

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

Université SAAD DAHLEB ,Blida
Faculté Des Sciences De l'ingénieur



Département d'Aéronautique

Mémoire

En vue de l'obtention du diplôme
D'Ingénieur d'état en Aéronautique

Option : Propulsion

Thème soutenu

Modélisation et simulation des flammes pauvres

Travail réalisé par :

BELABED Ali et HADDAD Hocine

Dirigé par : Mr. CHEGRANI Ahmed

PROMOTION: 2010

Résumé

Ce travail a pour objectif la présentation de cinq simulations de flammes pauvres, trois de prémélange et deux autres de diffusion dans différentes configurations de chambres de combustion. Cette étude est réalisée afin de visualiser et de déterminer l'évolution des paramètres de combustion ; température ; vitesse de la flamme ; évolution des fractions massiques des réactifs, détermination des taux de production des espèces polluants, en prenant en compte les facteurs agissants sur ces paramètres, l'effet de la chaleur spécifique, la richesse et la température de l'air. Le premier cas est une simulation d'une flamme avec un corps non profilé dont le modèle de turbulence est $k-\varepsilon$ RNG, Le deuxième cas est une simulation de la combustion du propane avec l'air où l'effet de la chaleur spécifique et la richesse sont mis en évidence, le troisième cas, c'est combustion prémélangée avec injection d'air, où l'effet de la déformation de la flamme est montré. Dans les deux derniers cas nous avons simulé la flamme de diffusion, ils ont pour but la détermination de l'effet de la température de l'air sur la production de polluant. Les résultats des simulations ont été comparés avec ceux de l'expérimental où nous avons trouvé des résultats assez similaires pour valider ces derniers.

Abstract

The aim of this work is the presentation of five simulations of lean flames, three of premixing and two others of diffusion, in different configuration from combustion chamber. This study is carried out in order to visualize and to determine the evolution of combustion parameters; temperature; flame velocity; the evolution of the mass fractions of the reagents, determination of the production rates of the species pollutants. As we also determined the factors acting on these parameters, the effect of the specific heat, the richness and the air temperature. In the first case we carried out a simulation of a flame with a bluff body, the turbulence model used is $k-\varepsilon$ RNG, in the second case we simulated the combustion of propane with the air where we determined the effect of the specific heat, the richness on combustion the third case is premixed combustion with injection of air, where the deformation of the flame is shown and in the last both cases we have simulate the diffusion flame in which we determined the effect of the temperature of the air on the production of pollutant. The results of simulations were compared with those of experimental or we found results enough similar to be validate.

Remercîments

*A*pres l'accomplissement de ce travail, nous tenons à remercier ALLAH qui nous a aidé et guidé à dépasser toutes les difficultés et à supporter la charge et la pression de ce travail.

*N*ous tenons à prononcer nos sincères salutations et remerciements à notre promoteur Mr CHEGRANI Ahmed, de nous avoir proposé ce sujet, et nous le remercions infiniment pour sa disponibilité, ses conseils et ses recommandations.

*N*ous remercions les membres de jury, d'avoir accepté d'examiner et de juger notre travail.

*S*ans oublier nos amis de FAC, avec lesquels nous avons effectué notre cursus universitaire et à ceux que sont loin de nous mais avec nous avec leurs encouragements et invocations.

Hocine et Ali

Dédicaces

Je dédie ce travail,

A mon cher père et ma tendre mère.

A mes deux sœurs.

A mon frère AHMED que dieu l'aide dans son travail.

Au petit Arezki Wassim que dieu le protège.

A tous mes amis, je ne citerai pas de nom de crainte d'en oublier certains.

Enfin à tous les gens qui me respectent.

.HOCINE.

Dédicace

Je dédie ce modeste travail,

*A mon père chaïb **Salah**,*

*A ma chère mère **Fatima Zohra**,*

*A mon grand frère **Rafik** et son épouse,*

*A mon frère **Naim** à qui je souhaite un bonheur éternel,*

*A mon petit frère **Mohamed Lyes**,*

*A mon binôme **Haddad Hocine** et sa petite famille ainsi qu'au petit*

***Arezki Wassim**,*

*A tous ceux qui nous ont aidés à dépasser et à supporter toutes les
difficultés et obstacles le long de ce parcours,*

*A mes chers amis **Benchâabane Mohamed Lyamine**,*

*Et **Rihane Sofiane**,*

*A mes frères ; **Chelbi Nacereddine**, **Adila Hossem**, **Ayad Zakaria**,
Layadi Lamine sans oublier **Djelale Lamine**,*

*A mes amis ; **Fares**, **Abdelwahab**, **Abdallah** et **Smail***

A toute la famille ; petits et grands,

*Et a tous ceux qui aiment **ALI***

Table de matières

Résumé

Remercîment

Tables de matières

Nomenclature

Introduction

Chapitre 1

Généralité sur les mélanges réactifs

Généralités	1
1.1 Combustion.....	3
1.2 Equations conservatrices pour un écoulement réactif.....	4
1.3 Thermochimie	5
1.4 Equation d'état des gaz parfaits	7
1.5 Cinétique chimique.....	10
1.6 Equation de conservation de masse et des espèces	13
1.7 Transport moléculaire des espèces et de chaleur	15
1.8 Equation de conservation de la quantité de mouvement	16
1.9 Conservation de l'énergie	17
1.10 La richesse	18
1.11 Conclusion du chapitre.....	20

Chapitre 2

Flamme laminaire de prémélange et de diffusion

2.1 Notion de flamme	21
2.2 Intérêt de la flamme prémélangée	22
2.3 Structure de la flamme prémélangée.....	23
2.4 Vitesse de la flamme prémélangée	25
2.4.1 Model de Zeldovich.....	26

2.4.2	Epaisseur de flamme laminaire	27
2.5	Flamme laminaire de diffusion	30
2.5.1	Stabilisation d'une flamme de diffusion.....	32
2.5.2	Paramètres de la flamme de diffusion	33
2.6	Instabilité de la flamme laminaire	36
2.6.1	Instabilités dues aux forces de gravité.....	36
2.6.2	Effet de la convection naturelle sur le battement du front de flamme....	37
2.6.3	Effets de parois.....	37
2.6.4	Instabilités dues aux effets hydrodynamiques	38
2.6.5	Instabilités dues aux effets thermo-diffusifs	41
2.7	Conclusion	42

Chapitre 3

Flamme turbulente

3.1	Description de la turbulence	44
3.1.1	Caractéristiques de la turbulence	44
3.1.2	Echelles caractéristique de la turbulence	47
3.1.2.1	Échelle caractéristique	48
3.1.2.2	Échelle de Tylor	49
3.1.2.3	Échelle de Kolmogorov	49
3.2	Equations RANS (Reynolds-Averaged Navier–Stokes)	50
3.2.1	Equation du bilan moyen.....	50
3.2.2	Tenseur de Reynolds	51
3.2.3	Flux d'espèce et d'enthalpie	52
3.3	Model classique de turbulence pour le tenseur de Reynolds	52
3.3.1	Model zéro équation	52
3.3.2	Model à une équation : Prandtl-Kolmogorov	53

3.3.3	Modèle à deux équations model: $k - \varepsilon$	53
3.4	Simulation Numérique Directe	53
3.4.1	Rôle du DNS dans l'étude de la combustion turbulente	54
3.4.2	Méthode numérique appliquée en DNS	54
3.5	Simulation aux grandes échelles	55
3.6	Notion de flamme turbulente prémélangée	57
3.6.1	Vitesse de flamme turbulente	57
3.6.2	Les différents régimes de combustion turbulente prémélangée	58
3.6.2.1	Les flammes minces plissées	61
3.6.2.2	Les flammes plissées	61
3.6.2.3	Les flammes épaissies	62
3.7	Modélisation de la combustion turbulente	63
	Application de la simulation aux grandes échelles sur la combustion	63
3.7.1	Equation LES	63
3.7.2	Model de G-équation	66
3.7.3	L'épaisseur de la flamme artificielle	68
3.8	Méthode numérique	68
1.	Description qualitative des phénomènes physiques	68
2.	Modélisation	68
3.	Analyse mathématique	70
5.	Analyse numérique	70
3.8.1	Méthodes numériques appliquées	70
	Différences finies	71
	Eléments finis	71
	Volumes finis	71

Chapitre 04

Émission des polluants et instabilité de combustion

4.1	Emission des polluants	74
4.2	Effets de la pollution	74
4.3	Production des polluants	75
4.4	Méthode de réduction des polluants	76
4.5	Instabilités de combustion	77
4.6	Principe des instabilités	77
4.7	Classification des instabilités de combustion	81
	Critère de Rayleigh	84
4.8	Les méthodes de contrôle	85
	4.8.1 Le contrôle actif	85
	4.8.2 Le contrôle passif	86
4.9	Conclusion	87

Chapitre 5

Simulation Numérique Des Flamme Pauvre

5-1	Simulation d'une flamme prémélangée instationnaire turbulente ...	89
	a- La géométrie	89
	b- Le maillage	90
	c- Conditions aux limites	90
	d- Résultats et comparaison	91
5.2	Simulation d'une flamme prémélangée stationnaire turbulente ...	92
	a- La géométrie	92

b- Le maillage	92
c- Conditions aux limites	93
d- Solveur	93
d- Résultats et comparaison	107
5.3 Simulation d'une flamme prémélangée avec injection d'air	108
a- La géométrie	108
b- Le maillage	108
c- Conditions aux limites	109
d- Résultats	109
5.4 Simulation d'une flamme turbulente de diffusion	113
a- La géométrie	113
b- Le maillage	114
c- Conditions aux limites	114
d- Résultats	114
d- Résultats	114
e- Interprétation des résultats	114
5.5 Simulation d'une flamme dans une chambre de turboréacteur ...	117
a- La géométrie	117
b- Le maillage	118
c- Conditions aux limites	118
d- Résultat et interprétation	118
Conclusion	119
Annexes.....	120
Références bibliographiques	121

Liste des figures et des tableaux

Figure 2.1 : *configuration de la flamme de prémélange et de diffusion*

Figure 2.2 : *structure de la flamme prémélangée.*

Figure 2.3 : *structure de la flamme caractérisée par la variation de la température T , de la dérivée première dT/dx de la dérivée seconde dT^2/dx^2 .*

Figure 2.4 : *structure de la flamme de diffusion.*

Figure 2.4.a : *flamme de diffusion instationnaire et non étirée.*

Figure 2.4.b : *flamme de diffusion stationnaire et étirée.*

Figure 2.5 : *Stabilisation d'une flamme de diffusion sur la lèvre d'un brûleur.*

Figure 2.6 : *Stabilisation d'une flamme de diffusion suspendue, formation d'une flamme triple.*

Figure 2.7 : *mélange pur sans réaction entre le carburant et le comburant.*

Figure 2.8 : *Instabilité due aux forces de gravités.*

Figure 2.9 : *Effet de la convection naturelle sur le battement du front de flamme.*

Figure 2.10: *Modification des lignes de courant produite par le plissement du front de flamme, en accord avec la théorie de **Darrieus** et **Landau**.*

Figure 2.11 : *Effet stabilisant et déstabilisant du nombre de **Lewis**.*

Figure 3.1 : *Spectre d'énergie de la turbulence.*

Figure 3.2 : *différentes simulation numériques.*

Figure 3.3 : *Diagramme de combustion prémélangée.*

Figure 3.4 : *flamme mince plissées.*

Figure 3.5 : *flamme épaissie.*

Figure 3.6 : *flamme plissée.*

Figure 3.7 : *modèle G équations.*

Figure 3.8 : *flamme épaissie artificiellement.*

Figure 4.1 : *émission de NO_x et de CO en fonction de la richesse.*

Figure 4.2 : *schéma de principe de la boucle d'instabilité.*

Figure 4.3 : *classification des types d'instabilités selon leur fréquence.*

Figure 4.4 : *contrôle actif en boucle ouverte a) et fermée b).*

Figure 4.5 : *contrôle passif :
a) augmentation de mélange et
b) résonateurs de Helmholtz.*

Figure 5.1 : *chambre de combustion avec un corps non profilé.*

Figure 5.2 : *maillage de la chambre de combustion.*

Figure 5.3 : *résultats des contours iso- vitesse.*

Figure 5.4 : *géométrie du banc d'essai ORACLES.*

Figure 5.5 : *maillage de la géométrie.*

Figure 5.6 : résultats des contours isothermes.

Figure 5.7 : résultats des vecteurs de vitesse dans les quatre stations de mesure.

Figure 5.8 : vitesse radiale (figure a) résultat de la simulation (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.9 : vitesse axiale (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.10 : température totale, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.11 : énergie cinétique turbulente, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.12 : vitesse radiale (figure a) résultat de la simulation (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.13 : vitesse axiale (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.14 : température totale, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.15 : énergie cinétique turbulente, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.16 : vitesse radiale (figure a) résultat de la simulation (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.17 : vitesse axiale (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.18 : énergie cinétique turbulente, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.19 : résultats de la simulation de la température statique.

Figure 5.20 : résultats de la simulation de chaleur massique C_p .

Figure 5.21 : vecteur d'évolution de la fraction massique de NO.

Figure 5.22 : vecteur d'évolution de la fraction massique de CO.

Figure 5.23 : effet de la variation de la richesse sur la température totale.

Figure 5.24 : évolution de la température avec la richesse.

Figure 5.25 : effet de la variation de la richesse sur le champ de vitesse.

Figure 5.26 : évolution de la vitesse avec la richesse.

Figure 5.27 : effet de la variation de la richesse sur la production de CO.

Figure 5.28 : évolution de la production de CO avec la richesse.

Figure 5.29 : évolution de la fraction massique de no avec la richesse.

Figure 5.30 : La Géométrie.

Figure 5.31 : Le maillage.

Figure 5.32 : Le contour isotherme.

Figure 5.33 : évolution de la température.

Figure 5.34 : contours iso- vitesse.

Figure 5.35 : évolution de la vitesse.

Figure 5.36 : contours d'évolution de la fraction massique de ch_4 .

Figure 5.37 : fraction massique de ch_4 .

Figure 5.38 : évolution de la fraction massique de O_2 .

Figure 5.39 : évolution de la fraction massique d' O_2 .

Figure 5.40 : dimensions de la chambre de combustion **HARWELL**.

Figure 5.41 : maillage de la chambre de combustion **HARWEL**.

Figure 5.42 : contours isothermes.

Figure 5.43 : contours iso-vitesses.

Figure 5.44 : La température non adiabatique dans la tranche d'enthalpie adiabatique.

Figure 5.45 : fraction massique du ch_4 (figure a) simulée, (figure b) expérimentale.

Figure 5.46 : fraction massique du O_2 (figure a) simulée, (figure b) expérimentale.

Figure 5.47 : dimensions de la chambre de combustion.

Figure 5.48 : maillage de la chambre de combustion.

Figure 5.49 : température statique, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.50 : température statique dans la chambre.

Figure 5.51 : fraction massique de kérosène.

Figure 5.52 : fraction massique de l'oxygène.

Figure 5.53 : fraction massique du dioxyde de carbone.

Figure 5.54 : fraction massique du monoxyde de nitrogène.

Figure 5.55 : fraction massique du monoxyde de nitrogène précoce.

Figure 5.56 : contours du monoxyde de nitrogène, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.57 : contours du monoxyde de nitrogène, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Figure 5.58 : contours du monoxyde de nitrogène, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Liste des tableaux

Tableau 2.1 : valeurs typiques de α et β .

Tableau 4.1 : Effet de la phase sur les instabilités.

Tableau 5.1 : conditions aux limites.

Nomenclature

ρ : masse volumique	R : constante universelle des gaz parfait
ρ_k : masse volumique de l'espèce k	P : pression du mélange
m : masse totale	P_k : pression de l'espèce k
m_k : masse de l'espèce k	$v_{i,k}$: vitesse d'ensemble de l'espèce k
V : volume	u_i : vitesse moyenne massique
T : température	u_i^* : vitesse moyenne molaire
Y_k : fraction massique	e_c : densité massique d'énergie cinétique
X_k : fraction molaire	e_{sk} : densité massique d'énergie sensible
N : nombre d'espèces	h_{sk} : densité massique d'enthalpie sensible de l'espèce k
C_p : chaleur spécifiques à pression constante	h_k : enthalpie sensible chimique
C_v : chaleur spécifique à volume constant	e_k : énergie sensible chimique
C_{vk} : chaleur spécifique à volume constant de l'espèce k	e_s : énergie sensible du mélange
C_{pk} : chaleur spécifiques à pression constante de l'espèce k	h_s : enthalpie sensible du mélange
$\Delta h_{f,k}^0$: enthalpie de formation standard de l'espèce k	e : énergie sensible chimique du mélange
M_k : masse molaire de l'espèce k	h : enthalpie sensible chimique du mélange
M : masse du mélange	E : énergie totale du mélange
n_k : nombre de mole de l'espèce k	H : enthalpie totale du mélange
C_k : concentration de l'espèce k	E_t : énergie totale chimique du mélange
C : concentration du mélange	H_t : enthalpie totale chimique du mélange
r_k : constante des gaz de l'espèce k	
r : constante des gaz du mélange	

γ : coefficient isentropique	λ : conductivité thermique du mélange
s : entropie massique du mélange	δ_{ij} : symbole de <i>KRONECKER</i>
s_k : entropie massique de l'espèce k	τ_{ij} : tenseur de viscosité
ν_{kj}^f, ν_{kj}^r : coefficients stœchiométriques de l'espèce k	$f_{k,j}$: force de volume
\mathcal{Q}_j^f : taux de réaction direct	Q : source de chaleur
\mathcal{Q}_j^r : taux de réaction inverse	q_i : flux d'énergie
A_{fj} : constante pré-exponentielle	λ : coefficient d'excès d'air
G : enthalpie libre à pression standard	μ : dosage
E_j : énergie d'activation	μ_S : dosage stœchiométrique
$\dot{\omega}_{kj}$: taux de production de l'espèce k	S_L : vitesse laminaire de flamme
ΔS_k^0 : variation de l'entropie	Le : Le nombre de Lewis.
ΔH_k^0 : variation de l'enthalpie	D_{th} : Le coefficient de diffusion pour le flux de conduction thermique
$V_{d,k}$: vitesse de diffusion de l'espèce k	τ_R : temps chimique.
D_k : coefficient de diffusion	β : le nombre de <i>ZELDOVICH</i>
V_i^c : vitesse de correction	δ_{L0} : épaisseur de la flamme laminaire
λ : coefficient de diffusion de chaleur	δ_R : épaisseur de la zone de réaction
Le_k : nombre de <i>LEWIS</i>	Z_{st} : fraction stœchiométrique du mélange
P_r : nombre de <i>PRANDTL</i>	$z(x)$: fraction du mélange
Sc_k : nombre de <i>SCHMIDT</i>	x : rapport de dissipation scalaire
ν : viscosité cinématique	Ω_F : rapport de réaction intégral
μ : viscosité dynamique	F_r : nombre de <i>FROUDE</i>
λ_k : conductivité thermique de l'espèce k	σ : coefficient de dispersion

I : intensité de turbulence

Re : nombre de *REYNOLDS*

η_k : Longueur de *KOLMOGOROV*

ε : taux de dissipation de l'énergie turbulente

τ_k : temps caractéristique de *KOLMOGOROV*

μ_t : viscosité turbulente

k : énergie cinétique turbulente

$|\tilde{\mathcal{S}}|$: tenseur de contrainte

l_m : longueur du mélange

S_c : vitesse de combustion

Da : nombre de *DAMKÖHLER*

Ka : nombre de *KARLOVITZ*

Tenseurs

$(\bar{\mathbf{f}} ; \bar{\mathbf{g}} ; \bar{\mathbf{h}})^I$: contribution non visqueuse.

$(\bar{\mathbf{f}} ; \bar{\mathbf{g}} ; \bar{\mathbf{h}})^V$: contribution visqueuse.

$(\bar{\mathbf{f}} ; \bar{\mathbf{g}} ; \bar{\mathbf{h}})^t$: contribution sous maille.

$\bar{j}_{i,k}$: tenseur de diffusion des espèces.

\bar{q}_i : flux de chaleur

$\bar{\tau}_{ij}^t$: tenseur de contraintes turbulentes

\bar{f} : valeur moyenne

\tilde{f} : moyenne de FAVRE

f' : fluctuation

Introduction

Introduction

La combustion est depuis plus de deux siècles, un sujet d'étude constant. En effet, ce phénomène est à l'origine de la majeure partie de l'énergie produite dans le monde. Plus de soixante dix pourcent de l'énergie est produite par extraction de l'énergie chimique de combustibles. La part restante se répartit entre le nucléaire et l'hydroélectrique. Dans le domaine de la propulsion, la quasi-totalité des moyens de transport utilise la combustion, de façon directe (moteurs) ou indirecte (l'électricité des trains est produite par combustion), vue sa large utilisation des études sur l'optimisation et la compréhension du phénomène de combustion sont en constante évolution.

La combustion dans les turboréacteurs, les turbines à gaz des centrales électriques, les moteurs à pistons, les brûleurs industriels peut être classée de différentes façons. La façon la plus commune est d'observer comment la zone de réaction est alimentée en combustible. La combustion peut alors être classée en trois catégories: la combustion prémélangée, la combustion non prémélangée et la combustion partiellement prémélangée. En combustion turbulente non prémélangée, le fuel et l'oxydant sont injectés séparément et c'est le mélange turbulent qui contrôle la combustion. La combustion non prémélangée s'observe en pratique dans les moteurs Diesel et dans de nombreuses turbines à gaz industrielles. Dans les moteurs Diesel, le fuel est injecté sous forme de spray liquide et s'évapore au contact de l'air chaud à haute pression. L'air peut être préchauffé ou dilué par les gaz brûlés dans la zone de combustion. Au contraire, en combustion prémélangée les réactifs sont parfaitement mélangés avant de brûler. Dans ce cas, le taux de réaction est contrôlé par la propagation du front de flamme des gaz brûlés vers les gaz frais.

