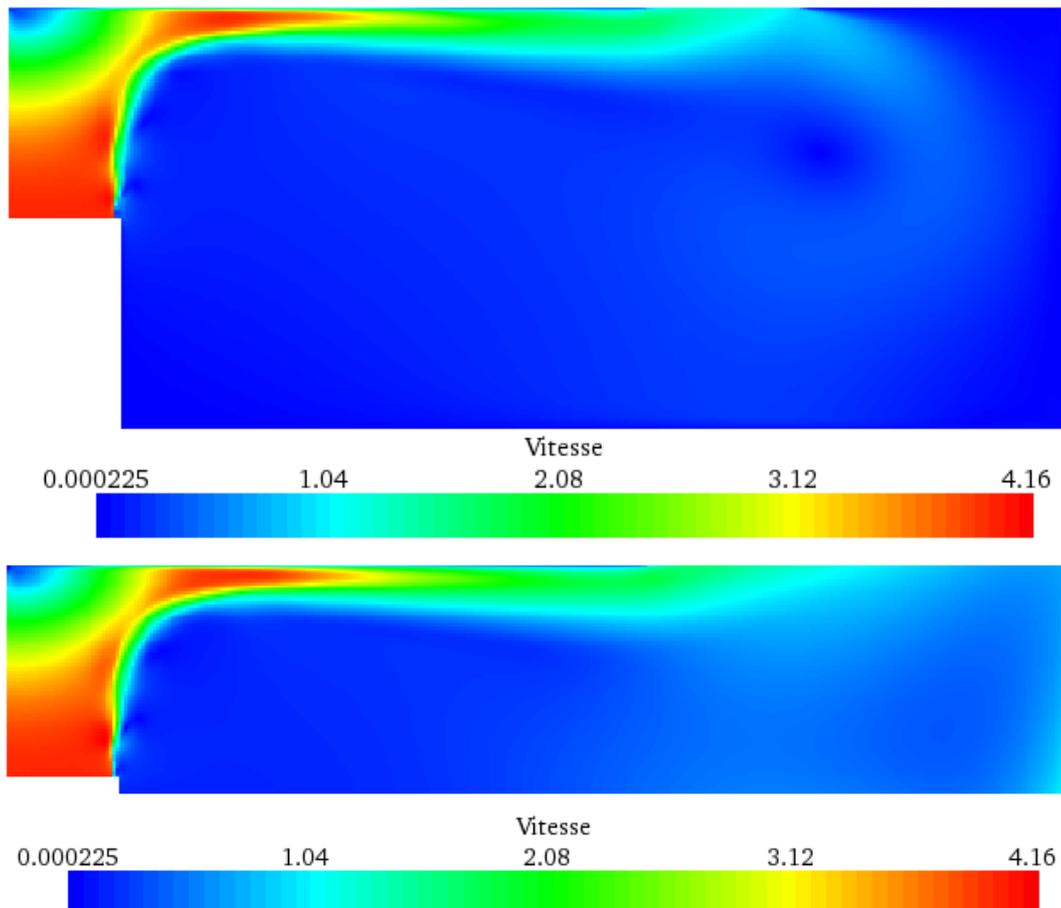


Figure 5.2: Comparaison des champs des vitesses entre le cas réel et le cas d'une entrée de dilution

Sur cette frontière, la température des gaz frais est de 300 K et la fraction massique du combustible est nulle.

Les frontières HG et BC représentent des parois solides où seront appliquées les lois de paroi et tous les flux des scalaires seront nuls.

Concernant les frontières libres DE, EF et FG, toutes les dérivées par rapport à la composante radiale sont nulles pour toutes les variables.

L'axe du jet HA, est un axe de symétrie et par conséquent cette symétrie impose que la composante radiale de la vitesse est nulle et toutes les dérivées par rapport à la composante radiale sont nulles pour toutes les variables.

5.1.2 Simulation de l'écoulement non réactif

Cette simulation est faite pour vérifier les conditions aux limites et la turbulence dans le domaine. La seule donnée expérimentale dont nous disposons est la valeur de la vitesse axiale le long de l'axe de l'injecteur comme illustré sur la figure 5.3.

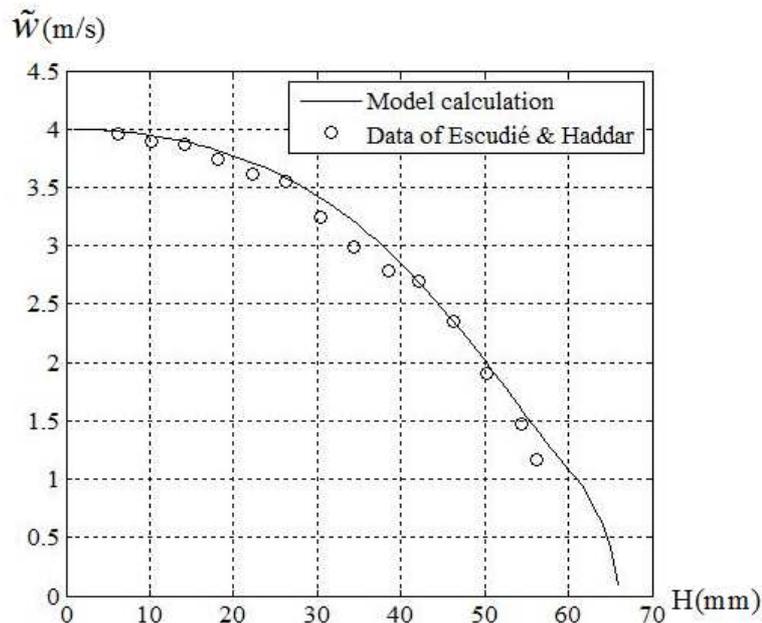


Figure 5.3 : Comparaison du profil de la vitesse axiale moyennesur l'axe de l'injecteur avec les résultats expérimentaux d'Escudié et Haddar [42, 43]

La figure 5.3 montre clairement que les résultats numériques de notre simulation concordent parfaitement avec les résultats expérimentaux d'Escudié et Haddar [42, 43].

Les profils axiaux de la vitesse axiale sont montrés sur la figure 5.4 où la vitesse décroît de 4 m/s à la sortie de l'injecteur à la valeur zéro au plan d'arrêt. Ces profils sont identiques et sont indépendants de la position radiale dans le cas de l'écoulement inerte.

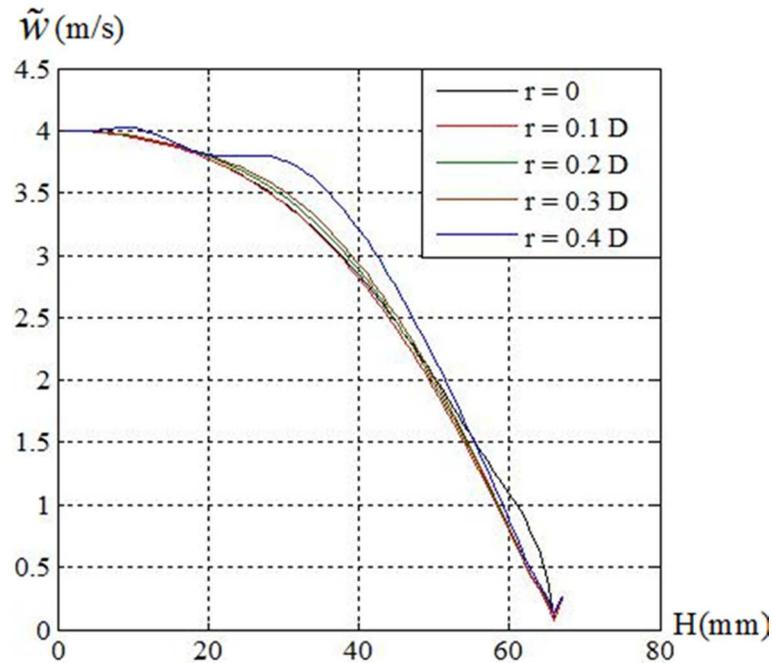


Figure 5.4 : Profils axiaux de la vitesse axiale moyenne sur différentes positions radiales

La figure 5.5 montre les profils axiaux de la vitesse radiale. Au niveau de l'axe de l'injecteur cette vitesse est nulle et elle satisfait la condition de symétrie dans nos conditions aux limites. Ces profils varient similairement avec la position radiale.

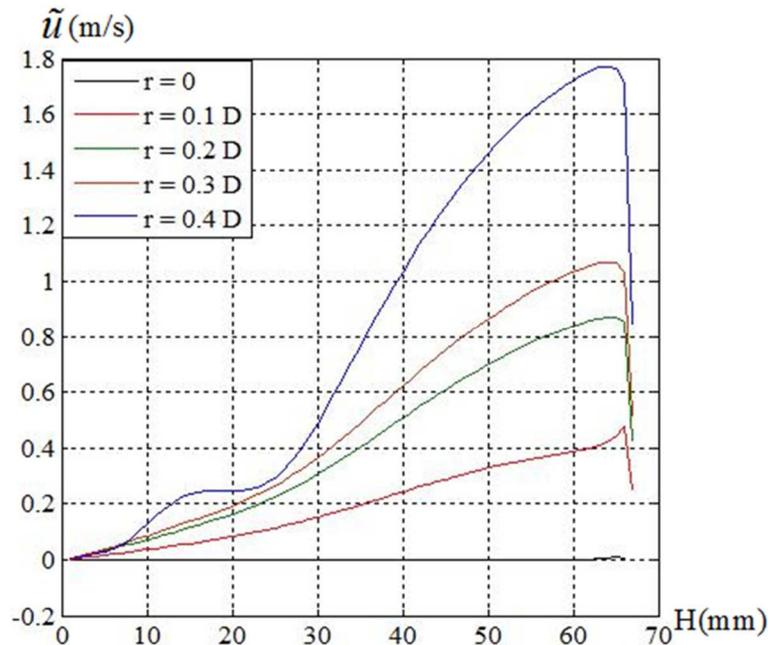


Figure 5.5 : Profils axiaux de la vitesse radiale moyenne sur différentes positions radiales

On remarque aussi sur la figure 5.5 que beaucoup plus que l'on s'éloigne de l'axe de l'injecteur, beaucoup plus que la vitesse radiale moyenne augmente sous l'effet de l'écoulement pariétal. Elle atteint la valeur de 1.76 m/s à la périphérie de l'injecteur.

5.1.3 Simulation de l'écoulement réactif

Initialement, on reprend les calculs à partir de l'écoulement inerte et on initie une flamme en imposant une très haute température dans une cellule sur l'axe de l'injecteur pour 50 itérations et on cesse cette source de chaleur.

La solution serait considérée comme convergente lorsque les résidus de toutes les variables sont inférieurs à 10^{-5} et qu'il n'y a plus de changements significatifs dans ces résidus.

Pour cette raison, plusieurs simulations ont été faites et après leurs analyses on est conduit à la même forme de la flamme ainsi qu'à sa position.

La validation de notre modèle serait en comparant nos résultats de simulation avec les résultats expérimentaux d'Escudié et Haddar [42, 43] d'un coté et avec les résultats du modèle BML avec dilution de Lahjaily et al. [5, 53, 55] d'un autre coté.

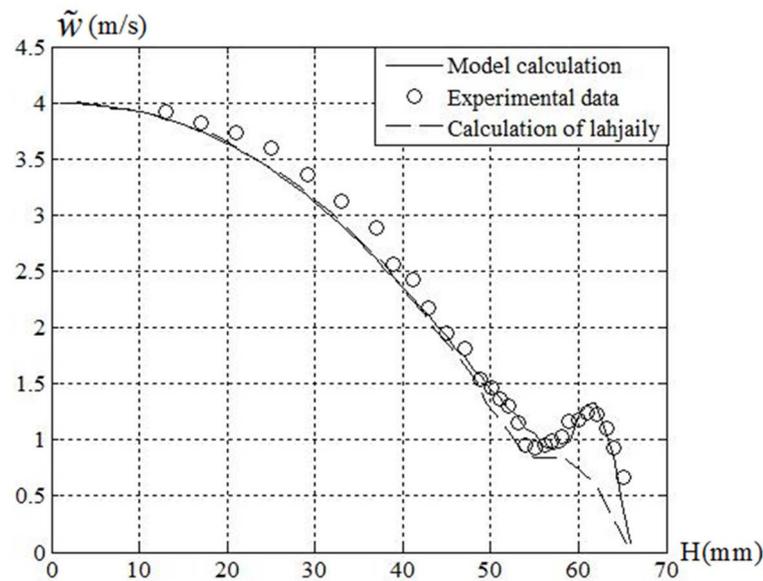


Figure 5.6 : Comparaison du profil de la vitesse axiale moyennesur l'axe de l'injecteur avec les résultats expérimentaux d'Escudié et Haddar [42, 43] et les résultats de simulation numérique du modèle de Lahjaily et al. [5, 53, 55]

La figure 5.6 montre l'évolution de la vitesse axiale moyenne le long de l'axe de l'injecteur. Il est tout à fait clair, que la prédiction par notre modèle coïncide parfaitement avec les résultats expérimentaux. D'un autre côté, le saut de la vitesse derrière la flamme est bien capturé par notre modèle tandis que dans le modèle de Lahjaily le niveau du bond de la vitesse était très faible. Ceci peut s'expliquer par le fait que la modélisation des flux turbulents dans le modèle de Lahjaily était de type gradient et par conséquent l'accroissement de la vitesse à travers la zone réactive était faible tandis que notre modèle qui tient compte de l'expansion thermique qui est responsable sur l'accroissement de la vitesse à travers la flamme a parfaitement décrit cette évolution.

La figure 5.7 montre une comparaison de la valeur de la variable d'avancement dans notre simulation avec les prédictions données par le modèle de Lahjaily [5, 55]. On remarque que notre modèle prévoit une flamme moins épaisse que celle prévue par Lahjaily d'un côté et que notre flamme est vraiment adjacente à la paroi de l'autre côté. Nos résultats concordent encore mieux avec les observations expérimentales où cette flamme était vraiment mince très étirée collée à la paroi [42, 43].