Enfin, la combustion partiellement prémélangée peut-être observée lorsque le fuel et l'oxydant sont injectés séparément et ont le temps de se mélanger en partie avant de brûler. La combustion partiellement prémélangée peut-être choisie pour faciliter la stabilisation de la flamme, lorsque les réactifs se mélangent aux gaz brûlés dans la zone de recirculation.

En outre, c'est une des stratégies choisies pour réduire la production de NOx dans le cas par exemple, de la combustion stratifiée. Dans les chambres de combustion aéronautiques le carburant est injecté sous forme liquide puis s'évapore et se mélange à l'air sous l'effet de la turbulence avant de brûler. Du fait que le prémélange n'est que partiel, on observe les deux types de combustion (prémélange et diffusion), plusieurs applications et études sur ce phénomène sont le sujet d'une vaste recherche numérique et expérimentale.

Il y a vingt ans, des formules empiriques et des études expérimentales étaient utilisées pour l'observation du phénomène de la combustion. De nos jours le développement nécessite des résultats de plus en plus précis et rapides, c'est pourquoi les industriels prennent en compte les investigations réalisées avec les codes CFD dans lesquels le plus souvent des modèles doivent être implémentés pour étudier la combustion turbulente. La modélisation et la simulation numérique sont des outils indispensables pour comprendre les problèmes complexes. Un modèle est une façon simplifiée de décrire et prédire les phénomènes physiques. Pour rendre possible la production de systèmes réactifs avancés, des études préliminaires incluant des modèles simplifiés doivent être menées. La mécanique des fluides numérique a atteint aujourd'hui un degré de maturité suffisant pour être intégrée dans les processus industriels de conception des chambres de combustion et de prédiction des températures atteintes dans ces enceintes. Aujourd'hui, l'utilisation de ces outils est toutefois encore loin d'être optimale.

La réduction de coût et de délais de conception, a permis d'introduire la simulation numérique au cœur du processus de conception. Le succès de cette introduction tient tant à l'amélioration de la qualité des modèles et de leur capacité prédictive qu'à l'augmentation des capacités de calcul. Il est dorénavant capital de disposer des outils de simulations à la fois les plus avancés mais aussi les mieux adaptés aux problématiques rencontrées. La percée de codes de calcul d'écoulement fluide est, sur ce point, édifiante. En particulier l'approche RANS permet de résoudre l'écoulement moyen dans des géométries quelconques à un coût de calcul modeste. Néanmoins, l'aspect stationnaire de l'approche a montré ses limites dans son incapacité à pouvoir capturer des phénomènes comme les instabilités de combustion.

CHAPITRE 1

Généralités sur les mélanges
réactifs

Chapitre 1

Généralités sur les mélanges réactifs

En combustion les gaz en réaction sont constitués d'un mélange non-isotherme de multiples composants (hydrocarbures, oxygène, eau, dioxyde de carbonique, etc.) qui doivent être étudiés séparément. Les données thermodynamiques sont également plus complexes qu'en dynamique des fluides classique parce que la chaleur spécifique des gaz réactifs change de manière significative avec la température et la composition.

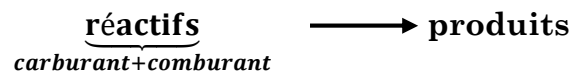
Une modélisation spécifique des taux de réaction des espèces réactifs est obligatoire pour mieux comprendre le mécanisme de la combustion, sachant que les gaz en combustion est un mélange de plusieurs substances, il existe le phénomène de transport de chaleur, des espèces et de viscosité qui exige une grande attention vue la présence des coefficients de transport qui doivent être pris en considération. Pour l'étude de la combustion des termes additionnels sont introduits aux équations de NAVIER-STOCKS, car cette dernière implique plusieurs espèces réactives et plusieurs réactions chimiques élémentaires.

1.1 La combustion

La combustion est une réaction chimique généralement exothermique autonome qui a tendance de s'accélérer brutalement accompagnée d'augmentation de la température, d'un dégagement de chaleur, d'émission de rayonnement, et qui peut être lente ou vive. Dans une réaction de combustion, on peut avoir une grande augmentation de la pression qui est due à l'expansion du milieu réactionnel qui est directement liée aux conditions de confinement et au dégagement de chaleur, une accélération brutale de la réaction de combustion peut conduire à la formation de la flamme.

La combustion est définie comme une réaction d'oxydoréduction, le combustible est le réducteur (hydrogène, hydrocarbures etc....) et le comburant est l'oxydant (oxygène, ozone, chlore etc....), la réaction de combustion est une combinaison de plusieurs réactions élémentaires dégageant ainsi une quantité de chaleur dépendante du pouvoir calorifique du combustible et des produit combustion (H₂O, CO₂, NO_x, CO, C_nH_m).

Parmi les combustibles les plus utilisés, les hydrocarbures sont largement employés dans les secteurs industriels l'exemple suivant d'une combustion stœchiométrique d'un hydrocarbure n'est pas très explicite dans le sens chimique vue l'existence d'une série de réactions élémentaires et des pertes thermiques par rayonnement, convection et conduction mais pour déterminer un bilan grossier de masse et d'énergie.



Un processus chimique de combustion est souvent écrit sous la forme d'une réaction globale, ou le cas idéal est techniquement loin d'être applicable.

1.2 Equations conservatrices pour un écoulement réactif

La combustion est un processus complexe car elle implique plusieurs espèces réactives selon nombreuses réactions chimiques. L'application des équations de NAVIER-STOCKS est possible sur un écoulement multi espèces et multi réactionnels, mais elle exige quelques termes additionnels. Les trois grandes différences entre un écoulement réactif et un écoulement non-réactif sont les suivantes :

- Un écoulement réactif est un mélange non-isotherme multi-espèces (hydrocarbures, oxygène, eau, dioxyde de carbone, etc.) ce qui doit être étudié séparément. Les lois thermodynamique sont également plus complexes qu'en dynamique des fluides classique car les chaleurs massiques dans un écoulement réactif changent de manière significative avec la température et la composition.

- Les espèces réagissent chimiquement et le taux auquel ces réactions ont lieu exige une modélisation spécifique.
- Comme l'écoulement réactif est un mélange de gaz, les coefficients de transport (diffusivité de la chaleur, diffusion d'espèces, viscosité, etc.) sont mis en évidence et exigent une attention particulière.

Dans un problème de combustion tridimensionnel compressible les variables primitives sont les suivantes :

- La densité $\rho = m/V$.
- Les trois composantes de la vitesse notée u_i .
- Une variable de l'énergie, la pression, l'enthalpie ou la température T .
- La fraction massique Y_k de N espèces réactifs.

Le passage d'un écoulement non réactif à la combustion nécessite la résolution de $N+5$ équations au lieu de 5 équations. Les schémas chimiques introduisent un grand nombre d'espèces qui dépasse 50 pour un simple hydrocarbure, c'est le premier problème significatif pour un calcul de combustion et l'augmentation du nombre d'équation de conservation à résoudre.

1.3 Thermochimie

Dans un écoulement réactif, il est nécessaire de définir, en plus des variables d'état classiques (pression, température, vitesse) des variables caractérisant la composition du milieu.

On se place dans le cas d'un gaz constitué d'un mélange de N espèces chimiques différentes k . On ne considérera que les gaz auxquels peuvent s'appliquer les deux hypothèses suivantes:

- Loi d'état des gaz parfaits,
- Loi de **Joule** pour les définitions de l'énergie et de l'enthalpie.

Pour définir les grandeurs thermodynamiques du système, on considère un volume de contrôle que l'on peut rendre suffisamment petit pour que toutes les grandeurs intensives y soit uniformes.

On suppose que sur ce volume, les grandeurs suivantes sont connues de façon intuitive:

- Le nombre de mole n_k de l'espèce k ,
- Les masses molaires de M_k l'espèce k ,
- Les capacités calorifiques massiques C_{vk} et C_{pk} de l'espèce k ,
- L'enthalpie de formation standard $\Delta h_{f,k}^0$ de l'espèce k , la vitesse $v_{i,k}$ dans la direction i de l'espèce k , et la température T du mélange.

Certaines de ces grandeurs (n_k, M_k) ne posent effectivement aucun problème. D'autres ($v_{i,k}, \Delta h_{f,k}^0$) bien que souvent considérées comme triviales nécessitent parfois plus de précautions dans leur manipulation. Cet ensemble de grandeurs est suffisant pour définir toutes les propriétés du système considéré. Il permet en outre d'écrire les équations de conservation permettant de calculer l'évolution de l'état du système au cours du temps.

Les grandeurs associées à la quantité de matière du système sont:

Nombre de moles totales dans le volume V :

$$n = \sum_{k=1}^N n_k \quad (1.1)$$

Concentration de l'espèce k:

$$C_k = \frac{n_k}{V} \quad (1.2)$$

Concentration du mélange:

$$C = \sum_{k=1}^N C_k = \frac{n}{V} \quad (1.3)$$

Fraction molaire de l'espèce k:

$$X_k = \frac{n_k}{n} = \frac{C_k}{C} \quad (1.4)$$

Les grandeurs associées à la masse du système sont:

Masse de l'espèce k:

$$m_k = n_k M_k \quad (1.5)$$

Masse totale dans le volume V

$$m = \sum_{k=1}^N m_k \quad (1.6)$$

Masse volumique de l'espèce k

$$\rho_k = \frac{m_k}{V_T} \quad (1.7)$$

Masse volumique du mélange:

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k = \frac{m}{V} \quad (1.8)$$

Fraction massique de l'espèce k:

$$Y_k = \frac{m_k}{m} = \frac{\rho_k}{\rho} \quad (1.9)$$

On a alors:

Masse molaire du mélange:

$$M = \frac{m}{n} = \sum_{k=1}^N X_k M_k = \left(\sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{M_k} \right)^{-1} \quad (1.10)$$

Constante des gaz pour l'espèce k:

$$r_k = \frac{R}{M_k} \quad (1.11)$$

Constante des gaz du mélange:

$$r = \frac{R}{M} = \frac{1}{M} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{M_k} R = \sum_{k=1}^N Y_k r_k \quad (1.12)$$

Notons enfin la relation particulièrement utile:

$$Y_k = \frac{m_k}{m} = \frac{Y_k M_k}{M} \quad (1.13)$$

$$X_k = \frac{n_k}{n} = \frac{Y_k M_k}{M} \quad (1.14)$$

1.4 Equation d'état des gaz parfaits

La définition de la pression du système (dans l'hypothèse d'un gaz parfait) est donnée par l'équation d'état d'un mélange de gaz parfaits suivante :

$$P = \rho \frac{R}{M} T \quad \text{ou} \quad P = nRT \quad (1.15)$$

On peut alors définir la pression partielle de l'espèce k :

$$P_k = PX_k \text{ et } P = \sum_{k=1}^N P_k \quad (1.16)$$

Où $R = 8,3143 \text{ j/mol. }^\circ\text{k}$: est la constante universelle des gaz parfaits.

On en déduit l'équation d'état pour chaque espèce k :

$$P_k V = n_k R T \quad (1.17)$$

A partir de la vitesse d'ensemble $v_{i,k}$ de l'espèce k , on peut définir:

La vitesse moyenne massique du mélange:

$$u_i = \sum_{k=1}^N Y_k v_{i,k} \quad (1.18)$$

La vitesse moyenne molaire du mélange:

$$u_i^* = \sum_{k=1}^N Y_k v_{i,k} \quad (1.19)$$

Ce sont les vitesses auxquelles sont convectées respectivement la masse et la quantité de matière dans le volume de contrôle.

On définit finalement les grandeurs liées à l'énergie du système:

Densité massique d'énergie cinétique:

$$e_c = \frac{1}{2} u_i u_i \quad (1.20)$$

Densité massique d'énergie sensible de l'espèce k :

$$e_{sk} = \int_{T_0}^T C_{vk} dT \quad (1.21)$$

Densité massique d'enthalpie sensible de l'espèce k :

$$h_{sk} = \int_{T_0}^T C_{pk} dt \quad (1.22)$$

Les équations (1.21) et (1.22) constituent les lois de **Joule** : l'énergie et l'enthalpie ne dépendent que de la température. Dans ces équations, il est important de noter que l'intégration se fait à partir de zéro degré **Kelvin** et que la densité massique de l'enthalpie et de l'énergie sont nulles à cette température.

Ce choix a pour conséquence de simplifier l'écriture des équations qui découlent de ces définitions, car il fait disparaître une constante d'intégration.

On introduit alors l'enthalpie standard de formation de l'espèce k . Cette grandeur est dite standard car elle est définie à la pression atmosphérique, mais elle dépend néanmoins de la température. Cependant, pour être cohérent avec le choix de température nulle effectué précédemment, l'enthalpie de formation de chaque espèce k doit être prise à cette même température.

On peut alors définir les grandeurs suivantes:

Enthalpie sensible chimique de l'espèce k :

$$h_k = h_{sk} - \Delta h_{f,k}^0 \quad (1.23)$$

Énergie sensible chimique de l'espèce k :

$$e_k = e_{sk} - \Delta h_{f,k}^0 \quad (1.24)$$

Remarquons que l'introduction d'une énergie standard de formation $\Delta e_{f,k}^0$ n'est pas nécessaire car le choix $T_0 = 0 \text{ } ^\circ K$ implique que $\Delta h_{f,k}^0 = \Delta e_{f,k}^0$. En sommant les définitions précédentes sur les espèces, on obtient les définitions des grandeurs du mélange:

Capacité calorifique à pression constante du mélange:

$$C_p = \sum_{k=1}^N C_{pk} Y_k \quad (1.25)$$

Énergie sensible du mélange:

$$e_s = \sum_{k=1}^N Y_k e_{sk} = e_{sk} = \int_{T_0}^T C_v dT \quad (1.26)$$

Enthalpie sensible du mélange:

$$h_s = \sum_{k=1}^N Y_k h_{sk} = \int_{T_0}^T C_{vk} dt \quad (1.27)$$

Énergie sensible chimique du mélange:

$$e = \sum_{k=1}^N Y_k e_k \quad (1.28)$$

Enthalpie sensible chimique du mélange:

$$h = \sum_{k=1}^N Y_k h_k \quad (1.29)$$

Énergie totale du mélange:

$$E = e_s + e_c \quad (1.30)$$

Enthalpie totale du mélange:

$$H = h_s + e_c \quad (1.31)$$

Énergie totale chimique du mélange:

$$E_t = e + e_c \quad (1.32)$$

Enthalpie totale chimique du mélange:

$$H_t = h + e_c \quad (1.33)$$

Notons enfin les relations utiles suivantes:

$$h_s = e_s + rT = e_s + (P/\rho) \quad (1.34)$$

$$c_{pk} - c_{vk} = r_k \quad (1.35)$$

$$c_p - c_v = r \quad (1.36)$$

$$\frac{c_p}{c_v} = \gamma \quad (1.37)$$

De façon analogue, l'entropie massique du mélange s'exprime en fonction des entropies massiques des espèces chimiques :

$$s = \sum_{k=1}^N Y_k s_k \quad (1.38)$$

La dépendance en température de l'entropie massique fait intervenir l'entropie de formation standard $s_k(T_0, p_{atm})$ de l'espèce k à la température T_0 et à la pression de référence p_{atm} . De façon générale, l'entropie massique s'écrit :

$$s_k = s_k(T_0, p_{atm}) + \int_{T_0}^T \frac{c_{pk}(T)}{T} dT - \frac{R}{M_k} \log \frac{k}{p_{atm}} \quad (1.39)$$

En particulier, si on note $s_k^0 = s_k^0(T, p_{atm})$ l'entropie de l'espèce k à la pression atmosphérique p_{atm} , on a alors la relation suivante :

$$s_k^0 = s_k(T_0, p_0) + \int_{T_0}^T \frac{c_{pk}(T)}{T} dT \quad (1.40)$$

1.5 Cinétique chimique

Dans un mécanisme réactionnel, même arbitrairement complexe, le calcul du taux de réaction d'une espèce chimique est assez simple. Il suffit de tenir compte, de façon simultanée et additive, des effets de chacune des réactions élémentaires qui se produisent, une fois bien sûr que celles-ci sont connues de

façon suffisamment sûre, ce qui est la première difficulté. Le milieu considéré est supposé réactif, Cela se traduit par le fait que chaque espèce peut réagir avec toutes les autres espèces présentes dans le milieu. Le nombre total de réactions chimiques envisageable est noté M . Chaque réaction individuelle sera notée j . Considérons un système chimique de N espèces réagissant par M réactions :



Ou ν_{kj}^r et ν_{kj}^f : sont les coefficients stœchiométriques molaires de l'espèce k dans la réaction j .

La loi de conservation de la masse impose que :

$$\sum_{k=1}^N \nu_{kj}^f M_k = \sum_{k=1}^N \nu_{kj}^r M_k \quad j=1, M \quad (1.42)$$

Et
$$\nu_{kj} = \nu_{kj}^r - \nu_{kj}^f \quad (1.43)$$

La cinétique de cette réaction k est caractérisée par son taux de réaction défini par:

$$\nu_{kj} \mathcal{Q}_j = (\nu_{kj}^r - \nu_{kj}^f)(\mathcal{Q}_j^f - \mathcal{Q}_j^r) \quad (1.44)$$

Le taux de réaction total \mathcal{Q}_j se décompose en deux parties :

- un taux de réaction "direct" (de la gauche vers la droite) \mathcal{Q}_j^f
- un taux de réaction "inverse" (de la droite vers la gauche) \mathcal{Q}_j^r

Ces deux taux de réaction obéissent à la loi d'action de masse :

$$\mathcal{Q}_j^f = K_{fj} \prod_{k=1}^N C_k^{\nu_{kj}^f} \quad \text{et} \quad \mathcal{Q}_j^r = K_{rj} \prod_{k=1}^N C_k^{\nu_{kj}^r} \quad (1.45)$$

$$\mathcal{Q}_j = \left(K_{fj} \prod_{k=1}^N C_k^{\nu_{kj}^f} - K_{rj} \prod_{k=1}^N C_k^{\nu_{kj}^r} \right) \quad (1.46)$$

Les constantes K_{fj} et K_{rj} constituent un problème central de la modélisation de combustion. Elles sont habituellement estimées par la loi empirique **d'Arrhenius** :

$$k_{fj} = A_{fj} \exp\left(\frac{-E_{fj}}{RT}\right) \quad (1.47)$$

$$k_{rj} = A_{rj} \exp\left(\frac{-E_{rj}}{RT}\right) \quad (1.48)$$

Dans l'équation (1.47) A_{fj} est la constante pré-exponentielle et E_j est l'énergie d'activation. Il faut cependant noter que les paramètres, A_{fj} , A_{rj} , E_{fj} et E_{rj} ne sont pas indépendants car les constantes k_{fj} et k_{rj} sont liées entre elles par la constante d'équilibre k_{cj} de la réaction. En effet, à l'équilibre $Q_j^f = Q_j^r$:

$$K_{fj} \prod_{j=1}^N C_k^{v_{kj}^f} = K_{rj} \prod_{j=1}^N C_k^{v_{kj}^r} \quad (1.49)$$

Cette constante d'équilibre k_{cj} , dépend uniquement de la température et des données thermodynamiques du système:

$$k_{cj} = \left(\frac{P_0}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^N v_{kj}} \exp\left(\frac{-\Delta G_j^0}{RT}\right) \quad (1.50)$$

Où $\Delta G_j^0 = \Delta H_j^0 - \Delta T S_j^0$: est la variation à travers la réaction, elle dépend uniquement de la température et de l'enthalpie libre G à la pression standard.

On en déduit que:

$$A_{rj} = \frac{A_{fj}}{\left(\frac{P_0}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^N v_{kj}}} \exp\left(\frac{-\Delta S_j^0}{RT}\right) \text{ et } E_{rj} = E_{fj} + \Delta H_j^0 \quad (1.51)$$

Le taux de production massique de l'espèce k par la réaction j est donné par:

$$j: \dot{\omega}_{kj} = \frac{d\rho_k}{dt} = M_k v_{kj} Q_j \quad (1.52)$$

Le taux de production massique de k par l'ensemble des réactions est :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_{kj} = M_k \sum_{k=1}^N v_{kj} Q_j \quad (1.53)$$

On remarque depuis cette équation que la masse totale est conservée. Ou p_a est égale à la pression atmosphérique, le symbole Δ représente la variation se produisant des réactifs aux produits dans la j^{eme} réaction. ΔS_k^0 et ΔH_k^0 sont respectivement les variations de l'entropie et de l'enthalpie (sensible + chimique).

$$\Delta H_j^0 = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=0}^N v_{kj} M_k \left(\int_{T_0}^T C_{pk} dT + \Delta h_{f,j}^0 \right) \quad (1.54)$$

$$\Delta S_j^0 = \sum_{k=0}^N v_{kj} M_k s_k(T) \quad (1.55)$$

Remarque :

La loi d'action de masse n'est valable qu'au niveau élémentaire. Cette loi peut cependant être encore utilisée dans des mécanismes réduits (qui ne représentent pas la réalité moléculaire), en remplaçant les coefficients stœchiométriques ν_{fj} et ν_{rj} par des coefficients a_{fj} et a_{rj} judicieusement choisis.

L'interprétation de la constante d'équilibre doit être modifiée en conséquence. En donnant les taux de réaction \dot{Q}_j pour chaque réaction signifie fournir des données sur les constantes A_j , les exposants de la température et la température d'activation T_{aj} (ou d'une manière équivalente l'énergie d'activation $E_j = T_{aj} R$).

Parmi les données numériques d'un écoulement réactif, le schéma chimique est l'un des éléments de défi de la cinétique chimique pour identifier quelle espèce et quelle réaction qui doit être prise dans un schéma réactionnel. Dans la majorité des approches qui doivent être valables pour le calcul.

Certaines propriétés des données de cinétique ont un effet crucial sur le succès du calcul numérique, ainsi dans la modélisation numérique de la combustion on ne peut pas négliger les caractéristiques de ces schémas.

1.6 Equation de conservation de masse et des espèces

La masse totale dans une combustion reste inchangée car la combustion ne génère pas de la matière. L'équation de continuité est la suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.56)$$

L'équation de continuité pour une espèce k est écrite sous la forme :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_{d,k,i}) Y_k) = \dot{\omega}_k \quad k=1, N \quad (1.57)$$

Dans cette équation Y_k est la fraction massique, de l'espèce k dans le mélange et $V_{k,i}$ est la $i^{\text{ème}}$ composante de la vitesse de diffusion $V_{d,k}$, $\dot{\omega}_k$ est le taux de production massique de l'espèce k , par définition :

$$\sum_{k=1}^N V_{d,k,i} Y_k = 0 \quad \text{et} \quad \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k \quad (1.58)$$

Diffusion binaire :

Si le mélange contiens uniquement deux espèces et si le gradient de pression est très minime et les force de volume sont négligeables, le système est réduit à une équation scalaire ou les inconnus son V_1 et V_2

$$\nabla X_1 = \frac{X_2 X_1}{D_{12}} (V_1 - V_2) \quad (1.59)$$

Sachant que $Y_1+Y_2=1$ est que $V_1 Y_1 + V_2 Y_2=0$ ce qui donne l'équation suivante :

$$V_1 Y_1 = -D_{12} \nabla Y_1 \quad (1.60)$$

Cette expression est la loi de **Fick**, cette loi est valable et exacte pour des diffusions binaires, dans le cas d'une diffusion multi espèces elle est remplacée par des expressions plus complexes.

Diffusion multi espèces

Pour donner l'expression de la diffusion multi espèces on applique l'approximation de **Hirschfelder** et **Curtis** qui est la suivante :

$$V_k Y_k = D_k \nabla Y_k \quad \text{avec} \quad D_k = \frac{1-Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / D_{jk}} \quad (1.61)$$

Le coefficient D_k , n'est pas une diffusion binaire mais équivalent au coefficient de diffusion des espèces k par rapport au reste du mélange.

Pour un mélange gazeux, on applique la loi suivante :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_k u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{M_k}{M} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (1.62)$$

La vitesse de correction est évaluée pour assurer la conservation de la masse globale et elle est définie dans l'équation suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} Y_k + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho (u_i - V_i^C) Y_k = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{M_k}{M} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (1.63)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N D_k \frac{M_k}{M} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - \rho V_i^C \right) = 0 \quad (1.64)$$

Ce qui implique que la vitesse de correction est la suivante :

$$V_i^C = \sum_{k=1}^N D_k \frac{M_k}{M} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (1.65)$$

1.7 Transport moléculaire des espèces et de chaleur

Le coefficient de diffusion de la chaleur λ et Le coefficient de diffusivité moléculaires dans le reste du mélange (utilisé dans la loi de **Fick**, voir ci-dessous) nommé le D_k . Les procédés de diffusion impliquent des coefficients de diffusion binaires (D_{kj}) qui exigent la résolution d'un système pour obtenir les vitesses de diffusion.

La résolution du problème de diffusion dans un gaz multi espèce est une tâche difficile. Des lois simplifiées de diffusion (habituellement la loi de **Fick**) sont employées dans la majorité des codes de combustion. Les coefficients D_k sont souvent caractérisés en termes de nombre de **Lewis** défini par :

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho D_k C_P} = \frac{D_{th}}{D_k} \quad (1.66)$$

Ou $D_{th} = \lambda / \rho D_k C_P$: est le coefficient de diffusivité thermique, le nombre de **Lewis** Le_k compare la vitesse de diffusion de chaleur des espèces k , ce paramètre est très important dans les flammes laminares. Le_k est une quantité locale mais dans la plupart des gaz il a une faible variation d'un point à un autre. Pour le coefficient de diffusion de chaleur λ change d'une manière importante avec la température.

Le nombre de **Prandtl** compare la quantité de mouvement à la chaleur, il a la valeur suivante :

$$Pr = \frac{\rho v C_P}{\lambda} \quad (1.67)$$

Le nombre de **Schmidt** Sc_k , compare la quantité de mouvement et la diffusion moléculaire de l'espèce k il est donné par l'expression suivante :

$$Sc_k = \frac{v}{D_k} = Pr Le_k \quad (1.68)$$

Le coefficient de viscosité cinématique du mélange ν dans un milieu comportant de nombreuses espèces peut être déduit de la relation suivante :

$$\nu = \sum_{j=1}^N \frac{X_k^2}{\frac{X_k^2}{v_k} + 1.385 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^N \frac{X_k X_k k_B T}{p M_k D_{jk}}} \quad (1.69)$$

Pour la viscosité dynamique

$$\mu(T) = \mu(T_{ref}) \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{3/2} \frac{T_{ref}-C}{T+C} \quad (1.70)$$

Pour chaque espèce k , la conductivité thermique est exprimée par la relation suivante :

$$\lambda_k = \frac{25 \sqrt{\pi M_k k_B T}}{32 \pi \sigma_k^2 \Omega^{(2,2)*}} \frac{c_v}{M_k} \quad (1.71)$$

Où c_v est la chaleur massique à volume constant d'une molécule.

La détermination du coefficient de conductivité thermique du mélange est très complexe et différentes relations ont été proposées. L'expression la plus courante est écrite sous la forme :

$$\lambda = \frac{1}{2} \left(\sum_{j=1}^N X_j \lambda_j + \frac{1}{\sum_{k=1}^N X_k (\lambda_k)^{-1}} \right) \quad (1.72)$$

Dans cette présentation les effets de **Soret** qui est la diffusion moléculaire d'espèces due aux gradients de température et de **Dufour** qui est le flux thermique dû aux gradients de masse de fraction d'espèces, sont négligés.

1.8 Equation de conservation de la quantité de mouvement

L'équation de conservation de quantité de mouvement est la même pour un écoulement réactif ou non réactif.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i u_j = \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N f_{k,i} Y_k \quad (1.73)$$

P : est la pression statique, μ est la viscosité dynamique et δ_{ij} est le symbole de **Kronecker** ($\delta_{ij} = 1$, si $i=j$, autrement nul).

1.8.1 Tenseur de viscosité :

Le tenseur de viscosité est défini par l'équation suivante :

$$\tau_{ij} = -\mu \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.74)$$

Dans cette relation, $f_{k,j}$ est la force de volume agissant sur les espèces k dans la direction j . Cette équation n'inclue pas de termes explicites de la réaction, l'écoulement est modifié par la combustion, la viscosité dynamique μ et la densité varient fortement avec la température croissante dans un rapport à partir de 1/8 ou 1/10. La dilatation au front de flamme augmente toutes les vitesses par le même rapport. Ce qui implique une variation importante dans le nombre de **Reynolds** local plus que dans un écoulement non réactif. La présence de la combustion change l'écoulement d'une manière importante.

1.9 Conservation de l'énergie :

L'équation de conservation d'énergie requiert une grande attention car il existe multiple formes. La forme de l'équation d'énergie totale est la suivante :

$$\rho \frac{de_t}{dt} = \frac{\partial e_t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i e_t) = \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} u_i) + Q + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i}) \quad (1.75)$$

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p \delta_{ij} = p \delta_{ij} - \mu \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.76)$$

Où Q : est le terme source de chaleur qui est due à un flux radiatif ou bien une étincelle électrique, ce terme est différent à la chaleur dégagée par la combustion. Le terme $\sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i})$ est la puissance produite par la force de volume $f_{k,i}$.

On a aussi le terme du flux d'énergie q_i qui est à la valeur suivante :

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{conduction}} + \rho \underbrace{\sum_{k=1}^N Y_k h_k V_{k,i}}_{\text{diffusion des espèces}} \quad (1.77)$$

Cette équation introduit le premier terme qui la loi de **Fourier** et le second terme la diffusion des espèces avec leurs enthalpies.

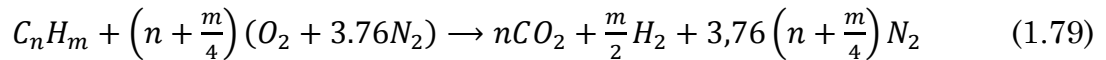
En utilisant la relation entre l'enthalpie et l'énergie $h_t = e_t + p/\rho$ et l'équation de continuité on obtient la formulation de l'équation d'énergie en termes d'enthalpie qui est la suivante :

$$\frac{dh_t}{dt} = \frac{\partial h_t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_t) = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij} u_i) + Q + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i}) \quad (1.78)$$

1.10 La richesse

Dans le secteur industriel les hydrocarbures sont les plus fréquents, ce sont de dérivés du pétrole obtenus par distillation, on prend un exemple général d'hydrocarbure afin d'expliquer certains paramètres macroscopiques de la combustion.

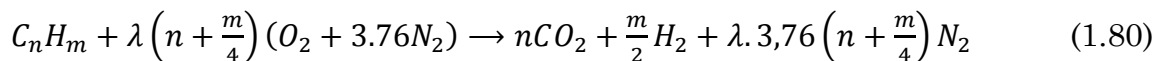
Sois l'équation de combustion stœchiométrique d'un hydrocarbure avec l'air :



La réaction est dite complète si les gaz brûlés ne comprennent, outre les éléments inertes, que des produits complètement oxydés. En réalité, plusieurs produits intermédiaires sont formés au cours d'une combustion réelle. Comme on s'intéresse ici uniquement aux états d'équilibre initial et final, on ne les considérera pas.

Ils s'avèrent néanmoins importants en pratique, en particulier pour les problèmes de pollution. Dans la plupart des cas, le comburant utilisé est l'air, plutôt que l'oxygène pur. La composition de l'air est approximativement, en fractions molaires, 21% d'oxygène, 78% d'azote, et 1% d'argon. Ces deux dernières substances sont supposées inertes mais en réalité, aux hautes températures atteintes au cours de la combustion, l'azote réagit avec l'oxygène pour former des oxydes d'azote, qui constituent une source de pollution.

Pour de simplification on considère que l'air est composé de 21% d'oxygène et de 79% d'« azote atmosphérique » auquel on attribue une masse molaire fictive pour tenir compte de la présence d'argon. La réaction de combustion d'un hydrocarbure avec l'air devient donc :



La quantité minimale d'air nécessaire à la combustion complète d'un combustible est appelée air strictement nécessaire ou encore air théorique. Pour réaliser la combustion complète avec l'air théorique, il faudrait un mélange parfait. En pratique, pour assurer la combustion complète, il faut un certain excès d'air.

Celui-ci est caractérisé par le coefficient d'air théorique :

$$\lambda = \frac{\text{air théorique}}{\text{air réel}} \quad (1.81)$$

On utilise également pour caractériser le mélange de réactifs le rapport air-combustible, le plus souvent en termes massiques, et son inverse, le rapport combustible-air encore appelé dosage désigné par le symbole μ

$$\mu = \left(\frac{\dot{m}_c}{\dot{m}_a} \right) \quad (1.82)$$

La connaissance du débit massique du combustible \dot{m}_f et du comburant \dot{m}_a , nous permet de définir la richesse du mélange Φ :

$$\Phi = \frac{\mu}{\mu_s} = \frac{\frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_a}}{\left(\frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_a} \right)_s} \quad (1.83)$$

Lorsque l'air fourni est inférieur à l'air théorique, la combustion est incomplète. Si le manque d'air est faible, on observe la formation de monoxyde de carbone. Pour des manques d'air plus importants, il peut subsister des hydrocarbures imbrûlés, ou du carbone sous forme de graphite.

Si la richesse du mélange est égale à l'unité, on dit que le mélange est stœchiométrique par contre si la richesse est inférieure à l'unité, le mélange est pauvre en combustible alors que si elle est supérieure à l'unité, le mélange est dit riche en combustible. Pour les combustions avec l'air, on travaille souvent avec un mélange pauvre, c'est seulement ainsi que l'on peut espérer obtenir une combustion complète puisque le mélange (combustible, comburant) ne peut jamais être parfaitement homogène.

Il est clair que l'élévation de la température de fin de combustion est très importante lorsque cette dernière est complète et que les gaz sont moins dilués, c'est à dire pour un mélange homogène dont la richesse est égale à l'unité.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons récapitulé toutes les données nécessaires pour traiter un problème de combustion. C'est une partie très importante car c'est une étude de base pour faire une modélisation de la combustion, nous avons mentionné les variables thermodynamique, l'équation d'état ainsi que les énergies et les enthalpies et entropies caractéristiques d'une mélange réactif.

Comme nous avons aussi cité les termes supplémentaires dans les équations de continuité, d'énergie et de quantité de mouvement, le phénomène de transport, l'expression du taux de production et les contraintes de viscosité.

CHAPITRE 2

Flamme laminaire prémélangée et de diffusion

Chapitre 2

Flamme laminaire prémélangée et de diffusion

2.1 Notion de flamme

Lorsqu'un mélange de gaz combustible - comburant se trouve dans un tube ouvert et est enflammé à l'une des extrémités par une source de chaleur, il entre en régime de combustion vive car la chaleur produite par la réaction ne peut pas être dissipée assez rapidement pour qu'un régime de combustion lente s'établisse. Les radicaux produits par les réactions de ramification diffusent dans toutes les directions. Ils ne sont en effet pas détruits dans la direction de l'axe du tube, sauf pour quelques cas de recombinaisons peu importantes presque peu probables.

La chaleur et les radicaux produits localement par la réaction diffusent vers la couche adjacente en avant du front et cette diffusion est suffisante pour que cette couche soit portée à l'inflammation et devienne elle-même une source de chaleur et de radicaux capables d'initier une réaction chimique dans la couche suivante etc. De cette façon une zone de combustion se propage au sein du tube ouvert et à travers le mélange gazeux. Cette zone constitue la flamme, milieu très réactif qui sépare une zone dite de gaz frais (mélange combustible, comburant et diluant n'ayant pas réagi) d'une zone dite de gaz brûlés (produits de combustion issus du processus réactionnel).

Une flamme est le résultat d'un fort couplage entre un processus chimique qui produit rapidement de la chaleur et des espèces réactives, et un processus physique de transport de matière par diffusion et de chaleur par convection. La production de chaleur et de radicaux accélère la réaction tandis que leur transport vers les gaz frais en limite la vitesse.

Quand les deux phénomènes sont de même importance, la flamme se propage à vitesse constante. La part relative jouée dans la propagation de la déflagration par la chaleur et par les radicaux est très difficile à distinguer. On considère généralement qu'au-dessus de 1300°K, la propagation thermique l'emporte sur la propagation des radicaux.

2.2 Intérêt de la flamme prémélangée

Quoique de multiples radicaux soient impliqués dans la combustion, certaines espèces sont plus importantes pour caractériser le régime de combustion. Les fractions massiques du carburant et comburant sont des quantités évidemment significatives et leur rapport est utilisé généralement pour caractériser la flamme. Il y a différentes manières de définir le rapport d'équivalence (**Figure 2.1**) selon la configuration du brûleur (prémélangé ou non prémélangé).

Dans un écoulement laminaire, compte tenu des différents mécanismes qui permettent l'existence d'un écoulement réactif, il est nécessaire de distinguer deux types de flammes :

- les flammes laminaires de prémélange où le combustible et l'oxydant sont mélangés avant l'inflammation ;
- les flammes laminaires de diffusion où le combustible et l'oxydant sont introduits séparément avant l'inflammation.

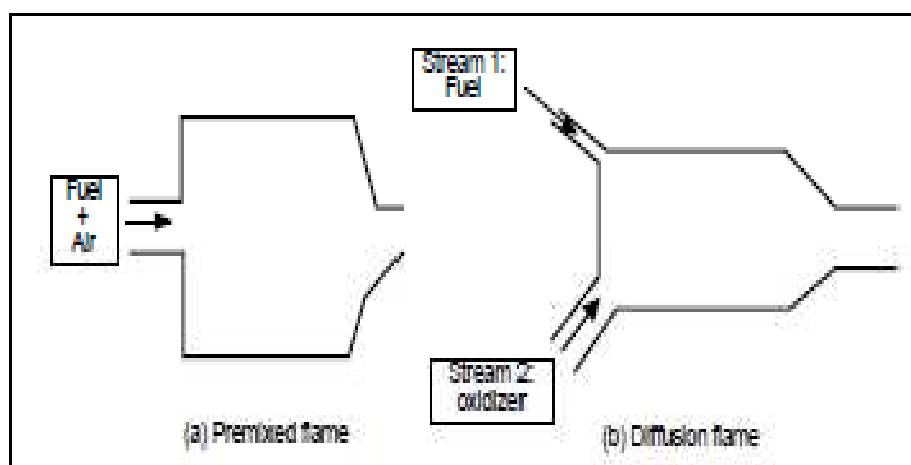


Figure 2.1 : configuration de la flamme de prémélange et de diffusion

Le cas élémentaire d'une flamme laminaire unidimensionnelle se propageant dans un gaz prémélange (carburant mélangé à l'air) est un problème de base dans la combustion, pour la théorie et pour des techniques numériques. Numériquement la solution pour les flammes de prémélange laminaires est d'intérêt parce que :

- Elle est l'une des quelques configurations où des comparaisons détaillées entre les expériences, la théorie et les calculs numériques peuvent être effectuées.
- Elle peut être employée pour valider les modèles chimiques comme il a été discuté dans le premier chapitre.
- Beaucoup d'approches théoriques peuvent être employées pour les flammes laminaires, pour étudier non seulement leur structure unidimensionnelle mais également les diverses instabilités qui peuvent se développer sur de tels problèmes.
- Des flammes laminaires sont appliquées dans beaucoup de modèles turbulents de combustion en tant que blocs élémentaires constitutifs des flammes turbulentes.

2.3 Structure de la flamme prémélangée

La flamme de prémélange peut être considérée comme une interface séparant les gaz frais des gaz brûlés. Plus précisément, il s'agit d'un front de flamme où se trouve une réaction chimique exothermique dont le taux de réaction est une fonction de la température et des fractions massiques Y_F et Y_O :

$$\dot{\omega} = [Y_F][Y_O] \exp(E_a/R T).$$

Cette dernière est constituée de réactions intermédiaires composées d'espèces élémentaires (radicaux). Les flammes mettent en jeu des phénomènes chimiques mais aussi physiques et mécaniques de transport de gaz par diffusion et de chaleur par convection et conduction. L'épaisseur de cette interface est représentée par la zone de préchauffage et de réaction. Cette dernière est variable selon le carburant et la richesse de combustion utilisés. La principale propriété de ce front est sa nature propagative.

En effet, la diffusion de la chaleur dans les gaz frais (induisant un préchauffage), couplée à la réaction chimique de la combustion, favorisent la propagation du front de flamme vers les gaz frais.

La structure de la flamme de prémélange laminaire est représentée sur la (**Figure 2.2**). Les gaz frais (combustible et oxydant) et les gaz brûlés (produits de la combustion) sont séparés par une mince zone de réaction, dont l'épaisseur est de l'ordre de 0,1 à 1 mm. Dans cette zone, siège des réactions chimiques, les espèces intermédiaires et les produits de combustion sont formés.

Le front de flamme est caractérisé par un fort gradient de température, le rapport des températures entre les gaz brûlés et les gaz frais est de l'ordre de 5 à 7, alors que le saut de pression est très faible (environ 1 Pascal). La présence de ce gradient de température et de transfert de flux thermique conduit au préchauffage des gaz frais puis à la combustion.

Le déséquilibre entre la diffusion thermique et la réaction chimique conduit à la propagation du front de flamme des gaz brûlés vers les gaz frais à la vitesse laminaire de flamme. Cette vitesse dépend de nombreux paramètres: composition, température et pression dans les gaz frais. Pour les hydrocarbures simples, S_L varie entre 0.1 et 1 m/s. Une conséquence immédiate de l'existence d'une échelle de vitesse dans une zone contrôlée par la diffusion et la réaction chimique est l'existence d'une échelle de longueur, en particulier l'épaisseur de flamme.

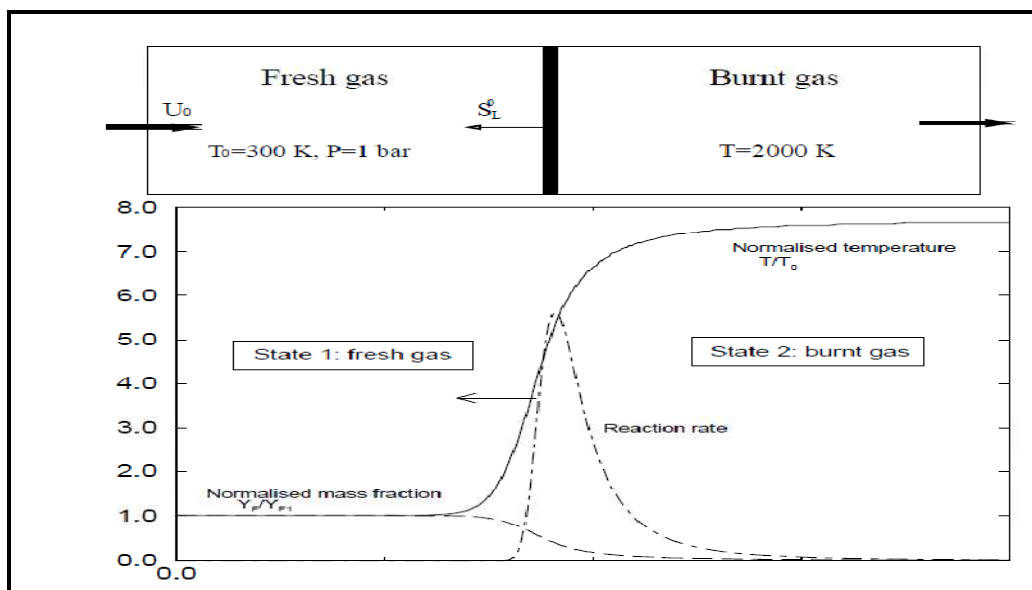


Figure 2.2 : structure de la flamme prémélangée

2.4 Vitesse de la flamme prémélangée

Une première définition permet de relier la diffusivité thermique dans les gaz frais D_{th} à la vitesse de flamme S_L . Durant les cent dernières années, de nombreux physiciens et de chimistes ont développé des méthodes et théories pour déterminer la vitesse de flamme.