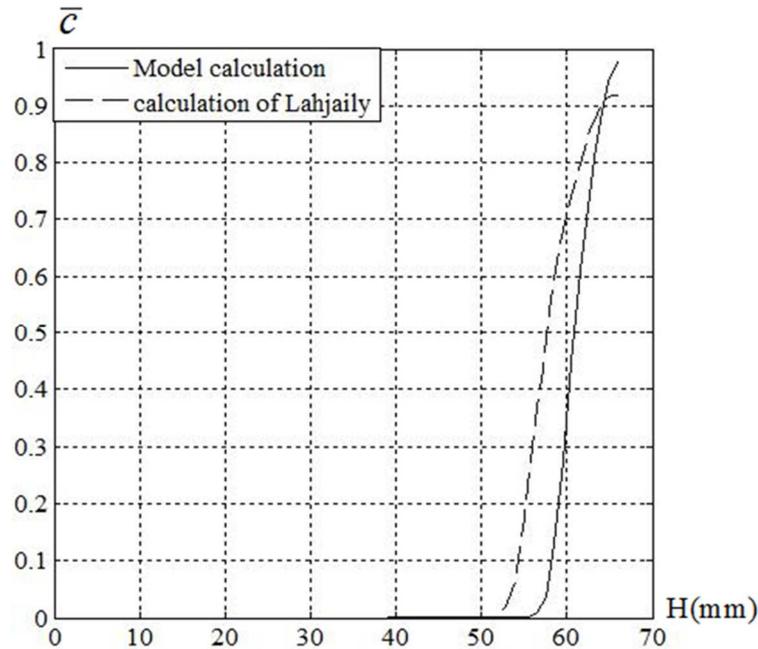


Figure 5.7 : Comparaison de la variable d'avancement moyenne sur l'axe de l'injecteur avec les résultats de Lahjaily et al.[5, 55]

La comparaison faite sur la figure 5.7 était sur la base de la moyenne de Reynolds de la variable d'avancement c . En utilisant le formalisme BML, on peut relier les moyennes de Reynolds et de Favre de la variable d'avancement par :

$$\bar{c} = \frac{(1 + \tau)\tilde{c}}{1 + \tau\tilde{c}} \text{ avec } \tau = \frac{T_b}{T_u} - 1 = \frac{\rho_u}{\rho_b} - 1$$

où :

τ : est le facteur d'expansion thermique.

T_u , ρ_u : sont respectivement la température et la masse volumique dans les gaz frais.

T_b , ρ_b : sont respectivement la température et la masse volumique dans les gaz brûlés.

La figure 5.8 montre la zone de réaction moyenne, définie par le champ du taux de production chimique moyen. La zone de réaction moyenne calculée est plane et circulaire avec un diamètre de 2 fois le diamètre de l'injecteur ; elle est détachée du bord du brûleur, en accord avec les observations expérimentales [42, 43].

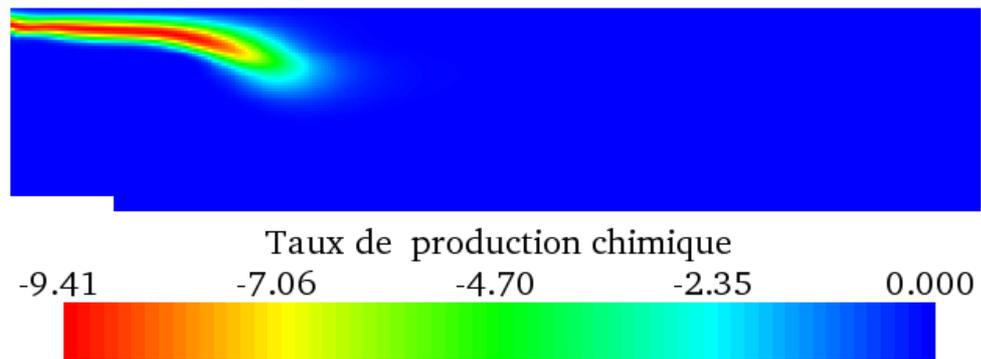


Figure 5.8 : Zone de réaction moyenne et terme du taux de production chimique

L'incurvation du bord de la zone de réaction, vers les gaz frais est également observée expérimentalement par Mounaim-Rousselle [4] dans le cas d'une flamme stabilisée dans un écoulement à jets opposés. Mounaim-Rousselle [4] constate que la flamme remonte à sa périphérie vers le brûleur supérieur. Elle attribue cet effet à deux causes ; la première est que les gaz frais issus du jet supérieur sont réchauffés par la flamme plus que les gaz frais issus du jet inférieur (convection naturelle), la deuxième raison est que l'interaction entre ces flammes et l'air ambiant est très importante.

Dans notre calcul, la gravité n'est pas prise en compte et cette incurvation du bord de la flamme vers les gaz frais peut s'expliquer par la divergence de l'écoulement due au plan d'arrêt.

En effet, dans la zone centrale, le champ de vitesses est quasiment suivant l'axe et la flamme se positionne alors normalement à celui-ci. En revanche, dans le jet pariétal, le champ de vitesse moyen étant parallèle au plan d'arrêt, les flammelettes s'incurvent de façon à ce que la vitesse de l'écoulement normale à leur surface soit égale à la vitesse fondamentale de la flamme.

La figure 5.9 montre l'évolution de la vitesse axiale moyenne pour différentes positions radiales. Ces profils sont pratiquement superposables du fait que la flamme était quasiment plane comme montrée sur la figure 5.7.

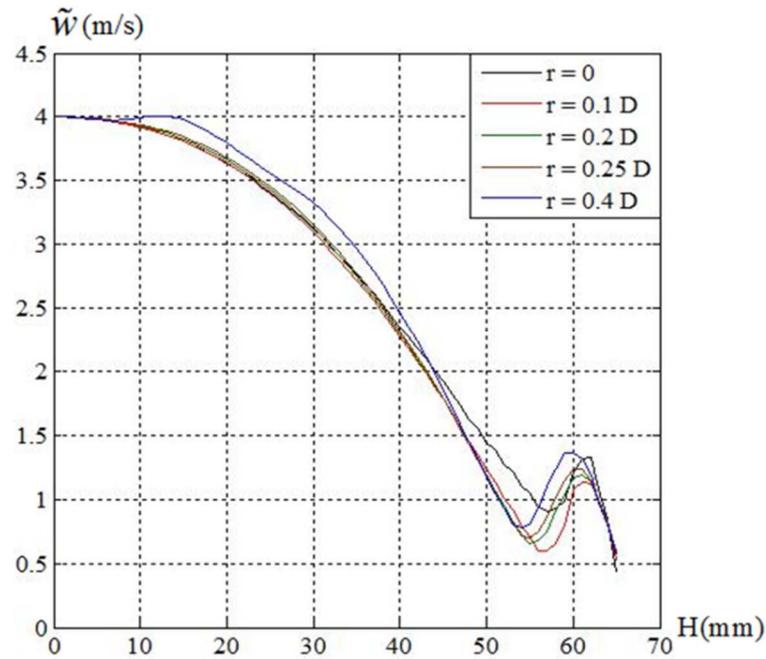


Figure 5.9 : Profils axiaux de l'évolution de la vitesse axiale moyenne

L'accroissement de la vitesse à travers la zone réactive est un peu différent d'une position radiale à une autre et cela est du bien sûr à l'écoulement pariétal au niveau du plan d'arrêt.

Au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'axe de l'injecteur, l'accroissement de la vitesse à travers la zone réactive devient plus remarquable.

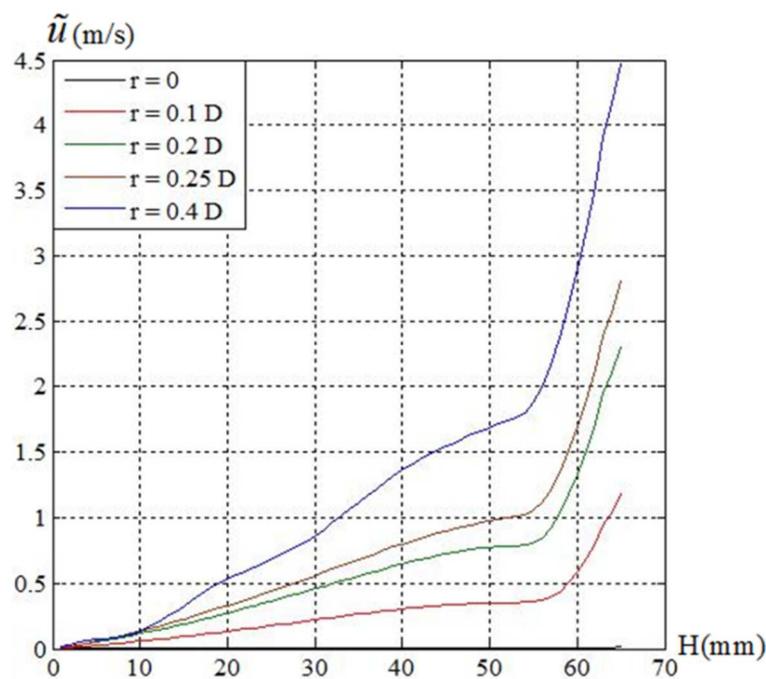


Figure 5.10 : Profils axiaux de l'évolution de la vitesse radiale moyenne

La figure 5.10 montre l'évolution de la vitesse moyenne radiale. Cette vitesse qui est nulle sur l'axe de l'injecteur augmente au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'axe de l'injecteur et atteint son maximum à sa périphérie. A une position radiale donnée, elle augmente linéairement avec une faible pente puis à la traversée de la zone réactive, elle augmente considérablement grâce à l'expansion thermique des gaz brûlés. Cette vitesse est supérieure à la vitesse axiale d'entrée des gaz frais à la périphérie du brûleur.

La figure 5.11 montre que l'énergie cinétique de turbulence décroît en amont de la flamme puis elle augmente à la traversée de la flamme et elle chute pour une valeur nulle au niveau de la paroi. La dégradation de l'énergie cinétique en amont de la flamme est la même pour toutes les positions radiales mais son accroissement derrière la flamme est d'autant plus important que l'on s'éloigne de l'axe de l'injecteur.

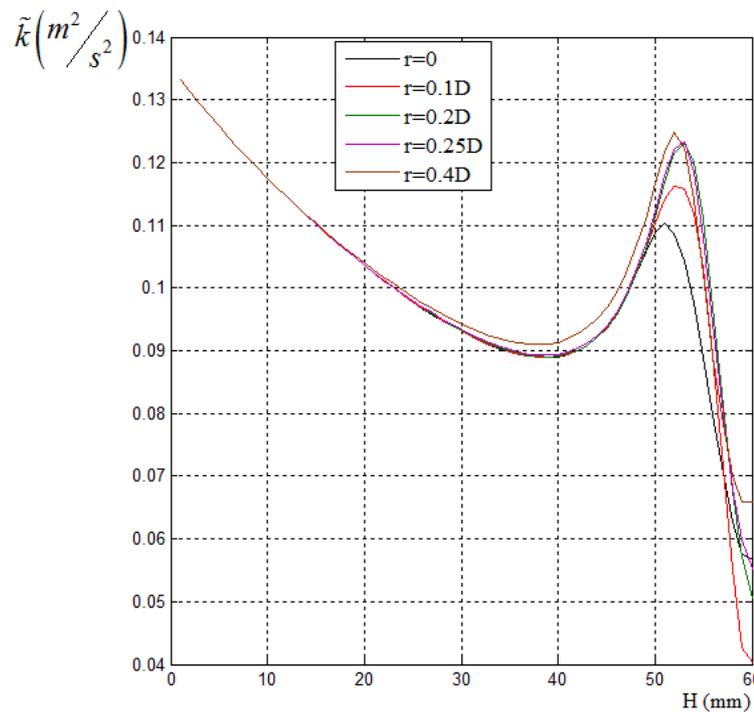


Figure 5.11 : Profils axiaux de l'énergie cinétique de turbulence moyenne

Ces résultats établissent d'un point de vue au moins qualitatif, la capacité de notre modèle à représenter le phénomène de génération de turbulence par la flamme.

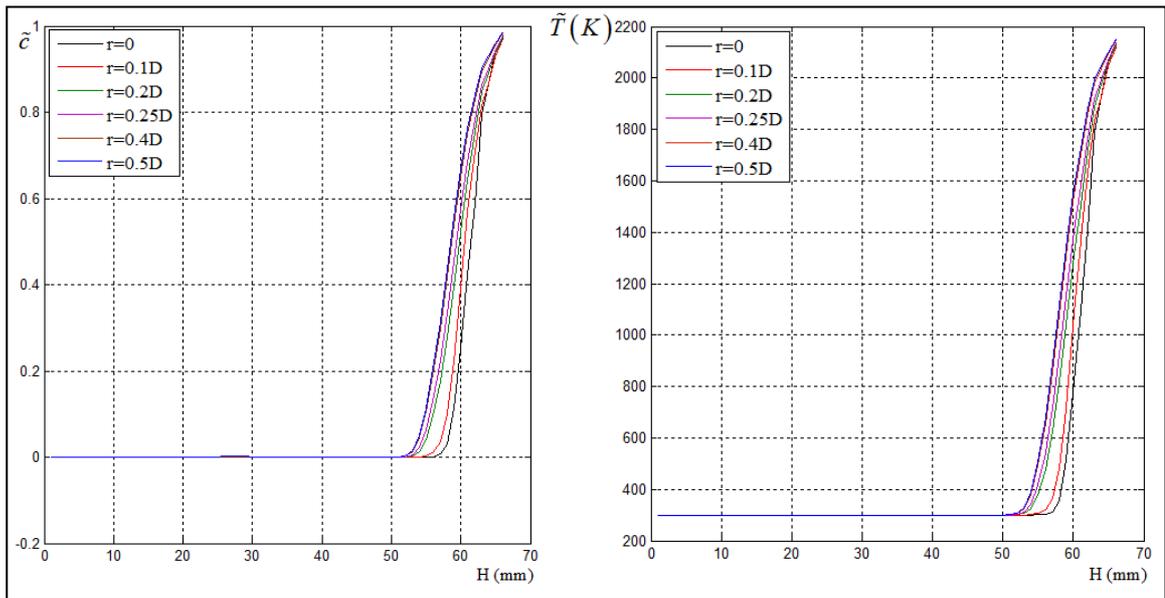


Figure 5.12 : Profils axiaux de la température et de la variable d'avancement moyenne

La figure 5.12 montre l'évolution de la température et de la variable d'avancement moyennes. En fait, ces deux paramètres suivent la même évolution. La température dépasse les 2100K derrière la flamme. Sur la figure de l'évolution de la variable d'avancement, on remarque que les gaz brûlés produits par la flamme sont fortement convectés le long de la paroi. Ceci va nous conduire à dire que les plus grandes valeurs de la variable d'avancement et de la température seront plus loin du point d'arrêt.

Du moment que $\tilde{c} < 1$, il en résulte que la probabilité de trouver des gaz frais au point d'arrêt est non nulle.

La figure 5.13 met en évidence les champs de la fraction massique du combustible et de la fraction de mélange ainsi que leurs variances et leur covariance. La zone de mélange entre l'air ambiant et les gaz frais issus de l'injecteur est bien représentée et on observe clairement l'entraînement de l'air ambiant et la formation de gaz frais à richesse variable le long de la couche de cisaillement.

Pour compléter notre analyse, la zone centrale du jet des gaz frais reste à une richesse uniforme et constante.

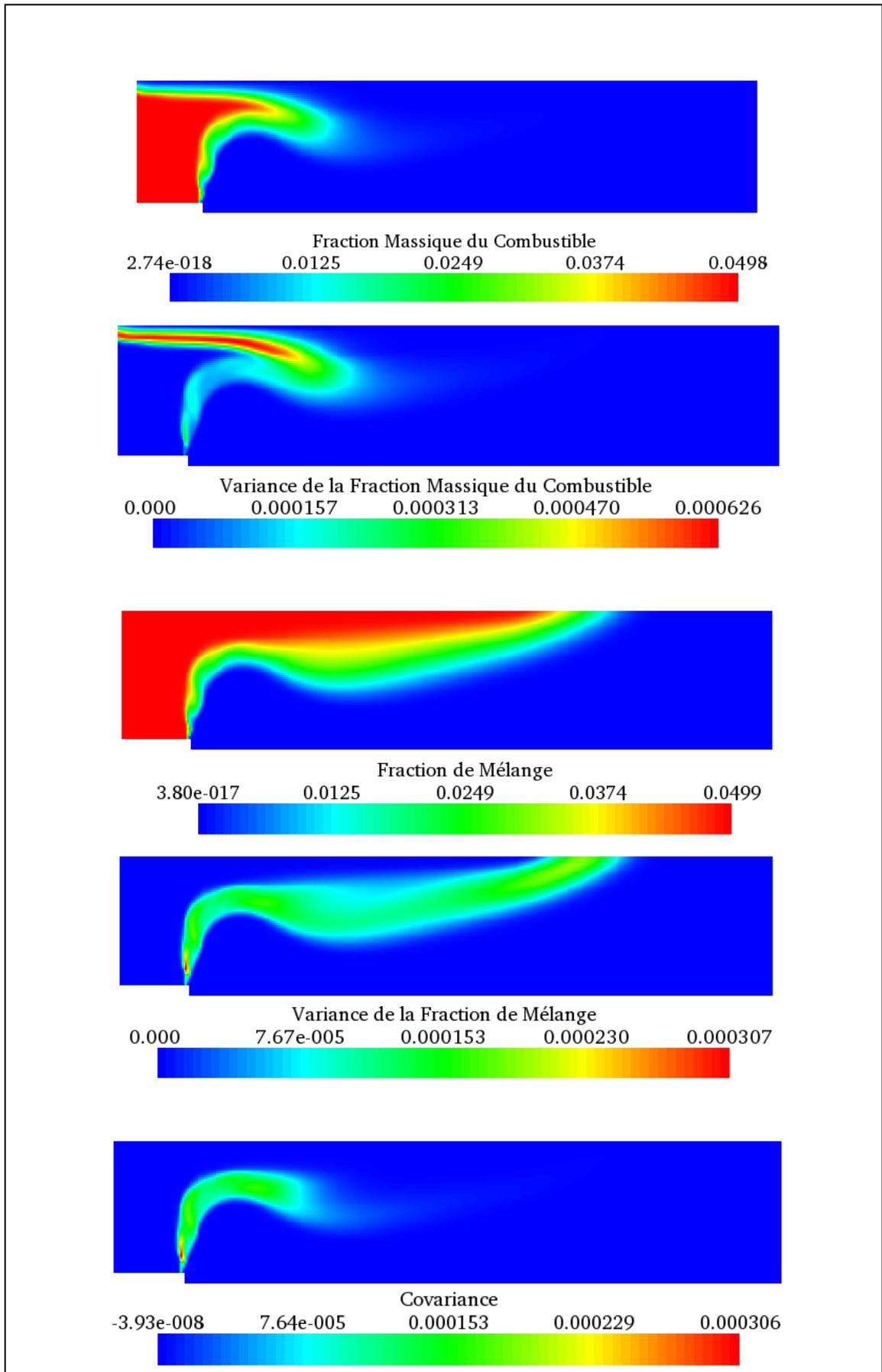


Figure 5.13 : Champs de la fraction massique du combustible et de la fraction de mélange, leurs variances et leur covariance

Il est à rappeler que la pente d de la droite (D) décrite dans l'espace des compositions dans la figure 3.4 qui est utilisée pour les distributions de Dirac de la PDF est liée directement à cette covariance. Cette dernière joue un rôle important pour le cas des mélanges pauvres qui est bien sur le notre dans la combustion en prémélange partiel.

Les champs obtenus pour cette covariance sur la figure 5.13 montrent que celle-ci est présente dans la zone de cisaillement entre le jet des gaz frais et l'air environnant en amont de la zone réactive.

5.2 Flamme stabilisée loin de la paroi

Dans ces conditions d'expérimentation, la hauteur d'impact sur la paroi est le double du diamètre de l'injecteur et la flamme serait épaisse et stabilisée loin de la paroi.

En outre, dans cette étude expérimentale, un écoulement annulaire d'un fluide en général l'air est utilisé pour faciliter la stabilité de la zone réactive.

Cependant dans les travaux théoriques et numériques précédents effectués sur cette géométrie, l'influence de l'écoulement secondaire (coflow) est négligée [54]. Le modèle de combustion que nous avons développé permet de tenir compte de la présence d'un écoulement d'air autour de l'injecteur et par conséquent il rend possible l'étude de la structure de cette flamme.

Dans notre cas, on va se référer aux conditions correspondantes à l'expérience de Cheng et Shepherd [36, 37, 47].

Les conditions d'expérimentation consistent à un écoulement de gaz frais stœchiométrique c'est à dire à une richesse égale à 1 sortant d'un injecteur de diamètre 50 mm impactant une paroi solide de diamètre 200 mm située à une distance H égale à 2 fois le diamètre de l'injecteur.

Le domaine de calcul à été élargi dans notre cas à 6 fois le diamètre du brûleur. Pour la raison de symétrie, le domaine de calcul est pris égal à la moitié du domaine physique comme montré sur la figure 5.14. Le maillage est raffiné sur l'axe et à la sortie de l'injecteur.

La première étape dans un calcul CFD est de réaliser un maillage permettant d'avoir une solution indépendante du nombre de cellules.

Dans ce premier cas, la plus petite cellule est de 0.5 x 0.1 (mm x mm) avec un nombre total de cellules égal à 16121. A partir de ce nombre de cellules, la solution a été devenue indépendante du maillage.

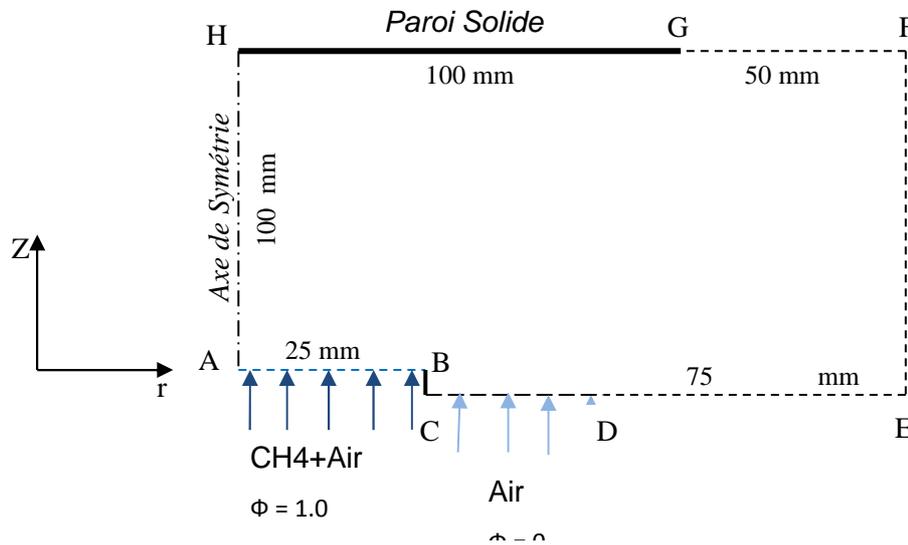


Figure 5.14 : Domaine de calcul

5.2.1 Conditions de calcul

5.2.1.1 Conditions initiales

L'initialisation du calcul ($t=0$) est faite en imposant dans les gaz frais :

$$\tilde{Y} = \tilde{\xi} \text{ et } \widetilde{Y^{n2}} = \widetilde{\xi^{n2}} = \widetilde{Y^n \xi^n} = 0$$

On impose la pression atmosphérique comme pression de référence dans toutes les cellules du domaine de calcul.

La température en tout point du domaine est prise égale à 300 K.

Les propriétés physiques du mélange Méthane-Air à la stoechiométrie sont déduites des annexes de la thèse de Lachaux [126] :

$$C_p = 1070.62 \text{ J / KgK}, \nu = 0.0000161 \text{ m}^2 / \text{s}, \rho = 1.126 \text{ Kg / m}^3 \text{ et } \mu = \rho \nu = 0.0000181286 \text{ Kg / ms}$$

5.2.1.2 Conditions aux limites

Les conditions aux limites pour chaque frontière du domaine de calcul sont comme suit :

A la sortie du bruleur représentée par la frontière AB, la vitesse de sortie W , l'énergie cinétique de turbulence et l'échelle intégrale de turbulence L_T sont fixées respectivement à 4.20 m/s, 0.18 m²/s², 1 mm [54].

Le taux de dissipation est déduit de la relation : $\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{L_t}$ avec $C_\mu = 0.09$.

Sa valeur sera alors de : 12.60 m² / s³.

La température d'entrée du mélange réactif est égale à 300 K.

Dans le cas d'un mélange méthane-air, la fraction massique du combustible est donnée par la relation [8] : $Y = \frac{\Phi}{\Phi + 17.6}$. A la stœchiométrie, la fraction massique du combustible est notée FS(1) dans le code et sa valeur est de 0.05506.

La frontière CD matérialise une entrée de dilution qui correspond à un écoulement annulaire d'air autour de l'injecteur dans le but de faciliter la stabilité de la zone réactive. Le diamètre extérieur est pris égal au double du diamètre de l'injecteur comme dans la majorité des études expérimentales avec un coflow. Nous imposerons les mêmes conditions aux limites que celle de l'entrée AB mais avec une fraction massique du combustible nulle.

Les frontières HG et BC représentent des parois solides où seront appliquées les lois de paroi et tous les flux des scalaires seront nuls.

Concernant les frontières libres DE, EF et FG, toutes les dérivées par rapport à la composante radiale sont nulles pour toutes les variables.

L'axe du jet HA, est un axe de symétrie et par conséquent cette symétrie impose que la composante radiale de la vitesse est nulle et toutes les dérivées par rapport à la composante radiale sont nulles pour toutes les variables.

5.2.2 Simulation de l'écoulement non réactif

Cette simulation est faite pour vérifier les conditions aux limites et la turbulence dans le domaine. Nous nous disposons d'aucune donnée expérimentale le long de l'axe de l'injecteur pour cette expérience. Du moment que nous sommes obligés de passer par cette étape avant l'allumage, nous allons quand même présenter les résultats de la simulation.

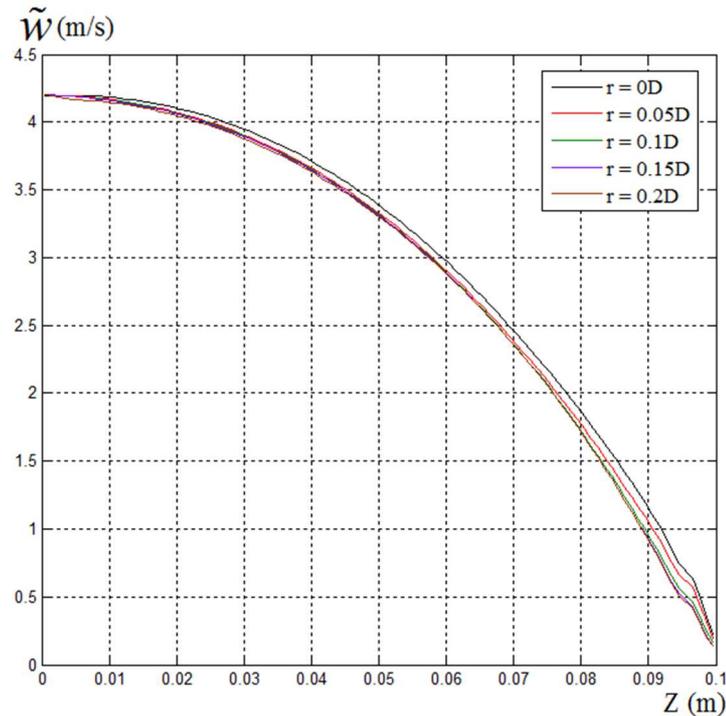


Figure 5.15 : Profils axiaux de l'évolution de la vitesse axiale moyenne

La figure 5.15 montre l'évolution de la vitesse axiale moyenne pour différentes positions radiales. Cette vitesse décroît de 4.2 m/s à la sortie de l'injecteur à la valeur zéro au plan d'arrêt.