- La première théorie développée pour calculer cette vitesse de déplacement fut celle de **Mallard** et **Le Chatelier** en 1883. Ils proposent de diviser la flamme en deux zones. La première correspond à la zone de préchauffage, dans laquelle les gaz frais vont être chauffés par conduction. Quant à la deuxième, il s'agit de la réaction chimique.

Les deux physiciens démontrent alors, en considérant comme équivalents le taux de chaleur transféré par conduction dans la flamme et la quantité de chaleur évacuée par les gaz brûlés, que la vitesse peut s'écrire sous la forme suivante :

$$S_L^0 = \sqrt{\left(\frac{\lambda}{\rho C_P}\right) \frac{T_f - T_i}{T_i - T_0} \left(\frac{d\varepsilon}{dt}\right)} \quad (2.1)$$

Où T_i : représente la température d'auto-inflammation .

$d\varepsilon/dt$: est le taux de réaction.

Mallard et Le Chatelier n'ont pas spécifié la température spécifique à laquelle le taux de réaction doit être déterminé. Cependant, leur analyse suggère que la vitesse de flamme est proportionnelle à la racine carrée du produit de la diffusivité thermique et du taux de réaction.

Ce résultat est l'une des plus importantes relations dans la théorie des flammes laminares et peut être considéré comme représentatif de la flamme laminaire, dont l'épaisseur est très faible.

- Par ailleurs, [CLAVIN, 1985] présente la vitesse de flamme laminaire en se basant sur l'équilibre d'énergie dans la zone de préchauffage entre d'une part, le flux de conduction issu de la zone de réaction et d'autre part, la chaleur quittant

la zone de préchauffage avec le flux convectif produit par le mouvement du front de flamme relativement aux gaz frais :

$$S_L^O \propto \frac{\rho_b}{\rho_a} \sqrt{Le^n \frac{D_{th}}{\beta^{n+1} \tau_R}} \quad (2.2)$$

Le : Le nombre de Lewis.

D_{th} : Le coefficient de diffusion pour le flux de conduction thermique

τ_R : Est le temps chimique.

β : EST le nombre de **Zeldovich**.

ρ_b : Masses volumiques des gaz frais

ρ_a : Masses volumiques des gaz frais

Le coefficient de diffusion pour le flux de conduction thermique, est pris dans la zone des gaz brûlés. Le nombre de **Lewis**, est égal au rapport du coefficient de diffusivité thermique sur le coefficient de diffusion moléculaire d'une espèce. Cette expression de la vitesse de flamme laminaire est basée sur les propriétés thermodiffusives du mélange.

2.4.1 Model de Zeldovich

Le model de **Zeldovich** est l'un des plus ancien, la détermination de la vitesse de la flamme est une tache très difficile et le schéma de **Zeldovich** pour la vitesse de la flamme est le suivant :

$$S_L = \frac{1}{\beta} e^{-\frac{\beta}{2\alpha}} \left(2|B_1| T_1^{\beta_1} D_{th}^1 \right)^{1/2} \left(1 + \frac{1.344-3\alpha}{\beta} \right) \quad (2.3)$$

$$\text{Ou } \alpha = (T_2 - T_1)/T_1 \quad \text{et } \beta = \alpha T_{a1}/T_2 \quad (2.4)$$

Pour la détermination de T_2 on applique la conservation de l'enthalpie :

$$C_P(T_1 - T_0) + \sum_{k=1}^n \Delta h_{f,k}^0 Y_k^1 = C_P(T_2 - T_0) + \sum_{k=1}^n \Delta h_{f,k}^0 Y_k^2, \quad (2.5)$$

$$C_P(T_2 - T_1) \sum_{k=1}^n \Delta h_{f,k}^0 (Y_k^1 - Y_k^2) \quad (2.6)$$

Ou, $T_0=297,15$ est température de référence pour le calcul des enthalpies de formation.

On obtient la relation suivante :

$$T_2 = T_1 + QY_k^1 \quad (2.7)$$

$$Q = \sum_{k=1}^n \Delta h_{f,k}^0 \left(\frac{\gamma_k^1 M_k}{\gamma_{F1} M_F} \right) \quad (2.8)$$

Les deux paramètres α et β mesurent respectivement la chaleur libérée par la flamme et la température d'activation. Des valeurs typiques de flamme sont énumérées dans le tableau 1.2 pour une température $T_1 = 300K$.

La flamme 1 est une flamme utilisée pour des simulations numériques de la combustion turbulente dans lequel des paramètres chimiques sont modifiés pour permettre un calcul plus facile tandis que la flamme 2 correspond à des valeurs plus réalistes pour des flammes d'hydrocarbure-air.

Flamme	T_2/T_1	E_{a1} (kJ/mole)	T_{a1}/T_1	α	B
Flamme 1	4	110	42.7	0.75	8.0
Flamme 2	7	375	150	0.86	18.4

Tableau 2.1 : valeurs typiques de α et β

2.4.2 Epaisseur de flamme laminaire

L'épaisseur de flamme laminaire est une grandeur caractéristique des flammes en régime laminaire. Et bien que sa perception physique soit assez simple, on recense plusieurs définitions de l'épaisseur du front de flamme. A ce propos, la plus ancienne et la plus employée est celle de **Zeldovich** :

$$\delta_{L0} = \frac{\lambda}{c_p \rho_r S_L} \quad (2.9)$$

λ : est la conductivité thermique du mélange réactif.

c_p : la chaleur spécifique à pression constante.

ρ_r : la masse volumique du mélange des gaz frais.

S_L : la vitesse de la flamme laminaire.

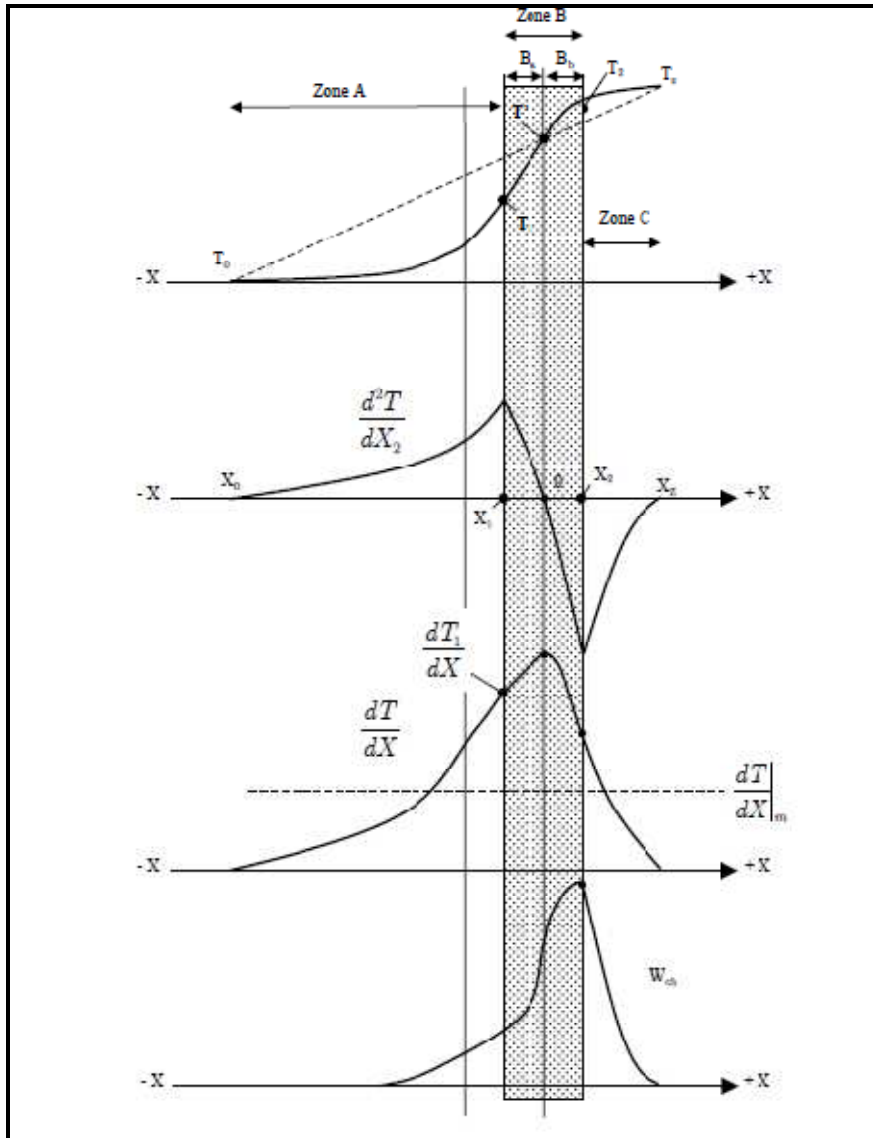


Figure 2. 3 : *structure de la flamme caractérisée par la variation de la température T , de la dérivée première dT/dx de la dérivée seconde d^2T/dx^2 .*

La figure ci-dessus décrit en détail l'ensemble des phénomènes qui se produisent dans le front de flamme. Elle permet de définir un certain nombre de grandeurs, telles que la température T' correspondant à celle où le gradient est maximal. Le flux de chaleur en direction des gaz frais réchauffe ceux situés en amont, sur une épaisseur δ_e (**Zone A** : zone de préchauffage).

Dans cette zone où la réaction est à peu près négligeable, les gaz frais s'échauffent par conduction thermique et par diffusion de la chaleur à partir de la zone de réaction située en aval.

La diminution de concentrations provoquée par la réaction chimique entraîne la diffusion des réactifs vers la zone de réaction, tandis que les produits des réactions intermédiaires diffusent vers l'amont de la zone de réaction. Dans la zone aval, la réaction et la diffusion se contrebalancent, la convection étant à peu près négligeable. L'épaisseur du front de flamme peut alors être définie comme la somme de la zone de préchauffage δ_e et de l'épaisseur de la réaction (δ_R **Zone B** de la **figure 2.3**).

L'épaisseur de la zone de réaction s'écrit alors :

$$\delta_R = \frac{\delta_L}{\beta} \quad (2.10)$$

Où β est l'énergie d'activation réduite de la réaction : sa valeur dépend de la nature des réactions élémentaires et du combustible mis en jeu. Dans le cas des grandes énergies d'activation, le terme δ_R est négligeable devant δ_L . C'est pourquoi l'épaisseur de diffusion est souvent assimilée à l'épaisseur de flamme : de l'ordre de quelques dixièmes de millimètres à un millimètre.

Expérimentalement, l'épaisseur de flamme est généralement basée sur l'expression de **Spalding**, établie à partir du gradient maximal de la température

$$\delta_R = \left(\frac{T_x - T_0}{dT/dx} \right)_{max} \quad (2.11)$$

D'après [5], cette définition de l'épaisseur est aussi la plus commode pour les calculs numériques en combustion visant à déterminer la résolution du maillage de calcul. On peut aussi utiliser la largeur à mi-hauteur du gradient du profil de température. Or, [6] montre que ces deux définitions sont équivalentes.

Où T_0 est la température des gaz frais, dT/dz est le gradient de température le long de la normale au front de flamme et T_x est la température pour laquelle le gradient de température est maximal dans la zone de dégagement de chaleur la (**Figure 2.2** zone B).

Cette définition permet de mesurer l'épaisseur de la zone de préchauffage. En effet, il s'agit d'un point important dans l'analyse théorique de la structure de flamme.

2.5 Flamme laminaire de diffusion :

Les flammes de diffusion constituent une classe spécifique des problèmes de combustion où le carburant et l'oxydant ne sont pas mélangés avant qu'ils entrent dans la chambre de combustion, pour ces flammes, le mélange doit introduire des réactifs dans la zone de réaction assez rapidement pour que la combustion procède. En flammes de prémélange, le mélange du carburant et l'oxydant est effectué avant la combustion et n'exige pas une grande attention mais pour une flamme de diffusion il devient l'un des thèmes principaux.

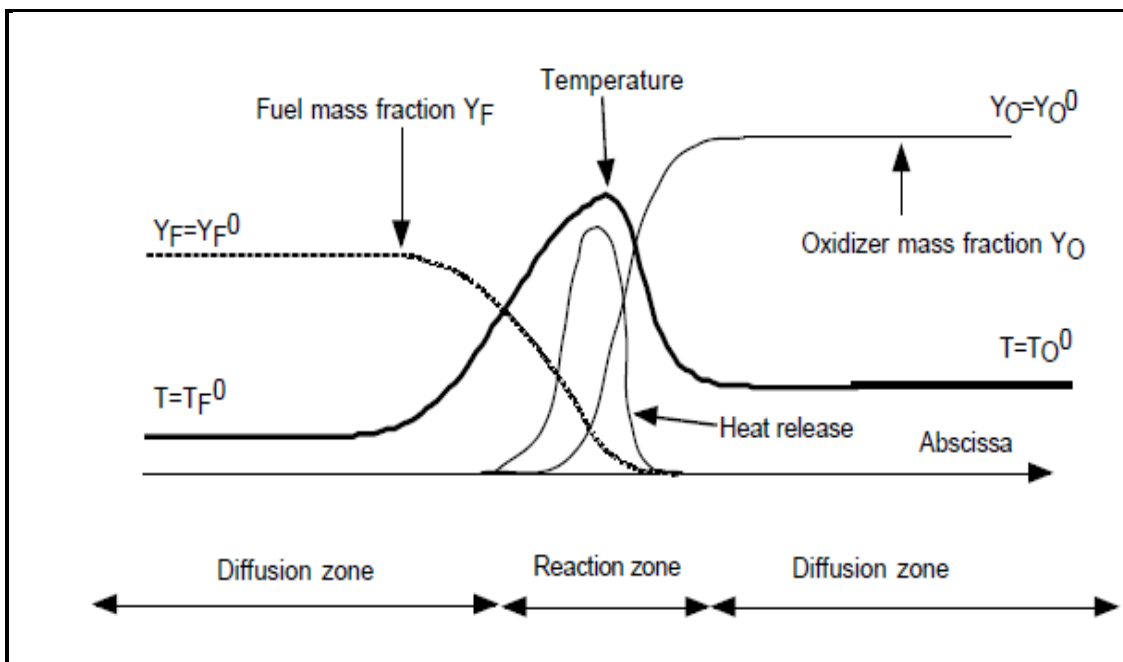


Figure 2.4 : structure de la flamme de diffusion.

La figure ci-contre présente le prototype de la configuration de flamme de diffusion. Au lieu d'avoir un seul état (les réactifs prémélangés) pour la flamme de prémélange, deux états de frontière doivent maintenant être considérés, le combustible (qui peut être dilué dans d'autres gaz) du côté gauche et l'oxydant (dilué ou pas) du côté droit. Le carburant et l'oxydant diffusent vers la réaction répartis en zones où ils brûlent et produisent de la chaleur. La température est maximale dans cette zone et se répand à partir du front de flamme vers les jets de carburant et d'oxydant.

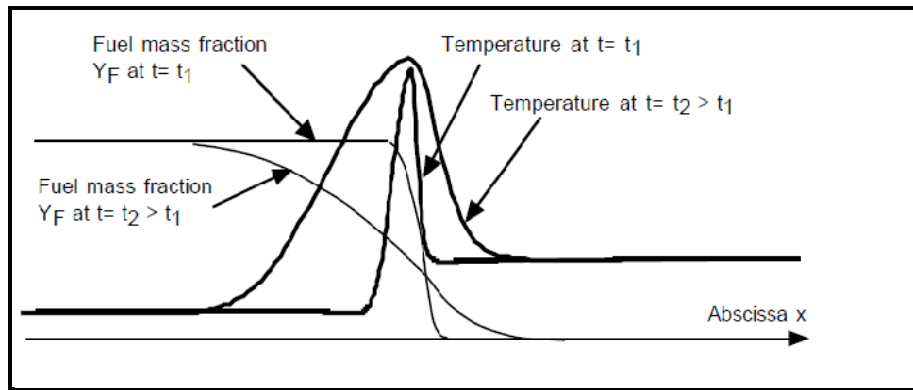


Figure 2.4.a : flamme de diffusion instationnaire et non étirée

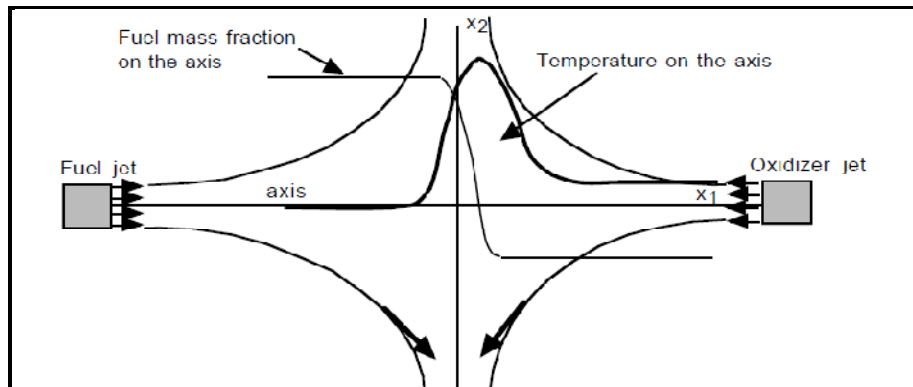


Figure 2.4.b : flamme de diffusion stationnaire et étirée

- La Figure 2.4 illustre un certain nombre de considérations importantes. Dans une position loin de chaque côté de la flamme, les gaz sont trop riches ou trop pauvres pour brûler. Les réactions chimiques peuvent avoir lieu seulement dans une région limitée, où le carburant et l'oxydant sont mélangés à juste proportion et dans des conditions adéquates. Le mélange le plus favorable est obtenu où le carburant et l'oxydant sont dans des proportions stœchiométriques : une flamme de diffusion se trouve habituellement le long des points où le mélange produit un mélange stœchiométrique.
- Une flamme de diffusion n'a pas une épaisseur finie, la flamme non étirée la (**Figure 2.4a**) grandit indéfiniment avec le temps par contre l'épaisseur des flammes étirées (**Figure. 2.4b**) dépend essentiellement de l'étirement et peut prendre une grande gamme de valeurs. Encore, elle est très différente des flammes de prémélange où une épaisseur peut être présentée et dépendante des propriétés du fluide et la vitesse de flamme.

- En termes d'applications industrielles, le mélange est également la clef caractéristique des flammes de diffusion. Ces flammes sont plus simples pour concevoir et construire. Elles sont également plus sûres à utiliser parce qu'elles ne se propagent pas rapidement. Cependant, leur efficacité brûlante est réduite à comparant aux flammes de prémélange parce que le mélange réduit la vitesse à laquelle les réactions chimiques se produisent.

2.5.1 Stabilisation d'une flamme de diffusion

Une flamme de diffusion se stabilise aux lèvres du brûleur (**Figure 2.6**), si le brûleur est suffisamment bien profilé pour éviter la présence d'une zone de recirculation derrière les lèvres.

Lors de la rencontre des jets de comburant et de combustible, une zone de mélange se crée et les réactifs diffusent plus ou moins l'un dans l'autre. Au milieu de la zone de mélange, il existe une ligne le long de laquelle la proportion de comburant et de combustible correspond à la stœchiométrie et permet la réaction.

Dans certaines conditions de l'écoulement, il est possible d'obtenir une flamme qui se stabilise au dessus des lèvres du brûleur (**Figure 2.5**). La flamme est alors dite "suspendue".

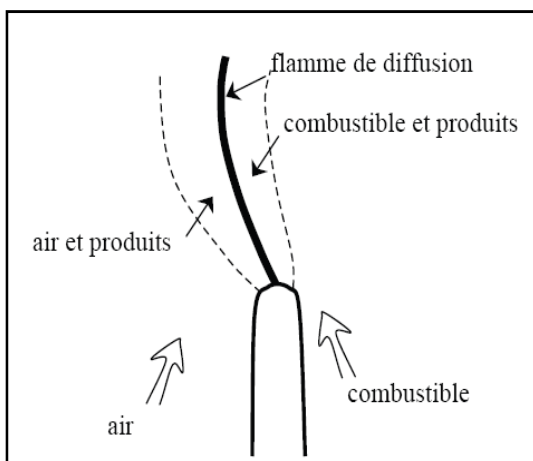


Figure 2.5 : Stabilisation d'une flamme de diffusion sur la lèvre d'un brûleur.

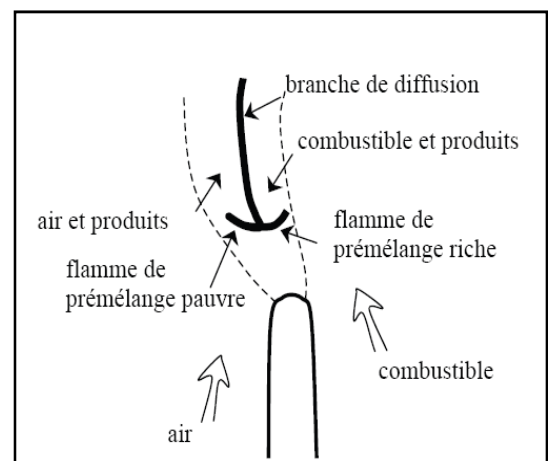


Figure 2.6 : Stabilisation d'une flamme de diffusion suspendue, formation d'une flamme triple.