Les résultats de la simulation montrent que ces profils sont pratiquement identiques et ils peuvent être considérés indépendants de la position radiale dans le cas de l'écoulement inerte.

L'évolution de la composante radiale de la vitesse est montrée sur la figure 5.16. Cette composante demeure nulle sur l'axe de l'injecteur pour confirmer la condition imposée de symétrie. Lorsque l'on se déplace radialement de l'axe du brûleur, la vitesse radiale augmente linéairement avec la distance à la paroi d'impact.

Cette vitesse peut atteindre une vitesse supérieure à 1.2 m/s dans l'écoulement pariétal au niveau de la paroi à la position radiale située près de la périphérie de l'injecteur.

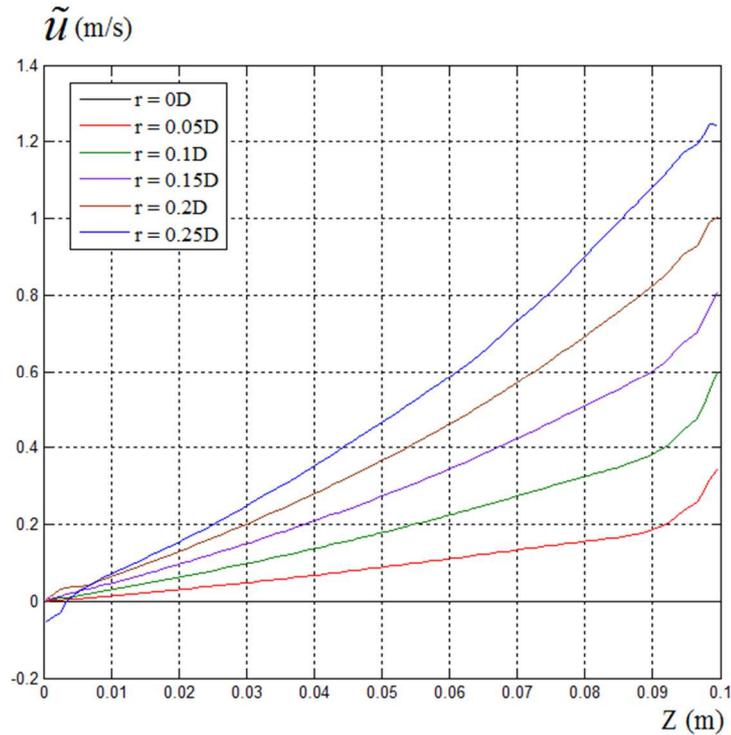


Figure 5.16 : Profils axiaux de l'évolution de la vitesse radiale moyenne

Les profils axiaux de la vitesse axiale sont montrés sur la figure 5.3 où la vitesse décroît de 4 m/s à la sortie de l'injecteur à la valeur zéro au plan d'arrêt. Ces profils sont identiques et sont indépendants de la position radiale dans le cas de l'écoulement inerte.

La figure 5.17 montre l'évolution de l'énergie cinétique de turbulence le long de la direction axiale du jet des gaz frais pour différentes positions radiales. On remarque que l'énergie cinétique de turbulence décroît le long de l'axe de l'injecteur pour atteindre une valeur nulle au point d'arrêt. Par contre, lorsque l'on se déplace radialement du point d'arrêt, l'énergie cinétique décroît puis elle croît dans l'écoulement pariétal sous l'effet de la paroi.

On peut maintenant passer à la simulation de l'écoulement réactif. Ceci est réalisé en enflammant le mélange en imposant une étincelle sur l'axe de l'injecteur à une distance de 75 mm de la sortie des gaz frais.

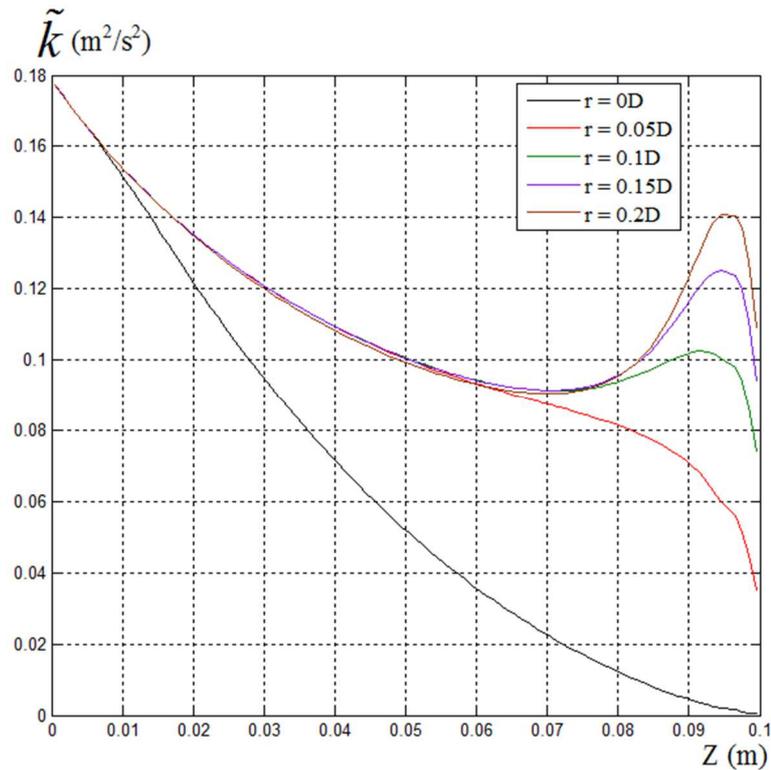


Figure 5.17 : Profils axiaux de l'évolution de l'énergie cinétique moyenne

5.2.3 Simulation de l'écoulement réactif

On reprend les calculs à partir de l'écoulement inerte où on initie une flamme en imposant une très haute température dans une cellule sur l'axe de l'injecteur située à 75 mm au dessus de l'injecteur pour 50 itérations et on cesse cette source de chaleur.

La solution serait considérée comme convergente lorsque les résidus de toutes les variables sont inférieurs à 10^{-5} et qu'il n'y a plus de changements significatifs dans ces résidus.

Pour cette raison, plusieurs simulations ont été faites et après leurs analyses on est conduit à la même forme de la flamme ainsi qu'à sa position.

La validation de notre modèle serait en comparant nos résultats de simulation avec les résultats expérimentaux de Shepherd et al. [36, 37] d'un coté et avec les résultats du modèle BML du second ordre complet de Karmed et al. [54] d'un autre coté.

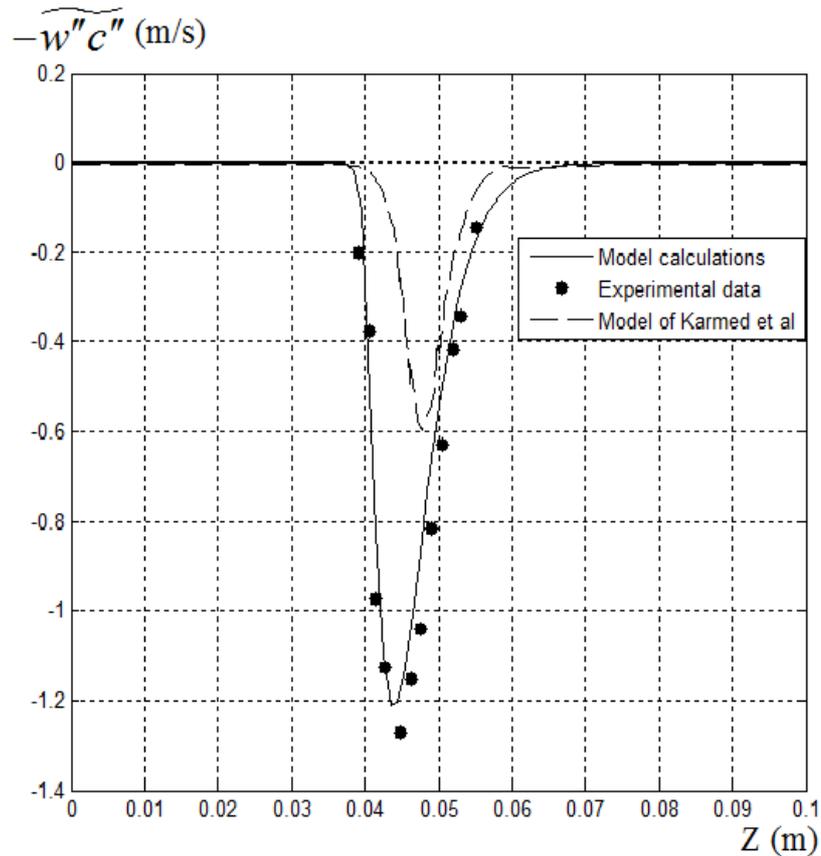


Figure 5.18 : Comparaison des flux turbulents de masse sur l'axe de l'injecteur avec les résultats expérimentaux Shepherd et al.[36, 37] et les résultats de simulation numérique du modèle de Karmed et al. [54]

La figure 5.18 montre l'évolution des flux turbulents de masse le long de l'axe de l'injecteur. Nous avons choisi le même repère que celui de Karmed et al. [54] pour pouvoir comparer nos résultats.

La figure 5.18 montre clairement que notre modèle de combustion, déjà décrit dans le chapitre 4, a pu prévoir le transport contre gradient des flux turbulents dans le cas de cette flamme qui est stabilisée loin de la paroi où l'expansion des gaz derrière la flamme contrôle le transport de ces flux.

Il est à noter que le modèle BML du second ordre complet déjà développé par Karmed et al. [54] n'a pas pu prévoir ces quantités. La figure 5.19 montre une comparaison de l'évolution de la vitesse axiale le long de l'injecteur entre les calculs de notre modèle, celui de Karmed et al. et les données expérimentales.

Cette comparaison est faite à la base de la valeur moyenne de la vitesse axiale au sens de Reynolds. Nous allons présenter le passage de la valeur

moyenne au sens de Favre à celle de Reynolds où les flux turbulents interviennent dans ce passage.

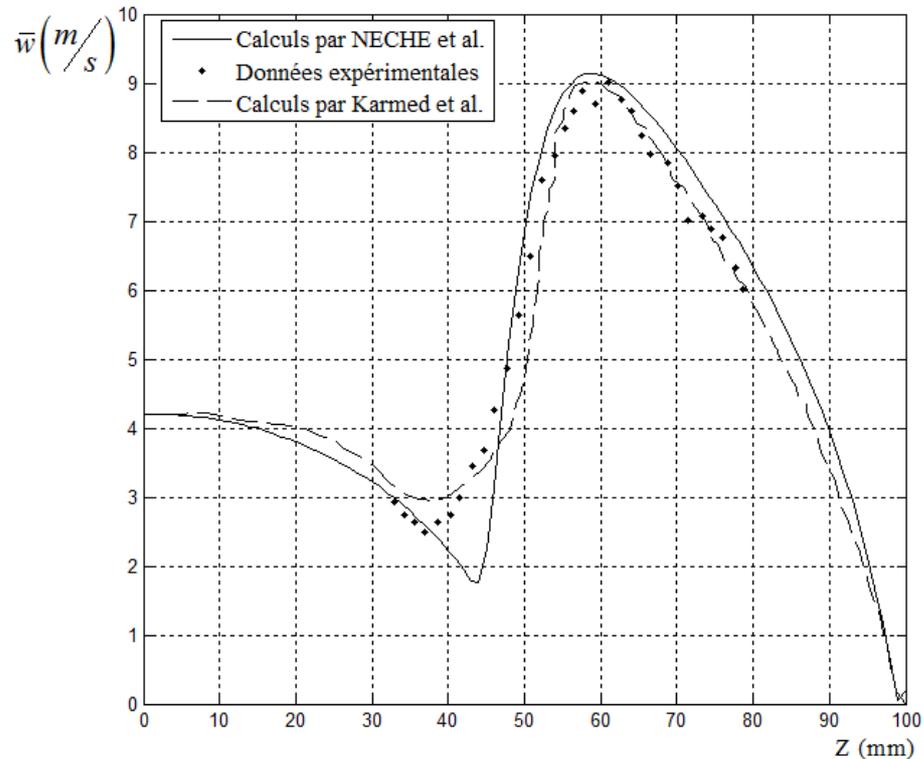


Figure 5.19 : Comparaison de la vitesse axiale moyenne sur l'axe de l'injecteur avec les résultats expérimentaux Shepherd et al.[36] et les résultats de simulation numérique du modèle de Karmed et al. [54]

La moyenne au sens de Reynolds de la vitesse axiale s'écrit :

$$\bar{w} = \overline{\rho \frac{w}{\rho}} = \overline{\rho \left(\frac{w}{\rho} \right)}$$

La relation qui décrit la variation de la masse volumique en fonction de la masse volumique des gaz frais est donnée par :

$$\rho_r = \rho(1 + \tau c)$$

On remplace cette expression dans l'expression de la moyenne de la vitesse axiale :

$$\bar{w} = \frac{\bar{\rho}}{\rho_r} \overline{w(1 + \tau c)}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\bar{\rho}}{\rho_r} (\tilde{w} + \tau \widetilde{w c}) \\
&= \frac{\bar{\rho}}{\rho_r} (\tilde{w} + \tau \tilde{w} \tilde{c} + \tau \widetilde{w'' c''}) \\
&= \frac{\bar{\rho}}{\rho_r} \tilde{w} (1 + \tau \tilde{c}) + \tau \frac{\bar{\rho}}{\rho_r} \widetilde{w'' c''} \\
&= \tilde{w} + \tau \frac{\bar{\rho}}{\rho_r} \widetilde{w'' c''}
\end{aligned}$$

Et finalement, on a obtenu l'expression du passage de la moyenne de Reynolds à la moyenne de Favre :

$$\bar{w} = \tilde{w} + \tau \frac{\bar{\rho}}{\rho_r} \widetilde{w'' c''}$$

La figure 5.19 montre que les résultats de notre simulation sont comparables aux valeurs expérimentales et aux calculs de Karmed et al. concernant la valeur de la vitesse derrière la flamme dans les gaz brûlés. La seule remarque concerne la valeur de la vitesse axiale moyenne du côté des gaz frais en amont de la flamme où la chute de la vitesse était de l'ordre de 2 m/s. Cette valeur ne coïncide pas avec les données expérimentales mais la position de la flamme à 43 mm au dessus de l'injecteur a été prédite avec précision comme dans l'expérience et dans les calculs asymptotiques par Bray et al.[58]. Il est à souligner que le modèle de Karmed et al. surestime la valeur de la vitesse moyenne du côté des gaz frais de la flamme et que la position de la flamme est au dessus de l'injecteur de 38 mm ; une position qui demeure loin de la réalité expérimentale.

La figure 5.20 montre l'évolution de la variable d'avancement moyenne au sens de Reynolds :

$$\bar{c} = \frac{(1 + \tau) \tilde{c}}{1 + \tau \tilde{c}} \text{ avec } \tau = \frac{T_b}{T_u} - 1 = \frac{\rho_u}{\rho_b} - 1$$

On voit bien que l'allure de la variable d'avancement le long de l'axe de l'injecteur prédite par les résultats de notre simulation correspond à celle des résultats expérimentaux. Puisque la zone réactive peut être considérée comme la zone où la variable d'avancement moyenne est comprise entre 0.1 et 0.9 c'est-à-dire : $0.1 \leq \bar{c} \leq 0.9$, on voit bien que la valeur de l'épaisseur de la flamme prévue

par notre simulation correspond parfaitement à la valeur expérimentale. La valeur de cette épaisseur dans les résultats de simulation de Karmed et al. dépasse beaucoup la valeur expérimentale.

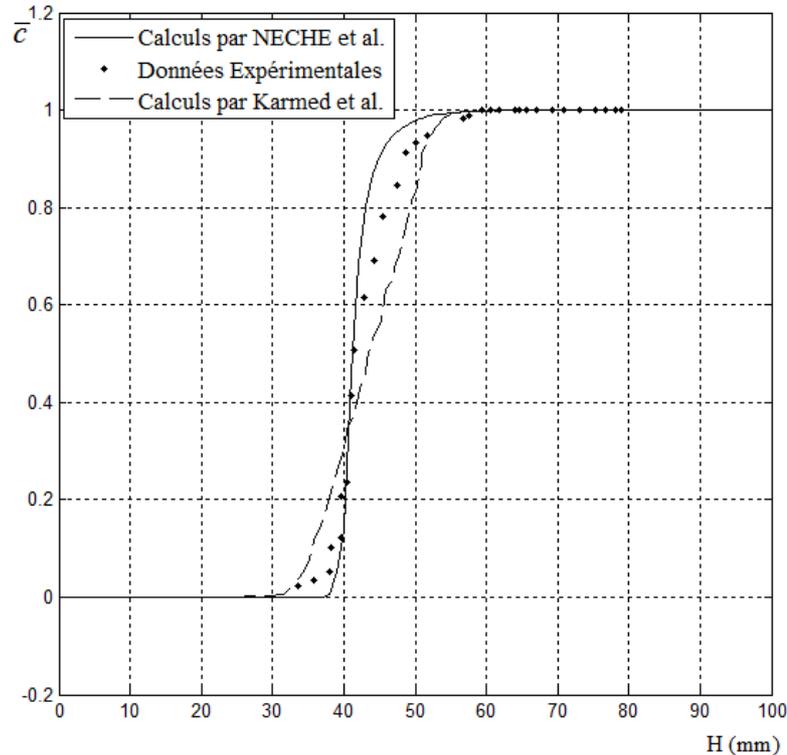


Figure 5.20 : Comparaison de la variable d'avancement moyenne sur l'axe de l'injecteur avec les résultats expérimentaux Shepherd et al.[36] et les résultats de simulation numérique du modèle de Karmed et al. [54]

La figure (5.21) montre l'évolution des fluctuations de la vitesse radiale et de la vitesse axiale. Les résultats de notre simulation ainsi que les résultats de Karmed et al. sont très loin des valeurs expérimentales. Dans ces flammes où le gradient de pression est très important à la traversée de la zone réactive, les fluctuations de la pression deviennent très importantes.

Dans le terme de la génération de la turbulence par la flamme déjà décrit et fermé dans le chapitre 4, on n'a tenu compte que de la valeur de la pression

moyenne et on avait négligé le terme $\overline{u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}}$ comme proposé par Bray et al.[115].

Ces termes de fluctuations de pression sont plus problématiques dans les flammes turbulentes prémélangées surtout dans le cas présent où l'expansion thermique des gaz brûlés crée un gradient de pression favorable à la génération de la turbulence par la flamme.

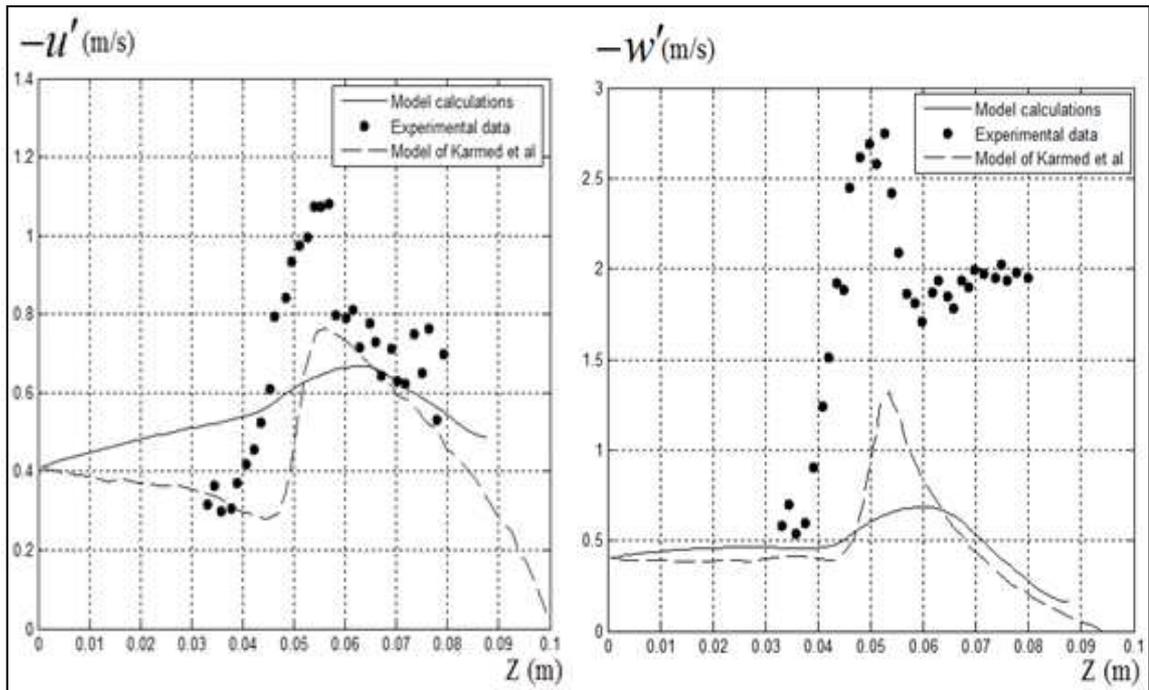


Figure 5.21 : Comparaison des fluctuations de la vitesse radiale et axiale sur l'axe de l'injecteur avec les résultats expérimentaux Shepherd et al. [36] et les résultats de simulation numérique du modèle de Karmed et al. [54]

En outre, des simulations numériques directes ont montré que ces termes ne sont pas négligeables et que l'hypothèse de Bray et al. retenue dans notre modèle et celui de Karmed et al. n'est pas justifiée. Plusieurs autres auteurs notamment Pope [128] ont proposé des modèles mais leurs fermetures se limitaient à des écoulements non réactifs.

La figure 5.22 montre la zone de réaction moyenne, définie par le champ du taux de production chimique moyen. La zone de réaction moyenne calculée est plane et circulaire dépassant le diamètre de l'injecteur ; elle est stabilisée loin de la paroi et détachée du bord du brûleur, en accord avec les observations expérimentales [36, 37].

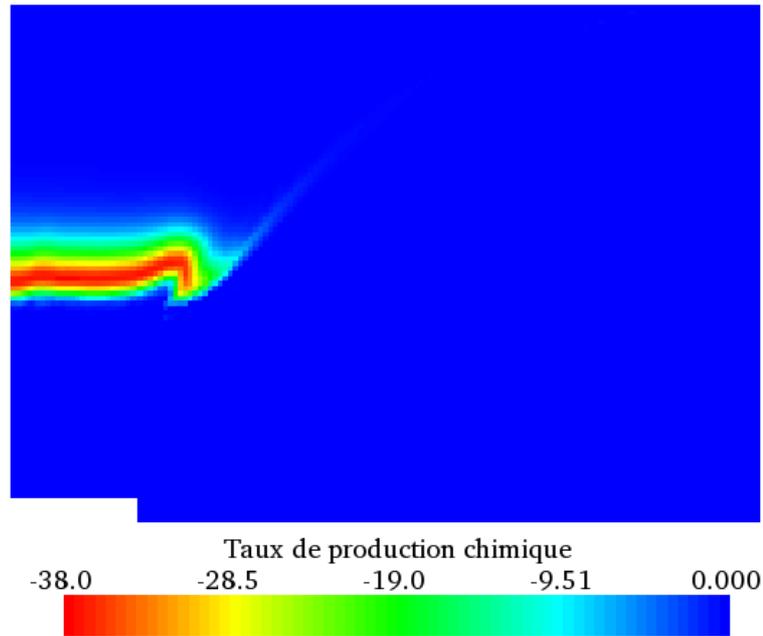


Figure 5.22 : Zone de réaction moyenne et terme du taux de production chimique

L'incurvation du bord de la zone de réaction vers les gaz frais n'est pas importante comme dans le cas des flammes adjacentes à la paroi où la flamme est très étirée. De ce fait, cette flamme présente une épaisseur forte et ceci est dû à son faible taux d'étirement.

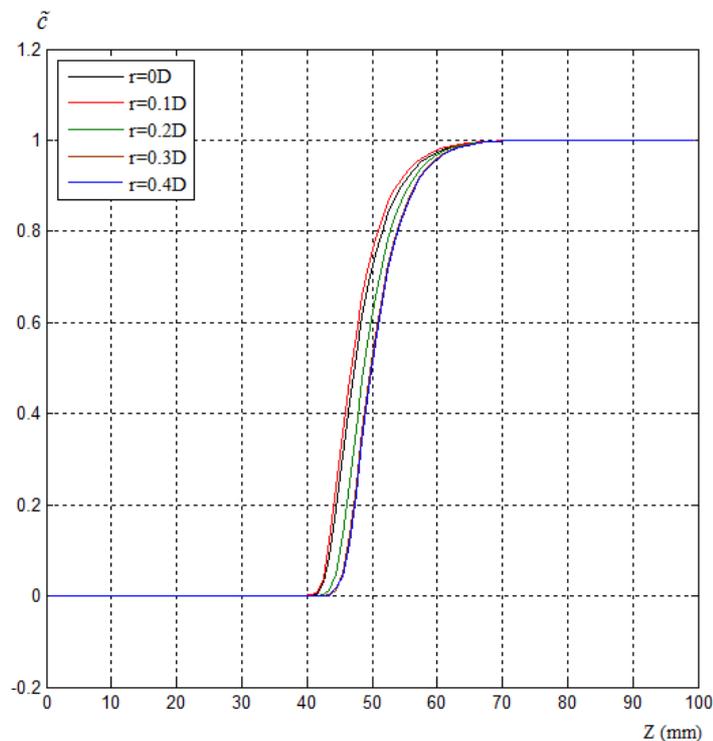


Figure 5.23 : Profils axiaux de l'évolution de la variable d'avancement moyenne

La figure (5.23) montre l'évolution de la variable d'avancement moyenne le long de l'axe de l'écoulement pour différentes positions radiales. On voit clairement qu'à partir d'une distance de 70 mm au dessus de l'injecteur, la variable d'avancement moyenne atteint la valeur unité et par conséquent la probabilité de trouver des gaz frais au niveau du plan d'arrêt est nulle. Les courbes représentant l'évolution de la variable d'avancement moyenne sont similaires mais ne sont pas superposables du fait du léger plissement des flammelettes par la turbulence.

La figure (5.24) montre l'évolution de la vitesse axiale moyenne pour différentes positions radiales. La valeur maximale derrière la zone réactive est atteinte sur l'axe de l'injecteur c'est-à-dire à $r=0$. Au fur et à mesure que l'on s'éloigne de l'axe du brûleur, cette vitesse diminue pour passer de 9.2m/s sur l'axe de l'injecteur à 8.2 m/s sur sa périphérie.