Le comportement des flammes turbulentes suspendues dépend essentiellement de la vitesse du jet. L'évolution de la hauteur moyenne est quasi-linéaire en fonction de la vitesse de sortie des gaz, quelle que soit la nature du gaz (*Kalghatgi*, 1984). A partir d'une flamme de diffusion accrochée au brûleur, lorsque la vitesse d'éjection du combustible atteint une valeur critique ($U_0 > U_c$) la flamme se décolle naturellement du brûleur. Dans le cas d'une flamme initialement suspendue, il faudra diminuer la vitesse à une valeur U_c' inférieure à U_c pour accrocher la flamme. C'est le phénomène d'hystérésis. La transition de l'état accroché à l'état décollé a été décrite selon plusieurs mécanismes de décollage (*Takahashi et Al.* 1990).

Le premier mécanisme de décollement correspond à une rupture d'équilibre entre le jet d'air entraîné et la propagation de la flamme près des lèvres du brûleur. Un autre mécanisme d'instabilité est décrit comme une extinction partielle de la flamme qui peut alors soit se décoller directement, soit se scinder en deux parties. Dans ce dernier cas, la portion de flamme restant accrochée au brûleur s'éteint rapidement et une flamme suspendue est observée.

Une fois la flamme décollée et stabilisée au-dessus de l'injecteur, son aspect change de façon radicale. En effet, elle change notamment de couleur, elle devient essentiellement bleue en raison de l'émission de chimiluminescence des radicaux. Le mélange entre le combustible et l'oxydant est rendu plus efficace grâce aux fortes vitesses qui règnent dans le jet, et la production de suies tend à décroître. Cette configuration particulière de flamme suspendue pour laquelle coexiste des zones de combustion de prémélange et de diffusion, est souvent appelée flamme partiellement prémélangée ou flamme triple, sous certaines conditions.

2.5.2 Paramètres de la flamme de diffusion :

Beaucoup d'études sur les flammes de diffusion assument des situations idéalisées utilisant fraction scalaire (ou de mélange) la notion passive qui est le point de départ de l'analyse. Très peu de ces prétentions sont satisfaites dans une flamme réelle, cette dernière diffère de la situation idéale.

Soit la combustion stœchiométrique suivante :



Sois le dosage stœchiométrique :

$$s = \frac{\gamma_o M_o}{\gamma_f M_f} = \left(\frac{Y_o}{Y_f} \right)_{St} \quad (2.13)$$

La richesse est la suivante :

$$\phi = S \frac{Y_f}{Y_o} = \left(\frac{Y_o}{Y_f} \right) / \left(\frac{Y_o}{Y_f} \right)_{St} \quad (2.14)$$

Ou bien

$$\phi = S \frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_o} \quad (2.15)$$

Fraction stœchiométrique du mélange :

$$Z_{St} = \frac{1}{1 + s Y_f^0 / Y_o^0} = \frac{1}{1 + \phi} \quad (2.16)$$

Température adiabatique de la flamme :

$$T_{ad} = Z_{St} T_F^0 + (1 - Z_{St}) T_O^0 + Q Y_F^0 Z_{St} / C_P \quad (2.17)$$

Dans une étude théorique explicite citée dans la référence [1], on a soutiré les résultats suivants sur les caractéristiques de la flamme de diffusion :

Solution pour le problème de mélange dans le repère $z(x)$,

Fraction du mélange

$$z(x) = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(x \sqrt{k / (2D)} \right) \right] \quad (2.18)$$

Rapport de dissipation scalaire x :

$$x = k / \pi \exp(-kx^2 / D) \quad (2.19)$$

Rapport de réaction intégrale

$$\Omega_F = \frac{\rho Y_F^0}{1 - Z_{St}} \sqrt{\frac{D_k}{2\pi}} e^{-\left(\operatorname{erf}^{-1} \left(\frac{1 - \phi}{1 + \phi} \right) \right)^2} \quad (2.20)$$

Description de la structure de la flamme dans le diagramme z

1-coté carburant

Fraction massique du carburant :

$$Y_F(z) = Y_F^0 (z - z_{st}) / (1 - z_{st}) \quad (2.21)$$

Fraction massique du comburant (air) :

$$Y_O(z) = 0 \quad (2.23)$$

Température

$$T_Z = zT_F^0 + (1 - z) + \frac{z_{st}(1-z)QY_F^0}{(1-z)C_P} \quad (2.25)$$

2-coté comburant

Fraction massique du carburant

$$Y_F(z) = 0 \quad (2.26)$$

Fraction massique du comburant (air)

$$Y_O(z) = Y_F(z) = Y_O^0 (1 - z/z_{st}) \quad (2.27)$$

Température

$$T_Z = zT_F^0 + (1 - z)T_O^0 + \frac{QY_F^0}{(1-z)C_P} \quad (2.28)$$

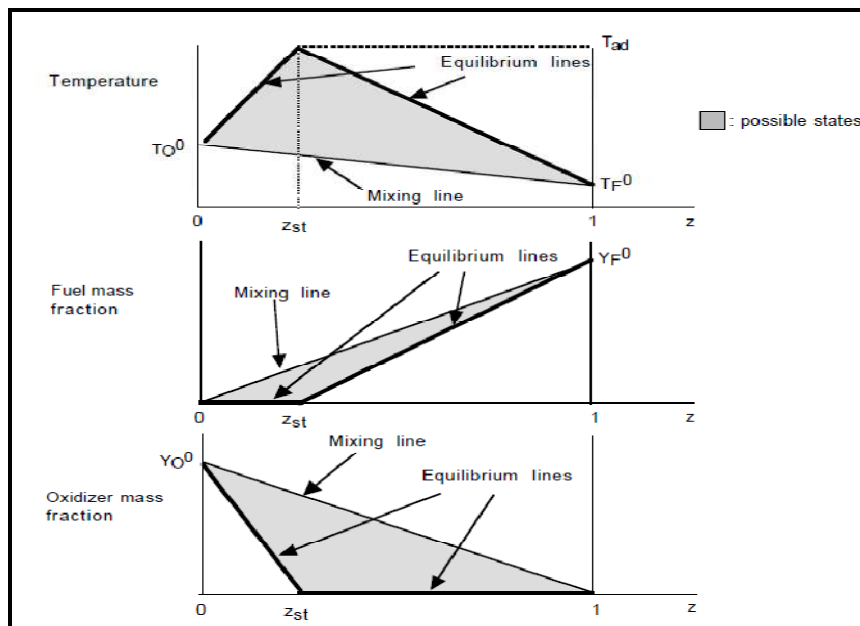


Figure 2.7 : *mélange pur sans réaction entre le carburant et le comburant*

2.6 Instabilité de la flamme laminaire :

Lorsqu'une flamme plane monodimensionnelle se développe dans un écoulement, elle peut subir différentes instabilités qui conduisent à une modification de sa structure propre. Ces instabilités sont provoquées soit par le développement de flux diffusifs dans la direction tangente au front, soit par la déflexion des lignes de courant due à l'expansion des gaz, ou encore par la modification de l'équilibre local entre la convection et la diffusion.

2.6.1 Instabilités dues aux forces de gravité

Cette instabilité se présente lorsque deux fluides de densités différentes se trouvent superposés dans le champ gravitationnel. En effet, si le fluide le moins dense se trouve en dessous, celui-ci aura tendance à vouloir passer au-dessus du plus dense, créant ainsi des instabilités (**Figure 2.8**). Les effets de gravité sont caractérisés par le nombre de Froude :

$$F_r = \frac{(S_L)^2}{g\delta_L} \quad (2.29)$$

Dans le cas où un front de flamme se propage vers le haut, cet effet sera stabilisant, tandis qu'il sera contraire lors d'un déplacement du front de flamme vers le bas.

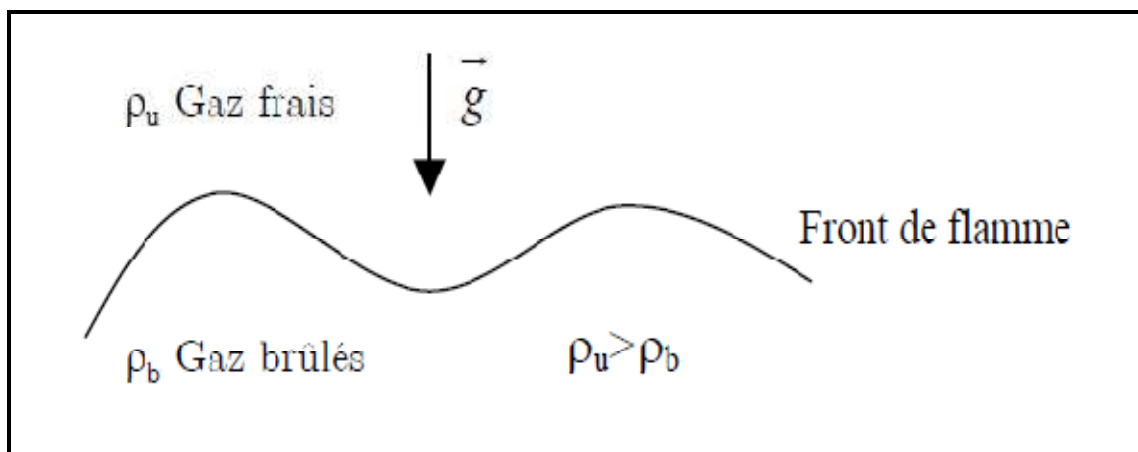


Figure 2.8 : *Instabilité due aux forces de gravités*

2.6.2 Effet de la convection naturelle sur le battement du front de flamme

Les gaz brûlés d'une flamme sont naturellement convectés vers le haut, formant ainsi des rouleaux de convection qui vont se charger en gaz brûlés (**Figure 2.9**). Ceux-ci vont alors se vider à une certaine fréquence et l'on va alors observer un retour de l'information au niveau de la flamme, ce qui va provoquer son battement.

La fréquence de battement du front de flamme est basse : de l'ordre de 10-20 Hz. Cette fréquence est fonction de la gravité (g) et peut s'écrire sous la forme $f=g^n$. De plus, elle a une faible dépendance par rapport aux dimensions du brûleur, à la vitesse d'éjection et au type de combustible utilisé.

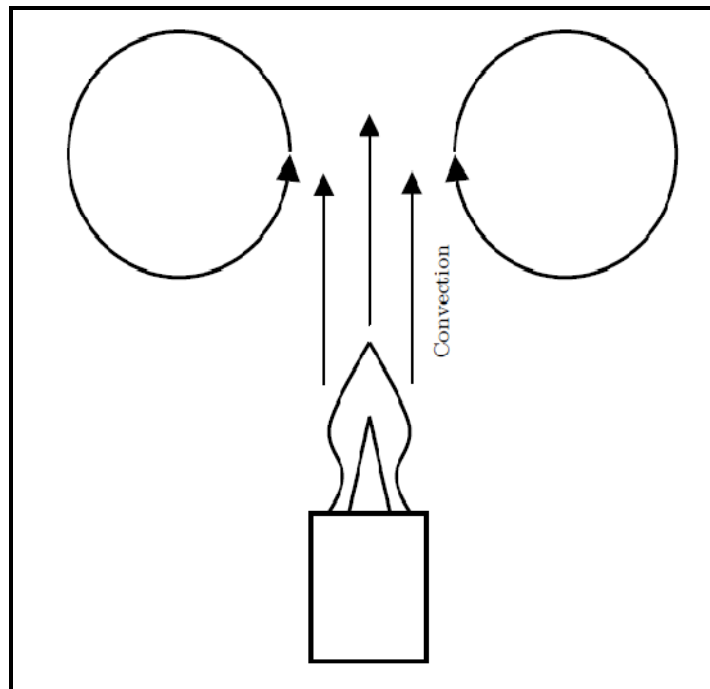


Figure 2.9 : *Effet de la convection naturelle sur le battement du front de flamme*

2.6.3 Effets de parois

Les effets de parois se caractérisent principalement par des instabilités acoustiques, que l'on peut définir comme la propagation d'une onde acoustique (ou de pression) dans la chambre de combustion. Ceci se traduit par une fréquence qui est fonction de la dimension de la chambre mais aussi de la vitesse du son dans le milieu considéré.

Les zones sensibles sont celles dans lesquelles se produit un fort dégagement de chaleur en présence de fortes fluctuations de pression, ou bien encore celles pour lesquelles le dégagement de chaleur se produit à proximité d'une surface. Ceci peut entraîner un effet « nuisible » important si l'effet de parois n'est pas contrôlé (destruction de la structure).

Pour y remédier, il existe le contrôle actif qui consiste à utiliser des ondes acoustiques extérieures, permettant d'exciter la flamme. Des échanges d'énergie entre la chambre de combustion et la flamme peuvent exister, ayant pour conséquence directe de diminuer la température de combustion

2.6.4 Instabilités dues aux effets hydrodynamiques

Ces instabilités ont été découvertes par [DARRIEUS, 1945] et [LANDAU, 1944] : elles résultent de la différence de densité entre les gaz frais et les gaz brûlés à travers la flamme plane, vue comme une discontinuité hydrodynamique.

L'étude temporelle d'une perturbation harmonique infinitésimale nous donne l'évolution du front de flamme :

$$\alpha(y, t) = Ae^{(\sigma t - ikr)} \quad (2.30)$$

Avec A l'amplitude initiale, k le vecteur d'onde et σ la relation de dispersion. La détermination de σ permet de savoir si la perturbation s'amplifie ou se résorbe. La forme de la relation de dispersion est obtenue par analyse dimensionnelle et s'écrit :

$$\sigma = -\left(\frac{\beta}{2}\left(1 - \frac{1}{Le}\right) + \frac{1}{Le}\right) D_{th} k^2 \quad (2.31)$$

Où Le : est le nombre de **Lewis** fonction de la richesse.

En effet, il s'exprime comme le rapport de la diffusion thermique sur la diffusion moléculaire.

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho D_k C_P} = \frac{D_{th}}{D_k} \quad (2.32)$$

On peut noter que certains auteurs utilisent le rapport inverse. Le coefficient de diffusivité massique représente le transport des espèces. Celui-ci peut être modélisé par la loi de **Fick** (1855). La loi de **Fick** est purement phénoménologique et s'apparente aux lois de **Fourrier**. En effet, le flux de matière est proportionnel au gradient de la concentration.

Ce flux est donné par la loi suivante :

$$J = -D \cdot \nabla C \quad (2.33)$$

C : la concentration de l'espèce diffusante.

D : le coefficient de diffusion en m²/s dépend fortement de la température.

$$D = D_0 \cdot \exp(-E_a/kT) \quad (2.34)$$

D_0 : une constante

R : la constante des gaz parfaits.

T : la température en °K.

E_a : une énergie d'activation (si l'on considère la diffusion des atomes, alors $E_a = G_m + G_f$; si l'on parle de diffusion lacunaire, alors $E_a = G_m$).

Et ∇C est le gradient de la concentration et le signe (-) indique le sens du flux des zones les plus concentrées vers les moins concentrées. A partir de la première loi de **Fick**, on arrive à déterminer la concentration d'une espèce en fonction du temps et de l'espace : sa variation est décrite par la seconde loi de **Fick**.

Celle-ci découle de l'équation de conservation de la matière : prenons un volume de matière V délimité par une surface S , la variation dans le temps du nombre de particules de ce volume est égale au nombre de particules rentrant à travers S moins la quantité sortant (on suppose qu'il n'y a ni création, ni disparition de matière à l'intérieur de V).

Pour un problème à une dimension, la seconde loi de **Fick** est donnée par :

$$\frac{dc}{dt} = D \left(\frac{dc}{dx} \right) \quad (2.35)$$

Le réactant minoritaire diffuse dans le réactant majoritaire à une certaine vitesse. Le nombre de **Lewis** évolue donc entre le rapport de la quantité de comburant et de carburant. On voit alors l'importance du nombre de Lewis. En effet, lorsque celui-ci est supérieur à l'unité, σ tend à stabiliser le front de flamme. Alors que lorsque le nombre de Lewis est inférieur à l'unité, le terme exponentiel va croître à l'infini.

Cette dispersion induit une déflexion des lignes de courant à travers le front incliné par l'expansion des gaz (**Figure 2.10**). Des flux convectifs se développent ainsi à l'intérieur de la flamme dans des directions tangentiels au front. La déflexion de ces lignes de courant est produite par le plissement et l'expansion des gaz. La conservation de la masse nous donne les illustrations suivantes :

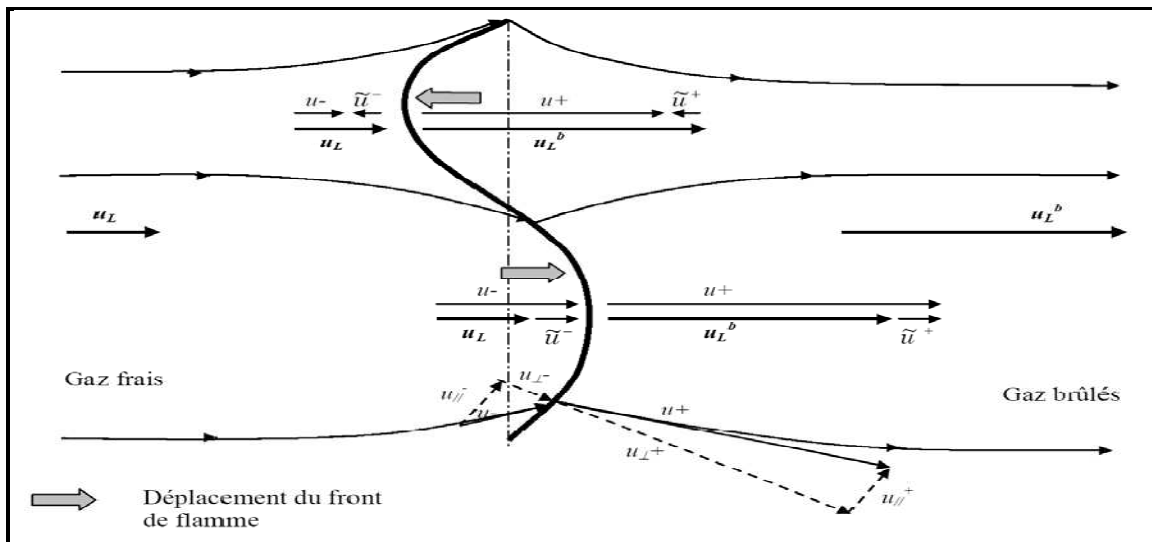


Figure 2.10 : Modification des lignes de courant produite par le plissement du front de flamme, en accord avec la théorie de **Darrieus** et **Landau**.

u_L : vitesse laminaire de l'écoulement non perturbé dans les gaz frais

u_L^b : vitesse laminaire de l'écoulement non perturbé dans les gaz brûlés

u^- : vitesse de l'écoulement dans les gaz frais

u^+ : vitesse de l'écoulement dans les gaz brûlés

$\tilde{u}^{+/-}$: Perturbation de la vitesse de l'écoulement induite par le plissement du front de flamme.

On observe ainsi une divergence et convergence des lignes de courant au passage du front de flamme. En suivant cette analyse, on constate qu'une flamme de prémélange est, par nature, instable et que les plissements augmentent de façon continue.

2.6.5 Instabilités dues aux effets thermo-diffusifs

Les instabilités hydrodynamiques ne prennent pas en compte la structure interne de la flamme. En effet, à petite échelle, la structure interne de la flamme est une zone où la température se rapproche de la température des gaz brûlés. Dans cette zone, lors de la combustion, il existe des flux diffusifs de masse et de chaleur dans la direction tangentielle au front de flamme. Lorsque celui-ci est plissé, des gradients de températures et de concentrations dans la direction tangentielle sont créés (**Figure 2.11**).

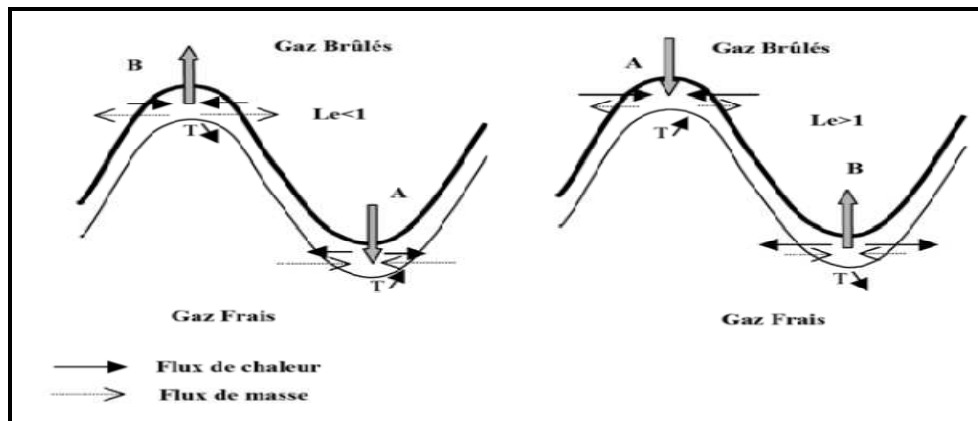


Figure 2.11 : *Effet stabilisant et déstabilisant du nombre de Lewis*

Le flux de masse proportionnel au coefficient de diffusion moléculaire D_k correspond alors à la diffusion des espèces réactives. Quant au flux de chaleur il est proportionnel au coefficient de diffusion thermique D_{th} , qui correspond à la diffusion thermique. Il se produit dans une zone du front de flamme plissé, des enrichissements de combustible ou de température, conduisant ainsi à une compétition de ces deux phénomènes, qui se traduit par le rapport D_{th}/D_m . Par conséquent si le nombre de Lewis est inférieur à l'unité, c'est la diffusion de masse qui devient prédominante et le front devient instable tandis que si Le devient supérieur à l'unité, l'effet est stabilisant, créant ainsi une atténuation des petits plis du front.

Ces phénomènes existent même lorsque la flamme n'est pas turbulente, montrant ainsi l'importance du nombre de *Lewis* et de la richesse dans la stabilisation des flammes turbulentes.

2.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons réunis des informations concernant les flammes de prémélange, de diffusion ainsi que les caractéristiques des flammes, vitesses, épaisseur, comme nous avons cité les instabilités des flammes laminaires, ce chapitre est un très bon outil pour la compréhension des flammes turbulentes qu'on va traiter dans le chapitre suivant.

CHAPITRE 3

Flamme turbulente

Chapitre 3

Flamme turbulente

La combustion turbulente se produit dans la plupart des systèmes pratiques de combustion tels que les fusées, moteur à combustion interne ou les moteurs d'avions. L'étude et la modélisation des processus turbulents de combustion est une tâche importante pour le développement et l'amélioration des systèmes pratiques (c.-à-d. pour augmenter l'efficacité et réduire la consommation de carburant et la formation de polluant).

Comme il est difficile de manipuler des processus de combustion en utilisant les techniques analytiques, les simulations numériques des écoulements turbulents réactifs sont appliquées afin d'avoir une approche proche de la réalité mais souvent elles demeurent complexes, la combustion, même sans turbulence, est un processus intrinsèquement complexe impliquant une gamme étendue d'échelle chimique de temps et d'espace.

Certains des phénomènes chimiques agissant sur les flammes ont lieu en brèves durées au-dessus de couches minces et sont associés à de très grands gradients de fractions massiques, de température et de densité. La description complète des mécanismes chimiques en flammes laminaires introduit des centaines d'espèces et des milliers de réactions impliquant ensuite des difficultés numériques considérables.

La turbulence elle-même est probablement le phénomène le plus complexe dans les caractéristiques aérodynamiques des écoulements non réactif. Les diverses échelles de temps et d'espace sont impliquées dans la modélisation et la description de la turbulence qui demeurent un sujet de recherche en permanente évolution.

La combustion turbulente résulte de l'interaction entre les réactions chimiques et la turbulence. Quand une flamme réagit avec un écoulement turbulent, la turbulence est modifiée par la combustion à travers le front de flamme en raison des fortes accélérations de l'écoulement induites par le dégagement de chaleur et en raison des grands changements de la viscosité cinématique liée aux gradients de température.

Ce mécanisme peut produire de la turbulence, appelée « turbulence induite par la flamme ». D'une part, la turbulence change la structure de flamme, qui peut accélérer la réaction chimique mais également, dans des cas extrêmes, l'empêcher d'avoir lieu complètement, ou l'extinction complète de la flamme.

Les trois principales approches numériques utilisées dans la modélisation de la combustion turbulente sont ; **(RANS)** dans cette approche, les équations décrivent les champs d'écoulement moyens et sont adaptées aux simulations industrielles pratiques, **(DNS)**, toutes les caractéristiques des échelles de temps et d'espace sont résolues mais cette approche est limitée aux configurations instructives, **(LES)** les plus grandes échelles sont explicitement calculées tandis que les effets minimes sont modélisés.

3.1 Description de la turbulence

La turbulence peut être caractérisée par des fluctuations de toutes les propriétés locales des écoulements, elle se produit pour des nombres de **Reynolds** suffisamment élevés, selon la géométrie du système. N'importe quelle propriété f est habituellement caractérisée par une moyenne \bar{f} et la contribution fluctuation f'

$$f = \bar{f} + f' \quad (3.1)$$

3.1.1 Caractéristiques de la turbulence

Une définition d'un fluide turbulent est difficile à formuler, mais il a un certain nombre de caractéristiques qui sont les suivantes :

- **Irrégularité** : un écoulement turbulent est irrégulier, chaotique et aléatoire, l'écoulement consiste dans le spectre des différentes échelles ou les plus grande échelles consiste dans la géométrie de l'écoulement, dans l'autre extrémité du spectre on trouve les petites échelles qui sont les forces de viscosité qui dissipent en énergie interne, même si la turbulence est chaotique elle est déterminée par l'équation de **NAVIER-STOCKS**.

- **Diffusivité** : Dans l'écoulement turbulent on remarque des augmentations de la diffusivité. Ceci signifie une augmentation du taux de propagation des couches limites, ensuite l'écoulement devient turbulent. L'augmentation de la diffusivité augmente la résistance (frottement) dans les écoulements internes.

- **Grand nombre de Reynolds** : la turbulence se produit à haut **Reynolds**, par exemple la transition en écoulement turbulent dans un PIPE est de $Re_D \approx 2300$ par contre dans une couche limite $Re_x \approx 100000$.

- **Tridimensionnalité** : un écoulement turbulent est toujours tridimensionnel, par contre quand il est moyenné dans le temps ou peut supposer qu'il est bidimensionnel.

- **Dissipation** : un écoulement turbulent est dissipatif ce qui implique que l'énergie cinétique dans les petites échelles est transformée en énergie interne .Les petites échèles reçoit l'énergie cinétique des grandes échelles, ces dernières reçoit à leur tour l'énergie de l'écoulement principale. C'est le phénomène de cascade.

- **Continuité** : comme on peut trouver dans un écoulement turbulent des petites échelles on peut aussi trouver des échelles moléculaires ce qui implique que l'écoulement est continu.

- **Intensité de la turbulence** : la grandeur de la turbulence est généralement caractérisée par son intensité :

$$I = \sqrt{\overline{f'^2}} / \bar{f} \quad (3.2)$$

Dans quelques applications, la valeur locale \bar{f} peut être remplacée par une valeur moyenne appropriée de référence \bar{f}_0 .

Par exemple, dans les couches limites, l'intensité de turbulence est habituellement déterminée comme le rapport des fluctuations de vitesse divisées par la vitesse moyenne du jet libre. Les valeurs typiques de l'intensité de la turbulence sont entre zéro (dans un écoulement laminaire) aux dizaines de pour cent dans des couches limites turbulentes, la vitesse locale dans un écoulement turbulent peut dévier de sa valeur moyenne par des dizaines de pour cent.

Néanmoins, l'intensité de la turbulence n'est pas un paramètre suffisant pour décrire la combustion turbulente. Une question importante se pose comment l'énergie de la turbulence est répartie sur les différentes échelles de longueur présentent dans le champ d'écoulement et quelles sont les échelles de longueur qui dissipent suffisamment d'énergie pour interagir avec le front de flamme.

Les fluctuations turbulentes sont associées à différentes échelles s'étendant du plus grandes, qui est l'échelle de grandeur intégrale l_t au plus petites, échelle de longueur de **Kolmogorov** η_k . L'échelle intégrale est habituellement près de la taille caractéristique de l'écoulement. Un nombre de Reynolds est introduit pour chaque échelle de turbulence :

$$Re(r) = \frac{u'(r)r}{\nu} \quad (3.3)$$

$u'(r)$: La vitesse caractéristique du mouvement

ν : La viscosité cinématique

r : correspond à l'échelle.

Le nombre de **Reynolds** est habituellement haut (100 à 2000 dans des la plupart des dispositifs de combustion). Puisque le nombre de **Reynolds** représente le rapport de l'inertie aux forces visqueuses, les plus grandes échelles dans un écoulement turbulent sont principalement contrôlées par les forces d'inertie et ne sont pas affectées par dissipation visqueuse.

3.1.2 Echelles caractéristique de la turbulence :

En turbulence, la vitesse de l'écoulement présente des fluctuations, de sorte qu'en un point elle s'écrit :

$$u(x, t) = \bar{u}(x, t) + u'(x, t) \quad (3.4)$$

L'analyse spectrale de la turbulence permet de connaître la répartition de l'énergie en fonction des fréquences des fluctuations. Le spectre d'énergie peut être calculé afin de représenter les différentes structures présentes dans l'écoulement (**Figure 3.1**).

Le spectre d'énergie de la turbulence met en évidence l'interaction non linéaire des différentes échelles, ainsi que le rôle des échelles moyennes dans les processus de formation, de dissipation et de transfert de l'énergie cinétique de la turbulence, autrement appelé la théorie de cascade d'énergie de *Kolmogorov*.

Le spectre peut être décomposé en trois zones distinctes. La partie fortement énergétique, située au niveau des faibles nombres d'onde, correspond à la production d'énergie du fait de la présence de gradients de vitesse dans l'écoulement. La seconde partie de ce spectre est appelée zone inertielle. Cette zone est le siège de transferts énergétiques des grandes vers les petites structures.

La dernière partie du spectre est la zone dissipative. La fréquence de rotation très rapide de ces tourbillons implique une forte dissipation visqueuse de l'énergie, sous forme de chaleur. Lorsque les tourbillons atteignent une dimension minimale (échelle de *Kolmogorov*), ils ne se cassent plus et ce sont les effets de viscosité qui prédominent.

L'échelle intégrale longitudinale est définie comme étant la taille caractéristique des tourbillons qui portent l'essentiel de l'énergie. De même, l'échelle intégrale temporelle correspond en ordre de grandeur à la durée de vie des grandes structures. Si l'on suppose que les fluctuations de vitesse sont transportées à la vitesse moyenne locale de l'écoulement (hypothèse de *Taylor*).

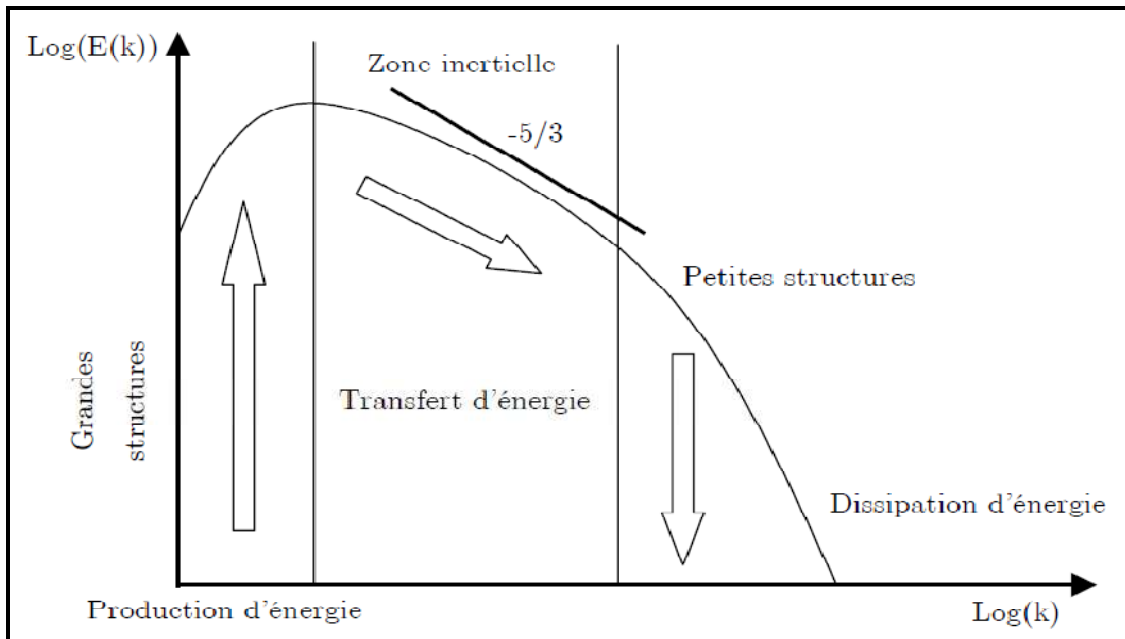


Figure 3.1 : Spectre d'énergie de la turbulence

On peut déterminer l'échelle intégrale spatiale à partir de la vitesse moyenne et le temps de l'échelle intégrale temporelle T_0 , défini comme rapport de T_0 avec les fluctuations de vitesses u' .

$$L_{lu} = UT_u \quad (3.5)$$

On peut définir le nombre de **Reynolds** turbulent afin de caractériser la turbulence :

$$Re(r) = \frac{u' L_{lu}}{\nu} \quad (3.6)$$

3.1.2.1 Échelle caractéristique

Si l'on fait une analyse dimensionnelle simple, il est possible de définir une autre échelle de longueur caractéristique l_t , liée à la production d'énergie et donc aux grandes structures :

$$l_t = u'^3 / \varepsilon \quad (3.7)$$

On définit ainsi un nouveau temps caractéristique τ_t de retournement des grosses structures, plus communément appelé « eddy turn over time », afin de mesurer le degré d'avancement d'une expérience :

$$\tau_t = \frac{l_t}{u} = u'^2 / \varepsilon \quad (3.8)$$

3.1.2.2 Échelle de Tylor

Cette échelle caractérise la dimension moyenne des tourbillons à partir desquels la dissipation visqueuse devient prédominante. Il est possible d'obtenir à partir de cette échelle une valeur approchée du taux de dissipation.

$$\varepsilon = 15\nu \left(\frac{u'}{\lambda}\right)^2 \quad (3.9)$$

3.1.2.3 Échelle de Kolmogorov :

Pour la turbulence isotrope homogène, l'énergie des grandes échelles est transférée vers les plus petites échelles par la théorie de cascade de **Kolmogorov**. Le flux d'énergie provenant d'une échelle à l'autre (due au terme de non linéaire $u_i u_j$) est constant le long des échelles et il est donné par la dissipation de l'énergie cinétique. Cette grandeur reste extrêmement difficile à mesurer puisqu'elle nécessite un instrument de mesure qui suit la même particule fluide dans son trajet turbulent. Cette dissipation est estimée comme rapport de l'énergie cinétique $u'^2(r)$ divisé par $r/u'(r)$:

$$\varepsilon = \frac{u'^2(r)}{r/u'(r)} = \frac{u'^3(r)}{r} \quad (3.10)$$

Le long de la cascade, le nombre de **Reynolds** diminue au de là Re_t et a des valeurs proche de l'unité, où les force d'inertie et les forces visqueuses s'équilibrent. Cette limite détermine la plus petite échelle existante dans l'écoulement turbulent, l'échelle de **Kolmogorov**, contrôlé par la viscosité et par le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente :

$$\eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4} \quad (3.11)$$

Pour une valeur du nombre de **Reynolds** correspondante à l'unité on a :

$$Re_k = Re_{\eta_k} = \frac{\eta_k u'_k}{\nu} = \frac{\eta_k^{3/4} \varepsilon^{1/4}}{\nu} = 1 \quad (3.12)$$

Le rapport de l'échelle intégrale de longueur, à l'échelle de longueur de **Kolmogorov**, comparant les plus grands et plus petits échelles de turbulence.

$$\frac{l_t}{\eta_k} = \frac{u'^3/\varepsilon}{(\nu^2/\varepsilon)^{1/4}} = Re_t^{3/4} \quad (3.13)$$

Sachant que : $l_t = u'^3/\varepsilon$

Le temps caractéristique de **Kolmogorov** est donné par :

$$\tau_k = \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}} \quad (3.14)$$

Pour appliquer la théorie de **Kolmogorov**, le nombre de **Reynolds** turbulent doit être relativement élevé.

3.2 Equations RANS (Reynolds-Averaged Navier–Stokes)

Cette approche de calcul est historiquement la première approche possible, comme le calcul du champ d'écoulement instantané dans une flamme turbulente était impossible. Par conséquent, des techniques ont été développées pour résoudre les valeurs moyennes de tous les paramètres. Les équations de conservation pour tous les paramètres sont ramenées à une moyenne de **Reynolds** en faisant la moyenne des équations d'équilibre instantané.

Ces dernières exigent certaines règles de fermeture ce qui implique qu'un modèle de turbulence est introduit pour résoudre le problème de la dynamique d'écoulement en combinaison avec la combustion turbulente pour décrire la conversion des espèces chimiques et le dégagement de chaleur.

La résolution de ces équations fournit les valeurs moyennes des paramètres étudiés. Pour une flamme stabilisée, la température est déterminée avec le modèle dans le point indiqué correspondant à la température moyenne en ce point.

3.2.1 Equation du bilan moyen

Dans un écoulement incompressible, la méthode **RANS** consiste à décomposer n'importe quel paramètre, en sa valeur moyenne et la fluctuation. En appliquant cette procédure sur l'équation de conservation de masse on obtient :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \bar{u}_i) = \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \bar{u}_i + \overline{\rho' u'_i}) = 0 \quad (3.15)$$

Où la quantité $\overline{\rho' u'_i}$ correspond à la corrélation entre la densité et la fluctuation de vitesse qui nécessite une modélisation. Ce terme agit comme une source de masse dans l'écoulement moyen $(\bar{\rho}, \bar{u}_i)$, ce qui est difficile à manipuler dans les codes de calcul numérique de la dynamique des fluides.

Dans un écoulement stationnaire l'équation de continuité n'est pas conservatrice en appliquant la **RANS**, dans le cas d'un écoulement compressible on a plusieurs problème de fermeture des corrélations entre le paramètre f et densité ainsi que les fluctuations $\overline{\rho' f'_i}$, pour remédier à ce problème l'approche de **Favre** est souvent appliquée :

$$\tilde{f} = \frac{\overline{f\rho}}{\bar{\rho}} \quad (3.16)$$

N'importe quel paramètre est devisé en moyenne et une fluctuation comme suit :

$$f = \tilde{f} + f'' \quad \widetilde{f''} = 0 \quad (3.17)$$

Equation de continuité :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (3.18)$$

Equation de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho u_i'' u_j''}) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (3.19)$$

Equation de conservation des espèces :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{Y_k V_{ki}}{\partial x_k} - \overline{\rho Y''_k u_i''} \right) + \bar{\omega}_k \quad (3.20)$$

Enthalpie :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}_s) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{h}_s \tilde{u}_i) &= \frac{\overline{Dp}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_k} - \overline{\rho h''_s u_i''} \right) + \overline{\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} - \overline{(\rho \sum_{k=1}^N V_{k,l} Y_k h_{s,k})} + \bar{\omega}_T \\ \frac{\overline{Dp}}{Dt} &= \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \overline{u_i \frac{\partial p}{\partial x_i}} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \tilde{u}_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (3.21)$$

L'objectif de la combustion turbulente est de trouver une solution de fermeture du problème de **Favre**.

3.2.2 Tenseur de Reynolds $\overline{u_i'' u_j''}$

Ces termes sont clôturés par un modèle de turbulence. La fermeture peut être faite directement ou en dérivant des équations d'équilibre pour les efforts de Reynolds. La plupart des applications de combustion sont basés sur les modèles classiques de turbulence développés pour des écoulements non-réactifs, tel que le modèle $k-\varepsilon$, simplement réécrit en termes d'une moyenne de **Favre**.

Les effets de dégagement de chaleur sur les efforts de **Reynolds** ne sont pas explicitement pris en compte.

3.2.3 Flux d'espèce $\widetilde{Y''_k u''_i}$ et d'enthalpie $\widetilde{h''_k u''_i}$:

Généralement le problème de fermeture pour ce genre de problème est le suivant :

$$\overline{\rho Y''_k u''_i} = \frac{\mu_t}{Sc_{kt}} \frac{\partial \widetilde{Y''_k}}{\partial x_i} \quad (3.22)$$

Où μ_t : est la viscosité turbulente estimée du model

Sc_{kt} : est le nombre de **Schmidt** turbulent de l'espèce.

3.3 Model classique de turbulence pour le tenseur de Reynolds :

Après la prétention de viscosité turbulente proposée par **Boussinesq** les tenseurs turbulents de **Reynolds** $\overline{\rho u''_i u''_j}$, sont généralement décrits en utilisant le tenseur de contraintes visqueuses τ_{ij} et cette expression maintenue pour les fluides newtoniens.

$$\overline{\rho u''_i u''_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u''_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u''_j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \widetilde{u''_k}}{\partial x_k} \right) + \frac{2}{3} \overline{\rho k} \quad (3.23)$$

Où $\mu_t = \overline{\rho} \nu_t$ ou ν_t est la viscosité cinématique turbulente

Où l'énergie cinétique turbulente est $k = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \overline{u''_k u''_k}$

3.3.1 Model zéro équation

Prandtl, a proposé de lier la viscosité turbulente au gradient de vitesse par l'intermédiaire l'expression algébrique suivante :

$$\mu_t = \overline{\rho} l_m |\widetilde{S}| \quad (3.24)$$

Où $|\widetilde{S}|$ est tenseur de contrainte

$$|\widetilde{S}| = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u''_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u''_j}}{\partial x_i} \right) \quad (3.25)$$

l_m : la longueur de mélange qui est une donnée. Plusieurs lois empiriques sur le model l_m mais il reste fortement dépendant de la géométrie d'écoulement.

3.3.2 Model à une équation : Prandtl-Kolmogorov

Une formulation plus généralisée incorpore une fermeture de l'équation conservation par l'énergie cinétique turbulente k . La viscosité turbulente est alors modélisée comme :

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} l_{pk} \sqrt{k} \quad (3.26)$$

Où C_μ : est une constante (généralement $C_\mu = 0.09$)

l_{pk} : est une longueur caractéristique, déterminer par des lois empiriques.

3.3.3 Modèle à deux équations model: $k - \varepsilon$

Dans cette approche la viscosité turbulente est la suivante :

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.27)$$

L'énergie cinétique turbulente k et son taux de dissipation ε sont décrits par la fermeture de deux équations d'équilibre suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu - \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial}{\partial x_i} \right] + P_K - \bar{\rho} \varepsilon \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}) \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu - \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial}{\partial x_i} \right] + C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.29)$$

Le terme source est donné par :

$$P_k = -\overline{\rho u_i'' u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}} \quad (3.30)$$

Où les contraintes de **Reynolds** $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ sont déterminées en appliquant l'expression de **Boussinesq** et les constantes sont les suivantes :

$$C_\mu = 0.09 \quad ; \quad \sigma_k = 1.0 \quad ; \quad \sigma_\varepsilon = 1.3 \quad ; \quad C_{\varepsilon 1} = 1.44 \quad ; \quad C_{\varepsilon 2} = 1.92$$

3.4 DNS (Direct Numerical Simulations)

Lancé dans les années quatre vingt, les simulations numériques directes (**DNS**) ont changé les études et la modélisation la combustion turbulente de. Résolvant les équations d'écoulement réactif, sans modèle de turbulence, les **DNS** ont offert une nouvelle méthodologie d'étude des interactions entre la flamme, la turbulence et le progrès significatif a été réalisé pour des modèles et pour des principes fondamentaux de la combustion turbulente.