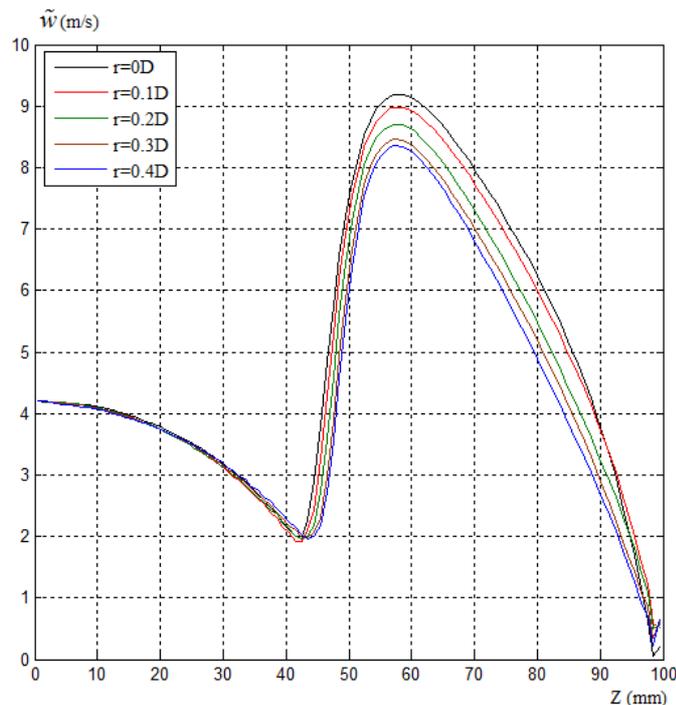


Figure 5.24 : Profils axiaux de l'évolution de la vitesse axiale moyenne

La vitesse axiale moyenne en amont de la zone de la flamme du côté des gaz frais est la même pour toutes les positions radiales. Elle restera similaire à la traversée de la zone de réaction mais elle devient différente derrière la zone de flamme. Ceci est dû à l'écoulement pariétal au niveau du plan d'arrêt d'un côté et

à la diminution de la richesse dans la zone située près de la périphérie de l'injecteur d'un autre côté.

La figure (5.25) montre l'évolution de la vitesse radiale moyenne pour différentes positions radiales. Cette vitesse augmente linéairement en amont de la zone réactive du côté des gaz frais puis elle chute légèrement à la traversée de la zone de flamme et ensuite elle augmente considérablement derrière la zone de flamme surtout dans la zone de l'écoulement pariétal.

La vitesse radiale moyenne dans le cas des flammes stabilisées loin de la paroi devient très importante d'autant plus qu'on s'éloigne du point d'arrêt. On voit clairement sur la figure (5.25) que la vitesse radiale moyenne a atteint la valeur de 3.75 m/s à la position radiale $r = 12.5$ mm. Suite aux fortes expansions thermiques dans ces situations, ces vitesses atteignent des vitesses beaucoup plus supérieures que la vitesse d'injection des gaz frais à la périphérie de l'injecteur.

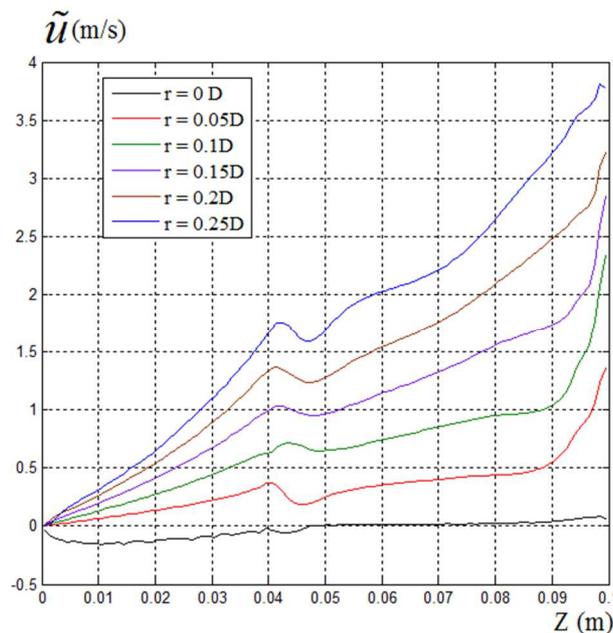
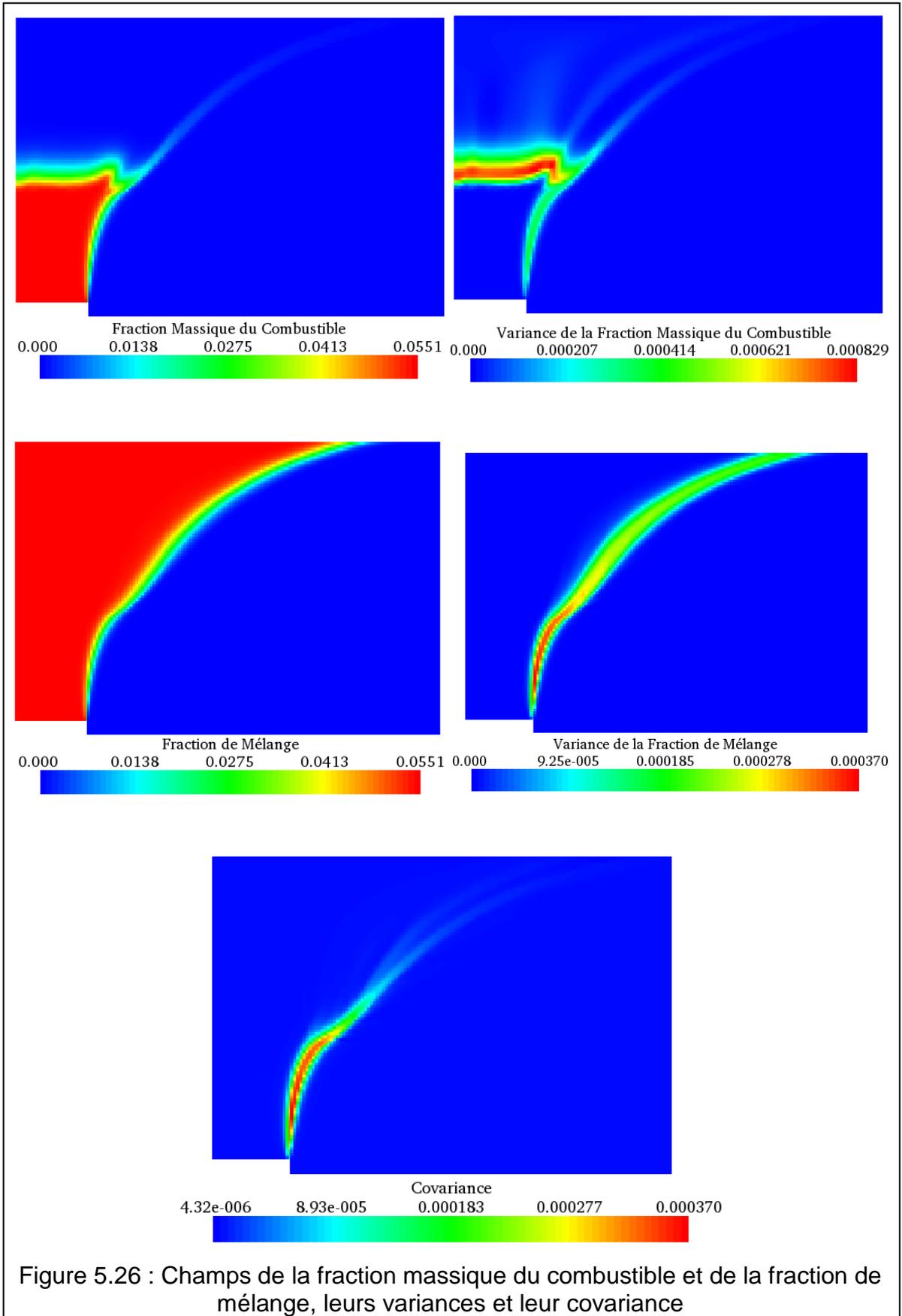


Figure 5.25 : Profils axiaux de l'évolution de la vitesse radiale moyenne

La figure 5.26 met en évidence les champs de la fraction massique du combustible et de la fraction de mélange ainsi que leurs variances et leur covariance.



La zone de mélange entre l'air ambiant et les gaz frais issus de l'injecteur est bien représentée et on observe clairement une zone centrale du jet des gaz frais où la richesse du mélange des gaz frais demeure uniforme et constante et une zone de prémélange partiel à la périphérie de l'injecteur où la richesse du mélange est variable.

Le champ obtenu pour la covariance sur la figure 5.26 montre que celle-ci est présente dans la zone de cisaillement entre le jet des gaz frais et l'air environnant en amont de la zone réactive ce qui justifie l'utilisation de notre modèle pour le traitement des flammes turbulentes partiellement prémélangées.

5.4 Conclusion

Les résultats de la simulation numérique donnés par notre modèle de combustion turbulente partiellement prémélangée tenant en compte le phénomène de diffusion contre gradient des flux turbulents de masse dans les deux cas extrêmes des flammes stabilisées dans des écoulements à point d'arrêt montrent bien l'aptitude à prévoir les champs des vitesses et des températures dans le cas des flammes minces très étirées adjacentes à la paroi et des flammes épaissies stabilisées loin de la paroi. L'effet des fluctuations de pression dans le cas du transport contre gradient ne peut pas être négligé et mérite bien une attention particulière et sa contribution dans la production de la turbulence dans la zone de flamme est importante.

CONCLUSION

L'objectif principal de ce travail est de développer un modèle de la combustion turbulente de prémélange qui permet de prendre en considération le phénomène contre gradient dû à l'expansion thermique des gaz brûlés en premier lieu et de tenir en compte de l'effet des hétérogénéités de la richesse du mélange en second lieu.

L'aspect important de la modélisation de l'interaction combustion-turbulence réside dans le modèle des flux turbulents de masse, flux qui interviennent directement dans la diffusion turbulente de la variable d'avancement. Les études théoriques sur la flamme plane ont montré la non validité de la loi de type gradient, généralement employé pour modéliser ces flux, en mettant en avant le phénomène de diffusion à contre gradient à travers le front de flamme, phénomène qui s'accompagne d'une importante production de turbulence.

Nous avons développé un modèle algébrique qui tient compte en même temps de l'effet des fluctuations de la vitesse et de l'expansion thermique des gaz brûlés. Ce modèle a été inspiré de l'analyse faite par Bray dans le cas de l'approche de densité de surface de flamme reproduite par Veynante et Vervisch [89]. Ce modèle est ensuite implanté dans le modèle Libby Williams Poitiers (LW-P) afin d'atteindre l'objectif principal de notre thèse.

Ce nouveau modèle, conjugué avec le modèle du second ordre $R_{ij} - \varepsilon$ pour la modélisation des transports turbulents avec une fermeture gradient pour tous les scalaires sauf les flux turbulents de masse, est ensuite appliqué à une flamme stabilisée dans un écoulement à point d'arrêt.

Les résultats obtenus montrent que le modèle conduit à une solution stationnaire où la zone de réaction moyenne quasi plane est localisée entre le brûleur et la paroi et est décrochée du bord du brûleur, conformément aux observations expérimentales.

Une analyse détaillée de la structure de l'écoulement moyen met en évidence :

Une zone centrale où le mélange réactif issu du brûleur n'est pas affecté par la dilution avec l'air ambiant autour du brûleur, dans cette région la combustion s'effectue à richesse constante.

Le bord de la zone de réaction est le siège d'une combustion à richesse variable.

L'incurvation du bord de la zone de réaction, vers les gaz frais est également prédite et peut s'expliquer par la divergence de l'écoulement due au plan d'arrêt.

En effet, dans la zone centrale, le champ de vitesses est quasiment suivant l'axe et la flamme se positionne alors normalement à celui-ci. En revanche, dans le jet pariétal, le champ de vitesse moyen étant parallèle au plan d'arrêt, les flammelettes s'incurvent de façon à ce que la vitesse de l'écoulement normale à leur surface soit égale à la vitesse fondamentale de la flamme.

Un bon accord est aussi obtenu entre les résultats numériques obtenus et les résultats expérimentaux d'Escudé et Haddar [42, 43] dans le cas des flammes adjacentes à la paroi et des résultats de Shepherd et al. [36, 37] pour les flammes stabilisées loin de la paroi où l'effet contre gradient est dominant vu l'accroissement très important de la vitesse moyenne à travers la zone réactive.

Les résultats de notre simulation numérique comparés aux résultats de Lahjaily et al. [53, 55] montrent bien la capture de l'accroissement de la vitesse à travers la zone réactive ainsi que la prédiction de l'épaisseur de cette flamme dans le cas des flammes adjacentes à la paroi et dans le cas des flammes stabilisées loin de la paroi, nos résultats ont pu prévoir les flux turbulents de masse que le modèle du second ordre complet développé par Karmed et al. [54] a failli de l'atteindre.

Dans notre modèle, le facteur d'efficacité est estimé égal à l'unité ; une valeur qui ne peut pas être une constante et des calculs DNS exacts peuvent donner une expression pour ce facteur afin de l'introduire dans le modèle où le nombre de Bray sera déterminé de façon précise.