3.4.1 Rôle du DNS dans l'étude de la combustion turbulente :

Une simulation numérique complète des équations de bilan tridimensionnelles décrivant un écoulement chimiquement réactif et incluant le transport des espèces, la cinétique chimique est encore irréalisable. Par conséquent de cette limitation divers niveaux de simplification sont exigés.

En effet, de telles simplifications sont également souvent exigées pour comprendre les mécanismes de base d'un phénomène spécifique. Des prétentions peuvent être employées pour isoler une réaction élémentaire des interactions turbulence-combustion, en quelque sorte inaccessible expérimentalement.

Par exemple, le dégagement de chaleur peut être négligé pour étudier l'influence de la turbulence sur la réaction chimique sans effets simultanés de processus chimique sur l'écoulement par des variations de propriétés du fluide et de densité. Les *DNS* fournissent les meilleurs résultats seulement une fois réalisé en même temps que l'analyse théorique et les expériences.

3.4.2 Méthode numérique appliquée en DNS :

La simulation numérique directe des écoulements réactifs diffère de plusieurs manières du *DNS* des ceux non-réactifs où la limitation fondamentale est déterminée par le nombre de *Reynolds* turbulent. La simulation des écoulements réactifs exige un ensemble d'équations de bilan et le choix des propriétés de transport des espèces et de cinétique chimique. Pour faire une approche d'un écoulement avec ce modèle on suit les étapes suivantes :

-Formulation : choisissant les équations de bilan et des hypothèses (compressible, faible nombre de mach, incompressible).

-Sélection du système chimique : en plus des hypothèses et des équations de bilan la *DNS* d'un écoulement réactif, une description chimique est obligatoire, les chimistes spécialisés exigent qu'un calcul réaliste d'une combustion air-hydrocarbure doivent introduire au moins une vingtaine d'espèces chimiques, mais en réalité un tel calcul numérique est impossible.

-Les conditions initiales et au limites : l'introduction des conditions initiales et celles aux limites est une autre difficulté.

-Cas bidimensionnel au lieu du tridimensionnel : comme les ressources informatique sont limitées, il est souvent nécessaire d'exécuter les simulations d'écoulement réactif en deux dimensions, manquant de ce fait tous les effets réalistes tridimensionnels de la turbulence.

-Description des pertes de chaleur : le calcul d'un écoulement réactif inclue une description du transfert de chaleur par rayonnement et convection .Les pertes de chaleur dans la zone réactive de la flamme régissent le processus d'extinction de la flamme et le régime de combustion ou l'interaction de la flamme avec les parois de la chambre de combustion.

-Schéma numérique et algorithme de résolution : Multiples algorithmes numériques sont employés pour la simulation numérique directe des écoulements réactifs. Pour simuler les flammes de densité constantes, les codes incompressibles classiques qui sont développés pour des écoulements non réactifs et généralement basés sur des méthodes spectrales peuvent être employé. Ces applications sont précises mais limitées aux conditions périodiques.

La majorité des simulations directes de la combustion turbulente sont basées sur un maillage régulier non-structuré car les flammes turbulentes se déplacent rapidement dans le domaine entier, se déforme considérablement.

3.5 LES (Large Eddy Simulation) :

Relativement récente, la simulation aux grandes échelles apparaît comme intermédiaire entre la *RANS* et la *DNS*. Il s'agit cette fois de calculer complètement les plus grandes structures turbulentes présentes dans l'écoulement comme en *DNS* tandis que seul l'effet des plus petites structures est modélisé comme en *RANS*. Nettement plus coûteuse que la *RANS* (il faut calculer un écoulement instationnaire, tridimensionnel, et renoncer aux simplifications usuelles de la *RANS* telles que la symétrie, la bidimensionnalité etc.), cette approche est beaucoup moins limitée que la simulation directe et donne accès à une précision jamais égalée avec la *RANS*.

L'échelle de coupure est en principe choisie dans la zone inertielle du spectre de turbulence en raison des hypothèses faites pour développer les modèles. L'impact des modèles sur le résultat final est logiquement moindre qu'en **RANS**.

La Simulation aux Grandes Echelles est reconnue comme une approche complémentaire de la traditionnelle approche **RANS**. Bien que conceptuellement très différentes, ces deux approches ont pour but de produire de nouveaux systèmes d'équations de conservation permettant de reproduire et comprendre les écoulements turbulents.

En appliquant des opérateurs au système d'équations de conservation d'un écoulement turbulent compressible, de nouvelles équations de conservation sont obtenues. Les termes non modélisés apparaissent et nécessitent la création de modèles spécifiques pour pouvoir assurer la fermeture des équations. Les principales différences entre les deux approches proviennent du choix de l'opérateur employé :

Approche **RANS** L'opérateur est une moyenne temporelle ou une moyenne d'ensemble sur un certain nombre de réalisations du champ fluide .Les termes à fermer sont représentatifs de la physique pour toutes les échelles de la turbulence.

L'approche de la simulation aux grandes échelles, l'opérateur est un filtre local, de taille fixée, indépendant du temps, appliqué à une seule réalisation du champ fluide. De ce moyennage spatial résulte une séparation entre les grandes et les petites échelles de la turbulence.

Les termes à fermer sont représentatifs de la physique pour les échelles de la turbulence plus petites qu'une échelle de coupure. Cette échelle de coupure entre les grandes échelles résolues et les petites échelles modélisées est liée à la taille du filtre.

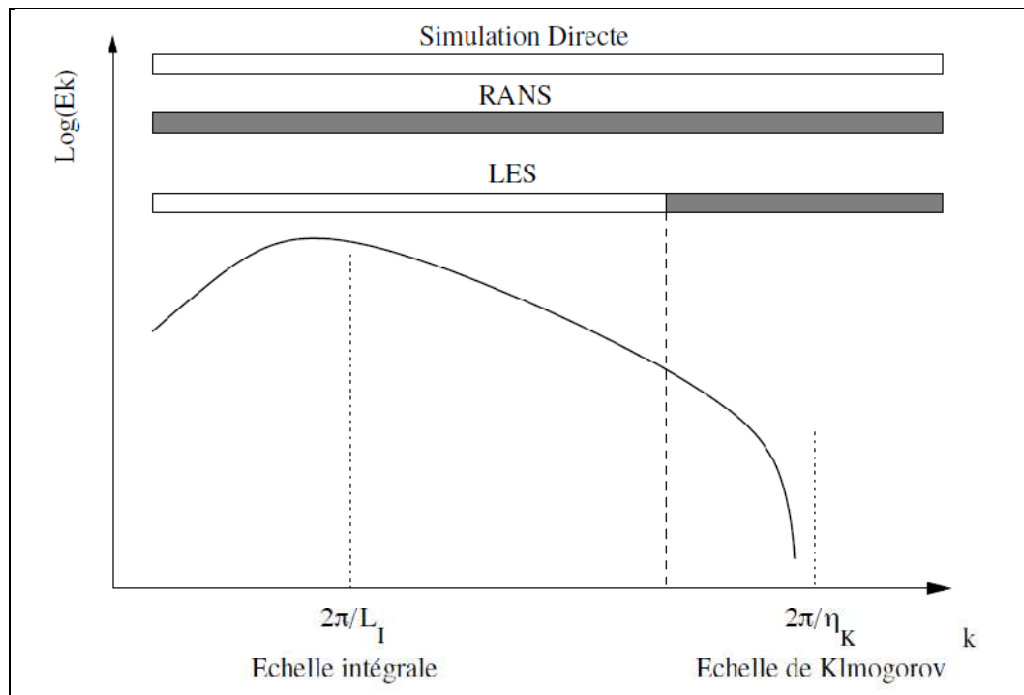


Figure 3.2 : différentes simulation numériques

3.6 Notion de flamme turbulente prémélangée

3.6.1 Vitesse de flamme turbulente

Dans les différents modèles de combustion existants, il est important de bien différencier les vitesses de flammes utilisées en distinguant principalement une quantité cinématique et une quantité caractérisant le taux de réaction de la flamme.

Dans les modèles de combustion où le front de flamme est considéré comme une surface infiniment fine, la vitesse fondamentale est une quantité cinématique dénommée « vitesse de déplacement », normale au front de flamme et qui permet la description des processus chimiques.

Cette vitesse est définie précisément au niveau de la zone de préchauffage et c'est par son intermédiaire qu'est effectué le couplage entre le taux de réaction locale des flammes avec l'écoulement et la déformation de la flamme. Elle présente l'avantage de pouvoir être déterminée localement de façon expérimentale et numérique.

En outre, la vitesse caractéristique est une mesure du taux de réaction par unité de surface du front de flamme. Cette vitesse, communément appelée vitesse de consommation (ou combustion) S_c , représente alors la consommation massique des gaz frais caractérise une intensité de combustion locale.

$$S_c = \omega_L / \rho_u Y_{R,u} \quad (3.31)$$

Où ω_L : le taux de consommation par unité de surface.

Il permet de déterminer le taux de réaction moyen, terme qui intervient dans les équations d'aérothermochimie. On note également la définition d'une vitesse de propagation moyenne de flamme turbulente S_t qui intègre le déplacement de flamme dû à la diffusion des espèces et à l'expansion de la flamme créée par le gradient de température. Elle représente le flux massique moyen normal à une unité de surface.

On constate en général que cette vitesse dépend fortement des fluctuations de vitesses de l'écoulement turbulent et de la vitesse de flamme laminaire :

$$\frac{S_T}{S_l} = 1 + \alpha \left(\frac{u'}{S_l} \right)^n \quad (3.32)$$

Où α : est une valeur dépendante du combustible utilisé, de l'échelle intégrale de turbulence et du nombre de Reynolds et n est un facteur d'expansion.

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

Cette relation reste approximative car la vitesse de flamme est une grandeur assez mal définie et reste dépendante de la configuration expérimentale étudiée.

3.6.2 Les différents régimes de combustion turbulente prémélangée

Afin de comprendre les phénomènes physiques prépondérants dans une configuration donnée et quelles étaient leurs différentes interactions, la combustion turbulente a pu être classifiée depuis les années 1980, sous forme de diagrammes. Ces derniers offrent un moyen « pratique » mais qualitatif, de classer les écoulements réactifs suivant différents régimes de combustion.

Ces diagrammes présentent les régimes de combustion dans le plan :

$x = L_0/\delta_L, y = u'/S_L$. S_{L0} : est la vitesse de combustion laminaire.

δ_{L0} : L'épaisseur de flamme et l'échelle intégrale.

Trois nombres adimensionnels permettent d'identifier les régimes de combustion. Le nombre de **Reynolds** turbulent compare l'intensité de l'agitation turbulente à celle des forces visqueuses.

$$Re_t = \frac{L_t u'}{\nu} \quad (3.33)$$

Le nombre de **Damköhler** compare le temps caractéristique de la turbulence τ_t avec celui de la chimie τ_c

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{L_t S_L}{\delta_L u'} \quad (3.34)$$

Le nombre de **Karlovitz** compare le temps caractéristique des structures turbulentes les plus rapides avec celui de la chimie.

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_k} = \left(\frac{u'}{S_L}\right)^{3/2} \left(\frac{\delta_L}{L_t}\right)^{1/2} \quad (3.35)$$

Ces trois nombres sont reliés par l'équation suivante :

$$Re = Ka^2 Da^2 \quad (3.36)$$

Le diagramme le plus souvent rencontré est celui de **Borghi** (Figure 3.3)

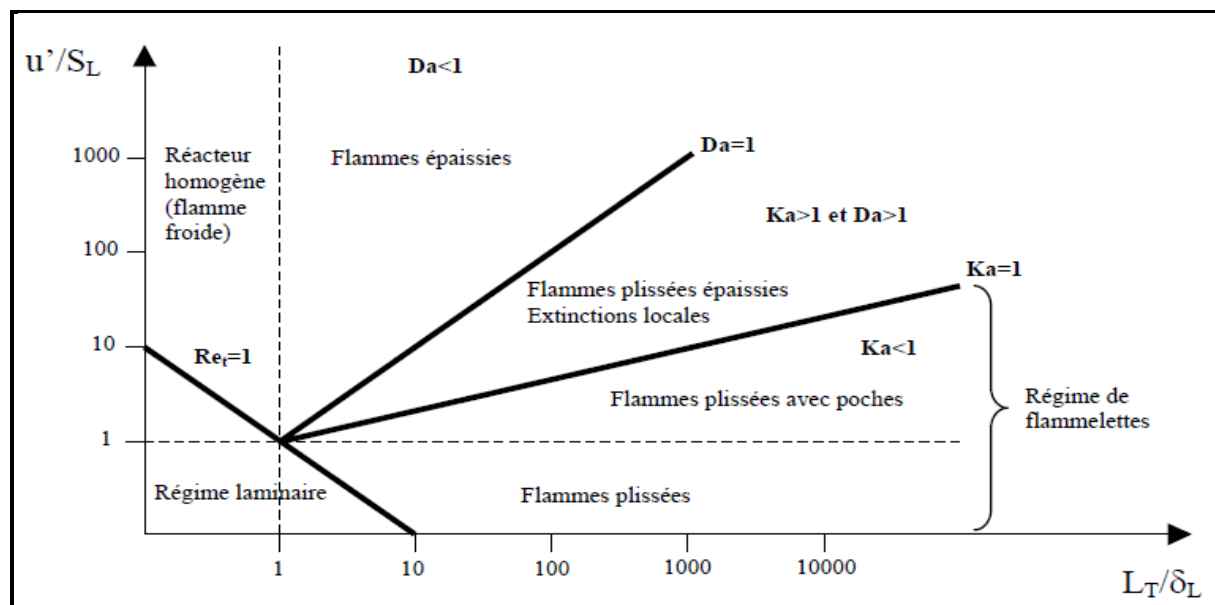


Figure 3.3 : Diagramme de combustion prémélangée

Ce diagramme d'approche classique permet de mettre en évidence trois grands types de flammes : les flammes plissées, les flammes plissées-épaissies et les flammes épaissies. Dans ce diagramme de combustion, on retrouve le critère de **KLIMOV-WILLIAMS** ($Ka=1$), correspondant à une épaisseur de flamme égale à l'échelle de **Kolmogorov**. En dessous de cette ligne, la flamme est plus mince que n'importe quelle échelle de turbulence.

Cette zone s'appelle le régime des flammelettes : celles-ci représentent la structure de flamme élémentaire de référence que l'on fait intervenir pour décrire la combustion turbulente. Dans le cas de la combustion d'un prémélange, la structure de flammelette est décrite en fonction du degré d'avancement de la réaction, qui varie de façon généralement raide de zéro à un.

Dans le cas de la combustion non prémélangée, la structure de flammelette est décrite en fonction de la fraction de mélange qui varie elle aussi de zéro à un, mais de manière beaucoup moins raide. L'utilisation statistique de ces paramètres conditionnels (le degré d'avancement ou la fraction de mélange) ne se justifie que si la durée de vie ou l'épaisseur des flammelettes invoquées est inférieure aux échelles de la turbulence.

Cette condition est généralement sans ambiguïté dans les flammes de prémélange où l'épaisseur de flammelette est bien définie, mais elle est très délicate dans les flammes non prémélangées, où l'épaisseur de flammelette n'est compatible avec les échelles turbulentes que dans des régions et régimes particuliers.

Le taux d'étirement d'une flammelette (contrainte de cisaillement) épaissit et atténue sa structure parfois même jusqu'à l'extinction. Pour les critères de délimitation, on suppose que la turbulence est isotrope et homogène, ce qui est rarement le cas dans des systèmes réels.

Ces analyses reposent également sur des réactions chimiques assimilées à une étape avec quelques espèces, alors qu'en réalité interviennent plusieurs centaines d'espèces et de réactions. En outre, les méthodes pour mesurer ou calculer certaines grandeurs ne sont pas toujours exactement les mêmes pour tous les auteurs et n'ont pas des valeurs similaires dans toute la flamme.

3.6.2.1 Les flammes minces plissées

Ce régime dit « de flammelette » est défini pour $Re_t \gg 1$, $Ka \ll 1$ et $Da \ll 1$. Les plus petites échelles de la turbulence ne peuvent pas entrer dans la structure de flamme laminaire. Ces flammes sont un ensemble de flammelettes de type laminaire plissées par la turbulence dont les échelles de longueur sont plus grandes que l'épaisseur de flamme laminaire.

Ce type de flamme est restreint au domaine $\eta > \delta_L$. Pour ces flammes, on peut observer deux sous régimes qui sont :

-D'une part le régime de flamme plissée ($\frac{u'}{S_{l0}} < 1$). La vitesse de rotation des plus grosses structures ne peut pas plisser le front de flamme suffisamment pour provoquer une interaction entre les flammes, donnant en fait une interaction avec la turbulence relativement faible et une prédominance de la propagation laminaire de la flamme.

-D'autre part le régime des flammes plissées avec des poches, quand ($\frac{u'}{S_{l0}} > 1$) où les plus gros tourbillons sont suffisamment énergétiques pour plisser la flamme et provoquer une interaction entre les fronts de flamme voisins.

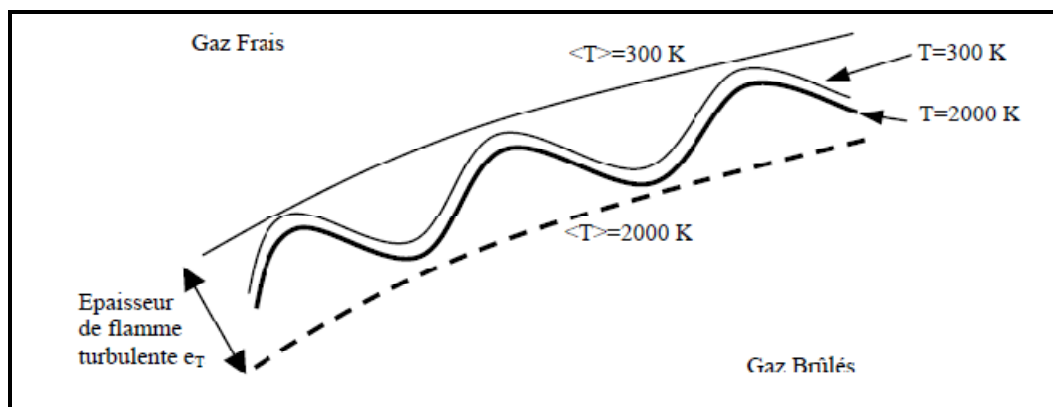


Figure 3.4 : flamme mince plissées

3.6.2.2 Les flammes plissées :

Ce régime est donné pour $Re_t \gg 1$, $Ka \gg 1$ et $Da \ll 1$. Dans ces conditions, les structures turbulentes sont capables de pénétrer dans la zone de préchauffage et de l'épaissir, mais ne peuvent pas affecter la zone de réaction, qui reste mince et relativement proche de l'épaisseur de zone de réaction d'une flamme laminaire.

Les petites échelles épaississent la zone de préchauffage tandis que les grandes échelles plissent le front de flamme.

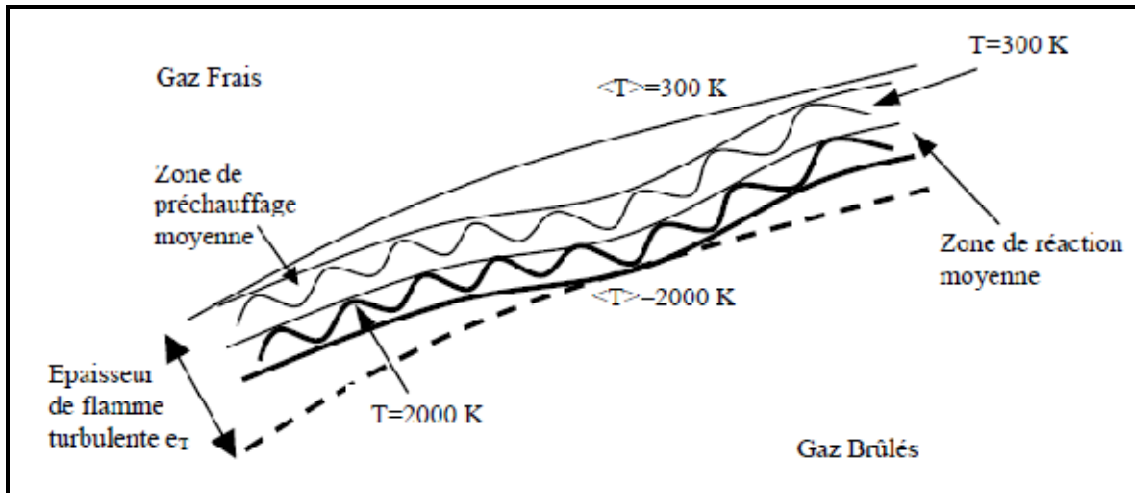


Figure 3.5 : flamme épaissie

3.6.2.3 Les flammes épaissies :

Ce dernier régime est défini pour $Re_t \gg 1$, $Ka \gg 1$ et $Da \ll 1$ où les zones de préchauffage et de réaction sont perturbées par la turbulence, ne permettant pas d'identifier des structures laminaires. Ici, la flamme est non courbée et très épaisse (très supérieure à δ_{L0}). Les perturbations turbulentes provoquent de nombreuses interactions, donnant des variations de l'épaisseur de la zone de préchauffage à l'intérieur de l'épaisseur moyenne, sur tout le front de flamme.