REFERENCES

1. Lindstedt, P., "Is DNS including detailed chemistry possible?", A combustion DNS day at Imperial College London, 15 April 2004.
 2. Moin, P., "Advances in large eddy simulation methodology for complex flows", *Int. J. Heat Fluid Flow*, 23(6), 710 - 720.
 3. Karmed, D., "Modélisation et Etude Numérique de l'Interaction entre une Flamme Stabilisée dans un Ecoulement Divergent à Point d'Arrêt et une Paroi Solide", Thèse de doctorat de l'université de Poitiers, 1993.
 4. Mounaim-Rousselle, C., "Combustion Turbulente Prémélangée dans un Ecoulement à Jets Opposés", Thèse de doctorat de l'université d'Orléans, 1993.
 5. Lahjaily, H., "Introduction de la Dilution dans la Modélisation de la Combustion Turbulente pour les Mélanges Pauvres : Application à une Flamme Stabilisée dans un écoulement à Point d'Arrêt", Thèse de doctorat de l'université de Poitiers, 1998.
 6. Libby, P.A. and Bray, K.N.C., "Counter gradient diffusion in premixed turbulent flames", *AIAA journal* 19(2), (1981) 205
 7. Lipatnikov, A. N., "Fundamentals of Premixed Turbulent combustion", CRC Press, 2012
 8. Poinso, T. and Veynante D., "Theoretical and Numerical Combustion", Edwards, Philadelphia, PA, USA, 2nd Edition, 2005
 9. Bray, K. N. C., Champion, M., and Libby, P. A., "Premixed Flames in Stagnating Turbulence Part III", *Combustion and Flame*, 91: 165-186, 1992
 10. Schlichting, H., "Boundary Layer Theory", Mc Graw Hill, 1979
 11. Coron, X., "Etude Expérimentale d'une Flamme de Prémélange Stabilisée dans un Ecoulement Turbulent à Point d'Arrêt", Thèse de doctorat de l'université de Poitiers, 2006.
 12. Traci, R. M. And Wilcox, D. C., "Free stream Turbulence Effects on Stagnation Point Heat Transfer", *AIAA journal* 13(7), 890-896, 1975
 13. Strahle, W. C., "Stagnation Point Flows with Free Stream Turbulence. The Matching Condition", *AIAA journal* 23(11), 1814-1822, November 1985
 14. Champion, M. And Libby, P. A., "Stagnation Streamline Turbulence Revisited", *AIAA journal* 28(8), 1525-1526, August 1990
 15. Champion, M. And Libby, P. A., "Asymptotic Analysis of Stagnating Turbulent Flows", *AIAA journal* 29(1), 16-24, January 1991
-

16. Champion, M. And Libby, P. A., "Reynolds Stress Description of Opposed and Impinging Turbulent Jets, Part i: Closely Spaced Opposed Jets", *Physics of Fluids*, A5: 203-216, January 1993
17. Champion, M. And Libby, P. A., "Reynolds Stress Description of Opposed and Impinging Turbulent Jets, Part ii: Axisymmetric jets impinging on nearby walls", *Physics of Fluids*, A5: 1805-1819, May 1994
18. Libby, P. A. And Williams, F. A., "Structure of Laminar Flamelets in Premixed Turbulent Flames", *Combustion and Flame*, 44:287-303, 1982
19. Libby, P. A. And Williams, F. A., "Strained Premixed Laminar Flames under non Adiabatic conditions", *Combustion Science and Technology*, 31:1-42, 1983
20. Libby, P. A. And Williams, F. A., "Strained Premixed Laminar Flames with non-unity Lewis Numbers", *Combustion Science and Technology*, 34:257-293, 1983
21. Libby, P. A. And Williams, F. A., "Strained Premixed Laminar Flames with two Reaction Zones", *Combustion Science and Technology*, 37:221-252, 1984
22. Liñán, A., "The Asymptotic Structure of Counter Flow Diffusion Flames for Large Activation Energy", *Acta Astronautica*, 1:1007, 1974
23. Darabiha, N., Candel, S. M. And Marble, F. E., "The Effect of Strain Rate on Premixed Laminar Flame", *Combustion and Flame*, 64:203-217, 1986
24. Law, C. K., Ishizuka, S. And Mizomoto, M., "Lean Limit Extinction of Propane/Air Mixtures in the Stagnation Point Flow", 18th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 1791-1798, 1981
25. Ishizuka, S. And Law, C. K., "An Experimental Study on Extinction and Stability of Stretched Premixed Flames", 19th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 327-335, 1982
26. Yamaoka, I. And Tsuji, H., "An Experimental Study on Flammability Limits Using Counter Flow Flames", 17th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 843-855, 1978
27. Tsuji, H. And Yamaoka, I., "Structure and Extinction of Near Limit Flames in a Stagnation Flow", 19th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 1533-1540, 1982
28. Sato, J., "Effects of Lewis Number on Extinction Behaviour of Premixed Flames in Stagnation Flow", 19th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 1541-1548, 1982
29. Giovagigli, V. And Smooke, M. D., "Extinction of Strained Premixed Laminar Flames with Complex Chemistry", *Combustion Science and Technology*,

53:23-49, 1987

30. Law, C. K., And Wu, C. K., "On the Determination of Laminar Flame Speeds from Stretched Flames", 20th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 1984
31. Mendes-Lopes, J. M. C., "Influence of Strain Fields on Flame Propagation", Ph.D Thesis, University of Cambridge, 1983.
32. Peters, N., "Turbulent combustion", Cambridge University Press, Cambridge, 2000
33. Cho, P., Law, C. K., Hertzberg, J. R. And Cheng, R. K., "Structure and Propagation of Turbulent Premixed Flames Stabilized in a Stagnation Flow", 21st Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 1493-1499, 1986
34. Cho, P., Law, C. K., Cheng, R. K. And Shepherd, I. G., "Velocity and Scalar Fields of Turbulent Premixed Flames in a Stagnation Flow", 22nd Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 793-745, 1988
35. Liu, Y. And Lenze, B., "The Influence of Turbulence on the Burning Velocity of Premixed CH₄-H₂ Flames with Different Laminar Burning Velocities", 22nd Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 747-754, 1988
36. Shepherd, I. G., Cheng, R. K. And Goix, P. J., "The Spatial Scalar Structure of Premixed Turbulent Stagnation Point Flames", 23th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 781-787, 1990
37. Cheng, R. K. And Shepherd, I. G., "The Influence of Burner Geometry on Premixed Flame Propagation", Combustion and Flame, 85:7-26, 1991
38. Goix, P. J. And Shepherd, I. G., "Lewis Number Effects on Turbulent Premixed Flame Structure", Combustion Science and Technology, 91:191-206, 1993
39. Kostiuik, L. W., "Premixed Turbulent Combustion in Counterflowing Streams", Ph.D Thesis, University of Cambridge, February 1991.
40. Kostiuik, L. W., Bray, K. N. C. And Cheng, R. K., "Experimental Study of Premixed Turbulent Combustion in Opposed Streams. Part I- Non Reacting Flow Field", Combustion and Flame, 92:377-395, 1993
41. Kostiuik, L. W., Bray, K. N. C. And Cheng, R. K., "Experimental Study of Premixed Turbulent Combustion in Opposed Streams. Part II- Reacting Flow Field and Extinction", Combustion and Flame, 92:396-409, 1993
42. Escudié, D. and Haddar, E., "Experimental study of a premixed turbulent stag-

- nating flame", *Combustion and Flame* 95: 433-435, 1993
43. Escudié, D., Haddar, E. and Brun, M., "Influence of strain rate on a premixed turbulent flame stabilized in a stagnating flow", *Experiments in fluids*, Springer-Verlag 27 :533-541, 1999
 44. Li, S. C., Libby, P. A. and Williams, F. A., "Experimental Investigation of a Premixed Flame in an Impinging Turbulent Stream", 25th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 1207-1214, 1994
 45. Stevens, E. J., "Velocity and Scalar Measurements in Premixed Turbulent Reacting Flows", Ph.D Thesis, University of Cambridge, 1998.
 46. Stevens, E. J., Bray, K. N. C. and Lecordier, B., "Velocity and Scalar Statistics for Premixed Turbulent Stagnation Flames Using PIV", 27th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 949-955, 1998
 47. Kalt, P.A., Chen, Y.C. and Bilger, R.W., "Experimental investigation of turbulent scalar flux in premixed stagnation type flames", *Combustion and Flame* 129 (1-2): 401-415, 2002
 48. Bray, K. N. C., Champion, M., and Libby, P. A., "Mean Reaction Rates in Premixed Turbulent Flames", 22nd Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 763-769, 1988
 49. Bray, K. N. C., Champion, M., and Libby, P. A., "Premixed flames in stagnating turbulence, Part I –The general formulation for counter flowing streams and gradient models for turbulent transport", *Combustion and Flame* 84: 391-410, 1991
 50. Bray, K. N. C., Champion, M., and Libby, P. A., "Premixed flames in stagnating turbulence, Part II –The Mean Velocities and Pressure and the Damköhler Number", *Combustion and Flame* 112: 635-654, 1998
 51. Bray, K.N.C., Champion, M. and Libby, P.A., "Premixed Flames in Stagnating Turbulence, Part IV – A New Theory for the Reynolds Stresses and Reynolds Fluxes Applied to Impinging Flows", *Combustion and Flame* 120: 1-18, 2000
 52. Wu, A. S., "Aspects of Premixed Turbulent Combustion in Stagnation Flows", Ph.D Thesis, University of Cambridge, 1995
 53. Karmed, D., Lahjaily, H. and Champion, M., "Influence of the turbulent Damkohler number on the structure of premixed flames in a stagnation flow", *Combustion Science and Technology* 113: 351-365, 1996
 54. Karmed, D., Champion, M. and Bruel, P., "Two Dimensional Numerical Modeling of a Turbulent Premixed Flame Stabilized in a Stagnation Flow", *Combustion and Flame* 119: 335-345, 1999

55. Lahjaily, H., Karmed, D. and Champion, M., "Introduction of Dilution in the BML Model: Application to a Stagnating Turbulent Flame", *Combustion Science and Technology* 135:153-173, 1998
56. Dong, H. Q., Robin, V., Mura, A. and Champion, M., "Analysis of Algebraic Closures of the Mean Scalar Dissipation Rate of the Progress Variable Applied to Stagnating Turbulent Flames", *Flow Turbulence Combustion* 90: 301-323, 2013
57. Hsieh, W. D., Hou, S. S. and Lin, T. H., "Methane Flames in a Jet Impinging on-to a Wall", *Proceedings of the combustion Institute*, 30: 267 – 275, 2005
58. Bray, K. N. C., Champion, M., and Libby, P. A., "Premixed flames in stagnating turbulence, Part VI –Predicting the Mean Density and and the Permitted Rates of Strain for impinging reactant streams", *Combustion and Flame* 156: 310-321, 2009.
59. Kolmogorov, A.N., "Dissipation of Energy in a Locally Isotropic Turbulence", *Doklady Akad. Nauk SSSR*, 32, 141, 1941 (Traduction anglaise dans: *Ame. Math. Soc. Translations* 1958, Serie 2, Vol 8, p 87, Providence RI)
60. Pope, S. B. "Turbulent Flows", Cambridge University Presss, Cambridge, 2003
61. Fedioun, I., "Turbulence en Fluide Incompressible", Ecole Polytechnique, Université d'Orléans, 2007.
62. Trouvé, A. and Poinso, T., "The Evolution Equation for the Flame Surface Density in Turbulent Premixed Combustion", *Journal of fluid mechanics*, 278:1-31, 1994.
63. Renou, B., Boukhalfa, M., Puechberty, D. and Trinité, M., "Effects of Stretch on the Local Structure of Freely Propagating Premixed Low Turbulent Flames with Various Lewis Numbers", *Proceedings of the combustion institute*, 27, 2A01, 1998.
64. Poinso, T., Candel, S. and Trouve, A., "Application of Direct Numerical Simulation to Premixed Turbulent Combustion", *Progress in energy and combustion sciences*, 21:531-576, 1996.
65. Abdel-Gayed, R. G., Bradley, D., Hamid, M. N. and Lewis, M., "Lewis Number Effects on Turbulent Premixed Flames", 20th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, 505-512, 1984
66. Abdel-Gayed, R. G. and Bradley, D., "Combustion Regimes and the Straining of Turbulent Premixed Flames", *Combustion and Flame* 76: 215-218, 1989
67. Gouldin, P., "Combustion Intensity and Burning Rate Integral of Premixed Flames", 26th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion In-

- stitute, 381-388, 1996.
68. Turns, S. R., "An Introduction to Combustion", 2nd Edition Mc Graw Hill, 2006
 69. Damköhler, G., "Influence of Turbulence on Flame Velocity in Gaseous Mixtures", *Z H Electrochemical* 46: 601, 1940.
 70. Borghi, R., "Mise au Point sur la Structure des Flamme Turbulentes", *Journal de chimie physique*, 81(6): 361-370, 1984
 71. Borghi, R., "On the Structure and Morphology of Turbulent Premixed Flames ", *Recent Advances in Aerospace Science*, C. Casci, Edition Plenum Publishing Corporation, 1985
 72. Williams, F. A., "Combustion Theory", Edition Benjamin Cummings, Palo Alto, second edition, 1985.
 73. Bilger, R. W., "Conditional Moment Closure for Turbulent Reacting Flow", *Physics of fluids A*, 5(2): 436-444, 1993
 74. Buschmann, A., Dinckelacker, F., Schäfer, T. and Wolfrum, J., "Measurement of the Instantaneous Detailed Flame Structure in Turbulent Premixed Combustion", *Proceedings of the combustion institute*, 26: 437-445, 1996.
 75. O'young, F. and Bilger, R. W., "Scalar Gradient and Related Quantities in Turbulent Premixed Flames", *Combustion and Flame*, 109: 682-700, 1997.
 76. Veynante, D., "Theoretical and Experimental Analysis of Flame Surface Density Models for Turbulent Combustion", *Réunion commune des sections française et belge du combustion institute*, Villeneuve d'ascq, 1997.
 77. Poinot, T., Veynante, D. and Candel, S., "Diagrams of Premixed Turbulent Combustion Based on Direct Simulation", *Proceedings of the combustion institute*, 23: 613-619, 1990.
 78. Poinot, T., Veynante, D. and Candel, S., "Quenching Processes and Premixed Turbulent Combustion Diagrams", *Journal of fluid mechanics*, 288: 561-606, 1991
 79. Boussinesq, J., "Essai sur la théorie des eaux courantes", *Mémoire, Académie des Sciences, Paris*, 23(1) :252-260, 1877.
 80. Launder, B. E. and Spalding, D. B., "The Numerical computation of Turbulent Flows", *Computational Methods in Applied Mechanical Engineering*, 3: 269-289, 1974.
 81. Strahle, W. C. and Waldherr, G. A., "Pressure Strain and Pressure Scalar Gradient correlations in Variable Density flows", *AIAA journal* 26(8): 969-973, 1988

82. Zhang, S. and Rutland, C. J., "Premixed flame effects on Turbulence and Pressure Related Terms", *Combustion and Flame*, 102(4): 447-461, 1995.
83. Hanjalic, K. and Launder, B. E., "A Reynolds Stress Model of Turbulence and its Application to Thin Shear Flows", *Journal of fluid mechanics*, 52(4): 609-638, 1972
84. Daly, B. J. and Harlow, F. H., "Transport Equations in Turbulence", *Physics of Fluids*, 13: 2634 - 2649.
85. Rotta, J., "Statistische Theorie Nichthomogener Turbulenz", *Zeitschrift für Physik*, 129(1): 547 – 572, 131(2): 51 – 77, 1951.
86. Launder, B.E, Reece, G. J. and Rodi, W., "Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure", *Journal of Fluid Mechanics* 68: 537-566 , 1975.
87. Launder, B.E, "On the Effects of a Gravitational Field on the Turbulent Transport of Heat and Momentum", *Journal of Fluid Mechanics* 67: 569-581, 1975.
88. Naot, D., Shavit, A. and Wolfshtein, M., "Two Point Correlation Model and the Redistribution of Reynolds Stress", *Physics of Fluids*, 16: 738 – 751, 1973.
89. Veynante, D. and Vervish, L., "Turbulent Combustion Modeling", *Progress in Energy and Combustion Science*, 28: 193 – 266, 2002.
90. Kerstein, A. R., Ashurst, W. and Williams, F. A., "Field Equation for Interface Propagation in an Unsteady Homogeneous Flow Field", *Physics Review*, A37(7): 2728 – 2731
91. Marble, F. E., Felton, P. G. and Bracco, F. V., "Fractals and Turbulent Premixed Engine Flames", *Combustion and Flame*, 77: 295 – 310, 1977
92. Candel, S. and Poinso, T., "Flame Stretch and the Balance Equation for the Flame Area", *Combustion Science and Technology*, 70: 1 – 15, 1990
93. Moss, J. B. and Bray, K. N. C., "A Unified Statistical Model of the Premixed Turbulent Flames", *Acta Astronautica*, 4: 291 – 319, 1977.
94. Jones, W. P. and Musonge, P., "Closure of the Reynolds Stress and Scalar Flux Equations", *Physics of Fluids*, 31(12): 3589 – 3604, 1988.
95. Mantel, T. and Borghi, R., "A New Model of Premixed Wrinkled Flame Propagation Based on a Scalar Dissipation Equation", *Combustion and Flame*, 96: 443 – 457, 1994.
96. Mura, A. and Borghi, R., "Towards an Extended Scalar Dissipation Equation for Turbulent Premixed Combustion", *Combustion and Flame*, 133: 193 – 196,

- 2003.
97. Dopazo, C. and O'Brien, E. E., "A Probabilistic Approach to the Auto Ignition of a Reactive Turbulent Mixtures", *Acta Astronautica*, 1: 1239, 1974.
 98. Spalding, D. B., "Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames", 13th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, Pittsburg, 649 - 657, 1971.
 99. Magnussen, B. F. and Hjertager, B. H., "On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion", 16th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, Pittsburg, Pennsylvania, 719 - 729, 1976.
 100. Libby, P. A. and Bray, K. N. C., "Variable Density Effects in Premixed Turbulent Flames", *AIAA journal* 15(8): 1186-1193, 1977
 101. Libby, P. A. and Bray, K. N. C., "Implication of the Laminar Flamelet Model in Premixed Turbulent Combustion", *Combustion and Flame*, 39: 33 – 41, 1980.
 102. Libby, P. A., Bray, K. N. C. and Moss, J. B., "Effects of Finite Reaction Rate and Molecular Transport in Premixed Turbulent Combustion", *Combustion and Flame*, 34: 285 – 301, 1979.
 103. Bray, K. N. C., Libby, P. A. and Moss, J. B. , "Flamelet Crossing Frequencies and Mean Reaction Rates in Premixed Turbulent Combustion", *Combustion Science and Technology*, 41: 143 – 172, 1984.
 104. Bray, K. N. C. and Libby, P. A., "Passage Times and Flamelet Crossing Frequencies in Premixed Turbulent Combustion", *Combustion Science and Technology*, 47: 253 – 274, 1986.
 105. Bigot, P., Champion, M. and Garreton-Bruguières, D., "Modeling a Turbulent Reactive Flow with Variable Equivalence Ratio: Application to a Flame Stabilized by a two Dimensional Sudden Expansion", *Combustion Science and Technology*, 158: 299 – 320, 1999.
 106. Bray, K. N. C., Domingo, P. and Vervisch, L., "Role of the Progress Variable in Models for Partially Premixed Turbulent Combustion", *Combustion and Flame*, 141: 431 – 437, 2005
 107. Libby, P. A. And Williams, F. A., " A presumed Pdf analysis of partially premixed turbulent combustion", *Combustion Science and Technology*, 161: 351 - 390, 2000.
 108. Ribert, G., Champion, M. and Plion, P., "Modeling Turbulent Reactive Flows with Variable Equivalence Ratio: Application to the Calculation of a Reactive Shear Layer", *Combustion Science and Technology*, 176: 907 – 923, 2004.

109. Robin, V., "Contribution à la Modélisation des Ecoulements Turbulents Réactifs Partiellement Prémélangés", Thèse de doctorat de l'université de Poitiers, 2007.
110. Ribert, G., Champion, M., Gicquel, O., Darabiha, N. and Veynante, D., "Modeling nonadiabatic turbulent premixed reactive flows including tabulated chemistry", *Combustion and Flame*, 141: 271 - 280, 2005
111. Robin, V., Mura, A., Champion, M. and Plion, P., "A multi Dirac presumed PDF model for turbulent reactive flows with variable equivalence ratio", *Combustion Science and Technology*, 178(10-11): 1843 - 1870, 2006.
112. Fernandez-Tarrazo, E., Sanchez, A. L., Liñàn, A. and Williams, F. A., "A Simple One Step Chemistry Model for Partially Premixed Hydrocarbon Combustion", *Combustion and Flame*, 147: 32 - 38, 2006.
113. Champion, M. and Libby, P. A., "The Influence of a Thermally Active Wall on Premixed Turbulent Combustion", *Combustion Science and Technology*, 175: 2015: 2060, 2003.
114. Bray, K. N. C., Champion, Libby, P. A. and Swaminathan, N., "Finite Rate Chemistry and Presumed PDF Models for Premixed Turbulent Combustion", *Combustion and Flame*, 146: 665 - 673, 2006
115. Bray, K. N. C., Libby, P. A., Masuya, G. and Moss, J. B. , "Turbulence Production in Premixed Turbulent Flames", *Combustion Science and Technology*, 25: 127 - 140, 1981.
116. Libby, P.A. and Bray, K.N.C., "Countergradient Diffusion in Premixed Turbulent Flames", *AIAA journal* ,19(2), 205-213, 1981
117. Shepherd, I.G., Moss, J. B. and Bray, K. N. C., "Turbulent Transport in Confined Premixed Flame", 19th Symposium (International) on Combustion/ The Combustion Institute, Pittsburg, 423 - 431, 1982.
118. Masuya, G. and Libby, P.A., "Non Gradient Theory for Oblique Turbulent Flame with Premixed Reactants", *AIAA journal* ,19, 1590- 1599, 1981
119. Veynante, D., Trouvé, A., Bray, K.N.C and Mantel, T., "Gradient and Countergradient Scalar Transport in Turbulent Premixed Flames", *Journal of fluid mechanics*, 332: 263-293, 1997.
120. Neche, A., Youbi, Z. and Renane, R., "Modeling and Numerical Simulation of Turbulent Premixed Flames Impinging Onto a Wall", *International Journal of Mechanics and Energy*, Vol. 5 issue 1: 20 -34, 2017.
121. Trouvé, A., Veynante, D., Bray, K.N.C and Mantel, T., "The Coupling Between Flame Surface Dynamics and Species Mass Conservation in Premixed Turbulent Combustion", In: Center for Turbulence Research, editor. *Proceedings of*

- the summer program, Stanford CTR : 95-124, 1994.
122. Rutland, C. and Cant, R. S., "Turbulent Transport in Premixed Flame", In: P. Moin, W. C. Reynolds editors. Studying Turbulence Using Numerical Databases, Stanford CTR : 75-94, 1994.
 123. Launder, B.E,"Heat and Mass Transfert in Turbulence", Topics in Applied Physics, 12 P. Bradshaw Ed., Springer Verlag, 1976.
 124. Mura, A., Robin, V. and Champion, M., " Modeling of Scalar Dissipation in Partially Premixed Turbulent Flames", Combustion and Flame, 149: 217 - 224, 2007.
 125. Robin, V., Mura, A., Champion, M., Degardin, O., Renou, B. and Boukhalfa, M., " Experimental and Numerical Analysis of Stratified Turbulent V- Shaped Flames", Combustion and Flame, 153: 288 - 315, 2008.
 126. Archambeau, F., Nehitoua, N. And Sakiz, M., "Code Saturne: A finite volume code for turbulent flows", International Journal of Finite Volumes, 1: 1-62, 2004.
 127. Lachaux, T., "Etude des effets de la haute pression sur la structure et la dynamique des flammes turbulentes de prémélange pauvre de méthane-air", Thèse de doctorat des sciences appliquées, Université d'Orléans, 2004.
 128. Pope, S. B., "Pdf Method for Turbulent Reacting Flows", Progress in Energy and Combustion Science, 11: 119 – 195, 1985.

NOMENCLATURE

- A : coefficient directeur de la droite d'équilibre dans l'espace (ξ, Y)
 B, K : coefficient pré-exponentiel
 C_μ : constante de modélisation $C_\mu = 0.09$
 C_γ : constante de modélisation
 $C_{p,i}$: chaleur massique de l'espèce i
 $C_{p,m}$: chaleur massique du mélange
 d : coefficient directeur de la droite des fluctuations dans l'espace
 D : diffusivité moléculaire des espèces chimiques
 D_a : nombre de Damköhler
 E_a : énergie d'activation
 h : enthalpie massique
 k : énergie cinétique de turbulence
 K_a : nombre de Karlovitz
 L_e : nombre de Lewis
 l_T : échelle intégrale de turbulence
 M_i : masse molaire des espèces i
 M_m : masse molaire du mélange
 P : PDF au sens de Reynolds
 \tilde{P} : PDF au sens de Favre
 p : pression
 R : constante des gaz parfaits
 S_L : vitesse de propagation d'une flamme prémélangée laminaire plane
 t : temps
 T : température
 T_a : température d'activation
 T_0 : température dans les conditions standards
 T^* : rapport de la température sur la masse molaire $T^* = T / W$

- u_k : composantes de la vitesse
 x, y, z : coordonnées cartésiennes de référence
 Y : fraction massique des espèces chimiques

Lettres grecques

- α, β, γ : paramètres de la PDF
 δ_L : épaisseur d'une flamme prémélangée laminaire non étirée
 δ_R : épaisseur de la zone réactive dans la flamme prémélangée laminaire plane
 ε : taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente k
 ε_Y : taux de dissipation de Y
 ε_ξ : taux de dissipation de ξ
 $\varepsilon_{Y\xi}$: taux de dissipation
 λ : conductivité thermique
 ν : viscosité moléculaire
 ξ : fraction de mélange
 ρ : masse volumique du mélange
 σ_T : nombre de Schmidt turbulent ($\sigma_T = 0.7$)
 τ_T : échelle intégrale du temps turbulent $\tau_T = k / \varepsilon$
 τ_Y : échelle intégrale du temps scalaire $\tau_Y = \widetilde{Y}^{n^2} / \widetilde{\varepsilon}_Y$
 τ_ξ : échelle intégrale du temps scalaire $\tau_\xi = \widetilde{\xi}^{n^2} / \widetilde{\varepsilon}_\xi$
 $\tau_{Y\xi}$: échelle intégrale du temps scalaire $\tau_{Y\xi} = \widetilde{Y}^n \widetilde{\xi}^n / \widetilde{\varepsilon}_{Y\xi}$
 τ_c : échelle intégrale du temps chimique
 Φ : richesse du mélange
 ω : taux de production chimique

Indices :

comb	: Fait référence au combustible
L	: Fait référence à la flamme laminaire
ox	: Fait référence à l'oxydant
p	: Fait référence aux gaz brûlés
NR	: contribution réactive ou flammelette
R	: contribution non réactive ou non flammelette
r	: Fait référence aux gaz frais
st	: conditions stœchiométriques
T	: Fait référence à une échelle intégrale de turbulence

Exposants :

'	: fluctuations au sens de Reynolds
"	: fluctuations au sens de Favre
max	: valeur maximum
min	: valeur minimum

Abréviations et acronymes :

BML	: modèle de Bray Moss Libby
CFD	: Computational Fluid Dynamics
DNS	: Direct Numerical Simulation
EBU	: modèle Eddy Break Up
LES	: Large Eddy Simulation
LW	: modèle Libby Williams
LW-P	: modèle Libby Williams-Poitiers
PDF	: Probability Density Function

RANS : Reynolds Averaged Numerical Simulation

URANS : Unsteady Reynolds Averaged Numerical Simulation

Autres:

$|q|$: norme du vecteur q

\bar{q} : moyenne de Reynolds de la quantité q

\tilde{q} : moyenne de Favre de la quantité q

$\langle \vec{n}, \vec{x}_i \rangle$: cosinus de l'angle entre les vecteurs unitaires \vec{n} et \vec{x}_i