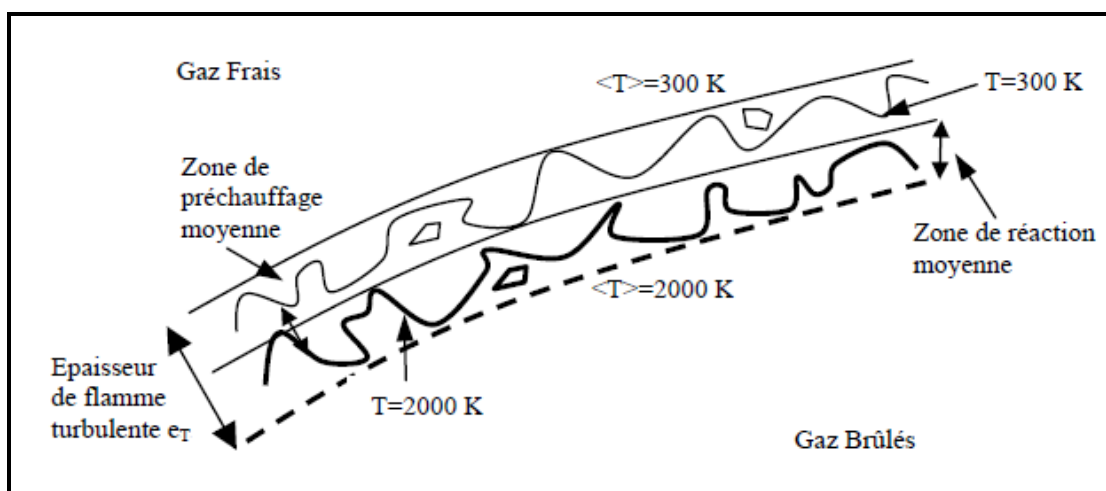


Figure 3.6 : flamme plissée

3.7 Modélisation de la combustion turbulente

Application de la simulation aux grandes échelles sur la combustion :

Dans la LES des flammes de prémélange, on rencontre deux problèmes principaux :

Discrétisation de la flamme : l'épaisseur d'une flamme de prémélange est d'environ 0.1 à 1 millimètre et généralement beaucoup plus petite que la taille de la maille de *LES*. En fait, la contribution la plus importante des taux de réaction se produit probablement au niveau sous-maille suggérant que ce modèle pourrait être impossible.

Turbulence résiduelle : les petites échelles de turbulence ont une influence sur la flamme mais ces dernières ne sont pas résolues en *LES*, leur modélisation est obligatoire afin de prévoir leur influence sur la combustion.

Pour remédier à ces problèmes trois approches ont été proposées :

- simulation d'une flamme artificiellement épaissie.
- utilisation d'une technique de cheminement de front de flamme (G-équation)
- filtrage avec un filtre gaussien plus grand que la grosseur de maille.

Dans certaines approches, ce problème théorique est parfois évité en développant des modèles de sous-maille pour des taux de réaction filtrés.

3.7.1 Equation LES

La quantité filtrée f est la quantité résolue par la simulation numérique la quantité de sous-maille non résolue est :

$$f' = f - \bar{f} \quad (3.37)$$

Dans le cas d'un écoulement à densité variable, une moyenne de Favre est la quantité filtrée f est la quantité :

$$\tilde{f}\bar{\rho} = \overline{f\rho} \quad (3.38)$$

Les équations de conservation d'un écoulement turbulent réactif en approche *LES* sont obtenues par filtrage des équations *DNS*:

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial t} + \Delta \cdot \bar{F} = 0 \quad (3.39)$$

Le tenseur des flux est défini par $\bar{\mathbf{F}} = (\bar{\mathbf{f}} ; \bar{\mathbf{g}} ; \bar{\mathbf{h}})^T$. Le terme source est défini par \mathbf{s} .

Les flux $\bar{\mathbf{f}}$, $\bar{\mathbf{g}}$, $\bar{\mathbf{h}}$ sont divisés en trois contributions :

$(\bar{\mathbf{f}} ; \bar{\mathbf{g}} ; \bar{\mathbf{h}})^I$ contribution non visqueuse.

$(\bar{\mathbf{f}} ; \bar{\mathbf{g}} ; \bar{\mathbf{h}})^V$ contribution visqueuse.

$(\bar{\mathbf{f}} ; \bar{\mathbf{g}} ; \bar{\mathbf{h}})^t$ contribution sous maille.

- Termes non visqueux

Les trois composantes du tenseur non visqueux sont définies par :

$$\bar{\mathbf{f}}^I = \begin{pmatrix} \bar{\rho}\tilde{u}^2 + \bar{P} \\ \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{v} \\ \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{w} \\ \bar{\rho}\tilde{E}\tilde{u} + \bar{P}u \\ \bar{\rho}_k\tilde{u} \end{pmatrix}, \bar{\mathbf{g}}^I = \begin{pmatrix} \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{v} \\ \bar{\rho}\tilde{v}^2 + \bar{P} \\ \bar{\rho}\tilde{v}\tilde{w} \\ \bar{\rho}\tilde{E}\tilde{v} + \bar{P}v \\ \bar{\rho}_k\tilde{v} \end{pmatrix}, \bar{\mathbf{h}}^I = \begin{pmatrix} \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{w} \\ \bar{\rho}\tilde{v}\tilde{w} \\ \bar{\rho}\tilde{w}^2 + \bar{P} \\ \bar{\rho}\tilde{E}\tilde{w} + \bar{P}w \\ \bar{\rho}_k\tilde{w} \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

- Termes visqueux en non réactif

Les trois composantes du tenseur visqueux non réactifs sont définies par :

$$\bar{\mathbf{f}}^V = \begin{pmatrix} -\bar{\tau}_{xx} \\ -\bar{\tau}_{yy} \\ -\bar{\tau}_{xz} \\ -(\bar{u}\bar{\tau}_{xx} + \bar{v}\bar{\tau}_{xy} + \bar{w}\bar{\tau}_{xz}) + \bar{q}_x \\ \bar{J}_{x,k} \end{pmatrix}$$

$$\bar{\mathbf{g}}^V = \begin{pmatrix} -\bar{\tau}_{xy} \\ -\bar{\tau}_{yy} \\ -\bar{\tau}_{yz} \\ -(\bar{u}\bar{\tau}_{xy} + \bar{v}\bar{\tau}_{yy} + \bar{w}\bar{\tau}_{yz}) + \bar{q}_y \\ \bar{J}_{y,k} \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

$$\bar{\mathbf{h}}^V = \begin{pmatrix} -\bar{\tau}_{xz} \\ -\bar{\tau}_{yz} \\ -\bar{\tau}_{zz} \\ -(\bar{u}\bar{\tau}_{xz} + \bar{v}\bar{\tau}_{yz} + \bar{w}\bar{\tau}_{zz}) + \bar{q}_z \\ \bar{J}_{z,k} \end{pmatrix}$$

Les termes de diffusion en **LES** s'écrivent :

$$\bar{\tau}_{ij} = -\mu \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad i, j=1, 3 \quad (3.42)$$

Le tenseur de diffusion des espèces :

$$\bar{j}_{i,k} = -\rho D_k \frac{M_k}{M} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} + \rho Y_k V_i^C \quad (3.43)$$

Le flux de chaleur \bar{q}_i

$$\bar{q}_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{conduction}} + \underbrace{\sum_{k=1}^N \bar{j}_{i,k} h_{s,k}}_{\text{diffusion des espèces}} \quad (3.44)$$

Les variations spatiales des flux de diffusion moléculaire sont négligeables et un modèle de gradient suffit pour les modéliser. Les équations de conservation font apparaître des termes de sous-maille.

Les trois composantes du tenseur de sous-maille sont définies par :

$$\bar{\mathbf{f}}^t = \begin{pmatrix} -\bar{\tau}_{xx} \\ -\bar{\tau}_{yy} \\ -\bar{\tau}_{xz} \\ \bar{q}_x \\ \bar{j}_{x,k} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{g}}^t = \begin{pmatrix} -\bar{\tau}_{xy} \\ -\bar{\tau}_{yy} \\ -\bar{\tau}_{yz} \\ \bar{q}_y \\ \bar{j}_{y,k} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{h}}^t = \begin{pmatrix} -\bar{\tau}_{xz} \\ -\bar{\tau}_{yz} \\ -\bar{\tau}_{zz} \\ \bar{q}_z \\ \bar{j}_{z,k} \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

Les différents termes s'écrivent :

Le tenseur des contraintes $\bar{\tau}_{ij}^t$

$$\bar{\tau}_{ij}^t = -\bar{\rho} \nu_t \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \bar{\rho} \nu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad i, j = 1, 3 \quad (3.46)$$

Le tenseur de diffusion des espèces $\bar{j}_{i,k}$

$$\bar{j}_{i,k}^t = -\rho D_k \frac{M_k}{M} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} + \rho \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^{C,t} \quad (3.47)$$

Le nombre de Schmidt turbulent est égale à l'unité est le même pour toutes les espèces.

Le flux de chaleur \bar{q}_i^t

Il est donné par :

$$\bar{q}_i^t = \rho u_i E - u_i E \quad (3.48)$$

Modèle :

$$\bar{q}_i^t = \underbrace{\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i}}_{\text{conduction}} + \underbrace{\sum_{k=1}^N \bar{J}_{i,k} \tilde{h}_{s,k}}_{\text{diffusion des espèces}} \quad (3.49)$$

Et

$$\lambda_t = \mu_t \frac{\bar{c}_p}{Pr^t} \quad (3.50)$$

Les vitesses de correction sont obtenues à partir

$$V_i^c + V_i^{c,t} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho} S_{C,k}^t} + \frac{\mu}{\bar{\rho} S_{C,k}^t} \right) \frac{M_k}{M} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \quad (3.51)$$

3.7.2 Model de G-équation

Cette approche traite le problème de la turbulence en supposant que la flamme turbulente est infiniment mince. Si la flamme turbulente est considérée comme zone de réaction, ce modèle couvre réellement toutes les flammes mince-froissées et épaisse-froissées.

La flamme est prise comme des iso-surface $G = G_0$, où G suit une équation qui propage la surface G_0 avec la vitesse. Car cette équation est seulement valide à $G=G_0$, le champ est à plusieurs reprises initialisé avec une fonction de distance $|\nabla G|$ ce qui conserve la surface G_0 .

Ceci est démontré dans la figure (3.7), où les gaz prémélangés entrent de la gauche et réagissent dans une flamme stabilisée. Cette configuration indique un problème lié à cette approche, car le jet de gaz prémélangé est entouré par un jet de gaz froid et mince, la vraie flamme ne commencera pas directement par une expansion soudaine.

Ceci exigerait un « trou » dans le G_0 -surface qui n'est pas permis. Une entrée nécessaire pour le modèle est la vitesse de flamme turbulente qui doit être spécifiée.

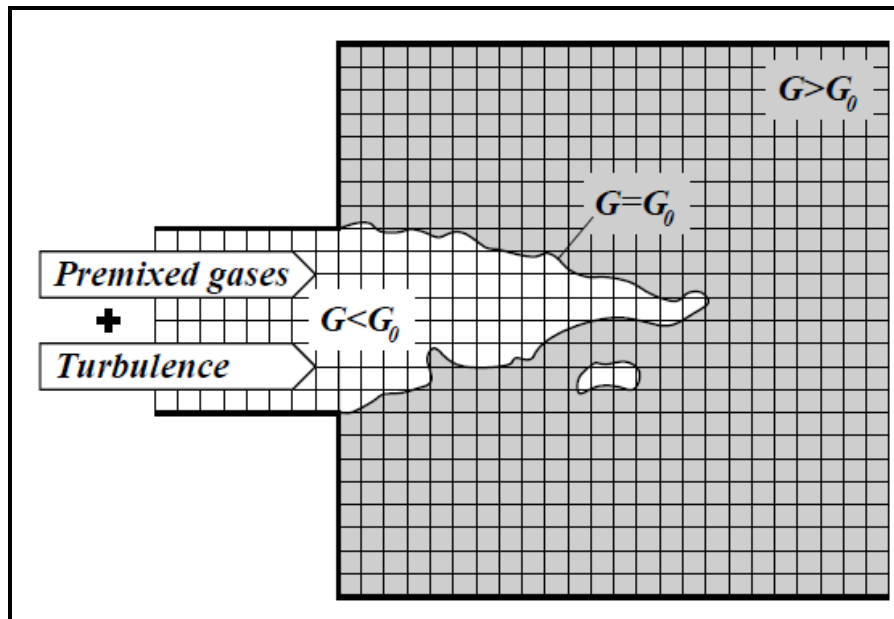


Figure 3.7 : modèle G équations

Ce modèle peut propager l'interface de flamme avec une bonne exactitude. La véritable difficulté est d'inclure les effets de la flamme dans le champ d'écoulement. La première approche est d'employer un terme de source, des calculs laminaires de flamme, de la composition et de la température des gaz brûlés qui sont connus. Par conséquent, un terme source approprié est ajouté à l'équation d'énergie (ou une équation équivalente).

Noter que les équations d'espèces sont remplacées par une seule grandeur scalaire conservatrice (supposant que tous les nombres de *Schmidt* sont égaux) de cette manière toutes les concentrations des espèces peuvent être déterminées. C'est le terme source de l'énergie qui formera le profil l'énergie et de la densité et les deux équations doivent être résolues avec précision.

Par conséquent, problème de la turbulence résiduelle n'est pas encore entièrement résolu. Cette limite de source devrait causer un passage de l'état d'imbrûlé à l'état brûlé de l'énergie et la densité. Les schémas fondamentaux devraient se reproduire la condition de passage sans produire une dissipation artificielle. Les seuls schémas numériques qui satisfont cette condition sont les schémas *WENO*.

Cependant, ils présentent une complexité considérable et un coût énorme. Si le changement de densité est trop fin du aux inexactitudes numériques ou aux étendues des termes source, des effets de dilatation sur la surface de flamme ne seront pas tenus en compte correctement. Ceci ajoute une incertitude additionnelle à la modélisation de la vitesse flamme turbulente.

La deuxième approche (plus employée) est d'approcher directement la densité, la température et la concentration d'espèces en fonction du G ., dans ce cas-ci, le problème est de coupler le champ de densité au solveur de pression.

3.7.3 L'épaisseur de la flamme artificielle

Comme dans le model G -équation est supposée la flamme comme une surface infiniment mince est intéressant d'un point de vue de modélisation mais en pratique, l'analyse numérique imposent toujours une certaine épaisseur de la flamme.

Ceci compromettra l'exactitude l'approche si l'épaisseur de la flamme n'est pas commandée et si son influence n'est prise en compte dans la modélisation de combustion. Une autre méthode est utilisée au lieu de l'approche théorique de G -équation « d'épaisseur nulle » elle consiste d'établir une méthode où la flamme a une épaisseur commandée et différente de zéro. Ceci mène au modèle artificiellement épaissi de la flamme (TFLES).

L'épaisseur

L'analyse du front de flammes de prémélange laminaire fournis une expression simple pour la vitesse de propagation et l'épaisseur laminaire de flamme :

$$S_L \propto \sqrt{\lambda_l A_g} \quad \delta \propto \frac{\lambda_l}{S_L} \quad (3.52)$$

Comme dans l'approche de G -équation, l'influence de la turbulence non définie sur la flamme doit être modélisée par une vitesse turbulente résiduelle de la flamme. En plus on tenir compte également de l'épaississement modifié de la flamme et la précision des résultats. Un exemple de cet effet est montré dans **Figure (3.8)**. La flamme non-épaissie est du côté droit (réactifs à gauche, produits à droits).

La turbulence est une surface fortement froissée. Le même champ de turbulence agit sur la flamme artificiellement épaissie du côté gauche. Il est légèrement froissé et la consommation des gaz frais est inférieure comparant à une flamme réelle. La « fonction d'efficacité » tient compte des effets l'épaississement et de la turbulence résiduelle sur la vitesse turbulente de flamme.

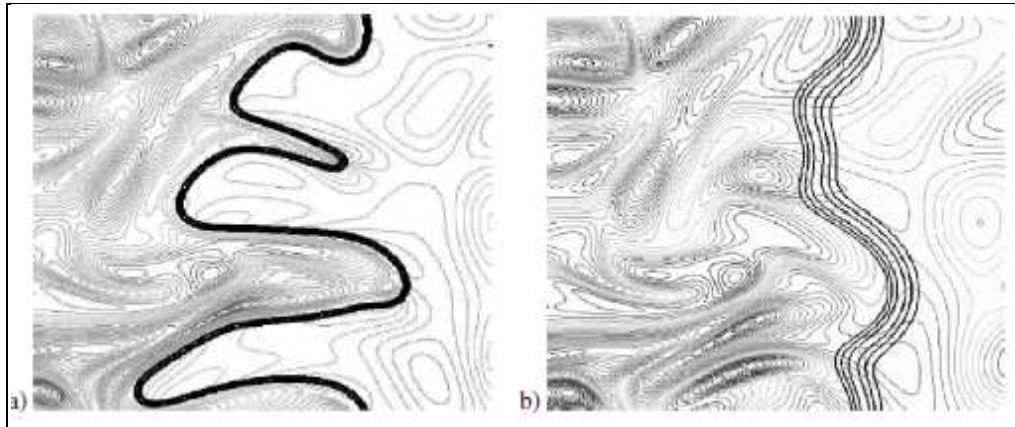


Figure 3.8 : *flamme épaissie artificiellement*

3.8 Méthode numérique

Pour aborder le calcul numérique à l'aide d'un outil informatique des solutions d'un problème "réel", on suit étapes suivantes :

1. Description qualitative des phénomènes physiques.

Cette étape est effectuée par des spécialistes des phénomènes que l'on veut quantifier (ingénieurs, chimiste,...)

2. Modélisation

Il s'agit, à partir de la description qualitative précédente, d'écrire un modèle mathématique. On ne supposera ici que ce modèle amène à un système équations différentielles aux dérivées partielles. Dans la plupart des cas, on ne saura pas calculer une solution analytique, explicite, du modèle ; on devra faire appel à des techniques de résolution approchée.

3. Analyse mathématique

Même si l'on ne sait pas trouver une solution explicite du modèle, il est important d'en étudier les propriétés mathématiques, dans la mesure du possible. Il est bon de se poser les questions suivantes :

- Le problème est-il bien posé ? C'est-à-dire y-a-t-il existence et unicité de la solution ?
- Les propriétés physiques auxquelles on s'attend sont-elles satisfaites par les solutions du modèle mathématique ? Si u est une concentration, par exemple, peut-on prouver qu'elle est toujours positive ?
- Y a-t-il continuité de la solution par rapport aux données ?

4. Discrétisation et résolution numérique

Un problème posé sur un domaine continu (espace - temps) ne peut être résolu par un ordinateur ce dernier peut traiter qu'un nombre fini d'inconnues. Pour se ramener à un problème en dimension finie, on discrétise l'espace et/ou le temps. Si le problème original est linéaire on obtient un système linéaire. Si le problème original est non linéaire (par exemple s'il s'agit de la minimisation d'une fonction) on aura un système non linéaire à résoudre par une méthode (méthode Newton...)

5. Analyse numérique

Une fois le problème discret obtenu, il est raisonnable de se demander si la solution de ce problème est proche, et en quel sens, du problème continu. De même, si on doit mettre en œuvre une méthode itérative pour le traitement des non-linéarités, il faut étudier la convergence de la méthode itérative proposée.

3.8.1 Méthodes numériques appliquées

Plusieurs techniques concurrentes et complémentaires : les différences finies, les éléments finis et les volumes finis. Chacune de ces trois méthodes correspond à une formulation différente des équations de la physique :

- équilibre des forces en chaque point pour les différences finies
- minimisation de l'énergie ou principe des travaux virtuels pour les éléments finis
- loi de conservation et calcul des flux pour la méthode des volumes finis.

Examinons rapidement les avantages et les inconvénients de chacune de ces trois méthodes.

Différences finies

La méthode des différences finies consiste à remplacer les dérivées apparaissant dans le problème continu par des différences finies ou combinaisons de valeurs ponctuelles de la fonction en un nombre fini de points discrets ou nœuds du maillage.

Avantages : une grande simplicité d'écriture et un faible cout de calcul.

Inconvénients : Limitation de la géométrie des domaines de calculs, difficultés de prise en compte des conditions aux limites portant sur les dérivées ou les gradients de l'inconnue et en général absence de résultats de majoration d'erreurs.

Éléments finis

La méthode des éléments finis consiste à approcher, dans un sous-espace de dimension finie, un problème écrit sous forme variationnelle (comme minimisation de l'énergie) dans un espace de dimension infinie. La solution approchée est dans ce cas une fonction déterminée par un nombre fini de paramètres comme, par exemple, ses valeurs en certains points (les nœuds du maillage).

Avantages : Traitement possible de géométries complexes, détermination plus naturelle des conditions aux limites, possibilité de démonstrations mathématiques de convergence et de majoration d'erreurs.

Inconvénients : Complexité de mise en œuvre et cout en temps de calcul et en mémoire.

Volumes finis

La méthode des volumes finis intègre, sur des volumes élémentaires de forme simple, les équations écrites sous forme de loi de conservation. Elle fournit ainsi de manière naturelle des approximations discrètes conservatives qui est particulièrement bien adaptée aux équations de la mécanique des fluides :

équation de conservation de la masse, équation de conservation de la quantité de mouvement, équation de conservation de l'énergie.

Sa mise en œuvre est simple si les volumes élémentaires sont des rectangles (ou des parallélépipèdes des rectangles en tridimensionnelle). Cependant la méthode des volumes finis permet d'utiliser des volumes élémentaires de forme quelconque, donc de traiter des géométries complexes, ce qui est un avantage sur les différences finies.

Il existe une grande variété de méthodes selon le choix de la géométrie des volumes élémentaires et des formules de calcul des flux. Par contre, on dispose de peu de résultats théoriques de convergence .

CHAPITRE 4

Émission des polluants et instabilités de combustion

Chapitre 4

Émission des polluants et instabilités de combustion

4.1 Emission des polluants :

Actuellement, la diminution des émissions polluante est l'un des principaux axes de recherche en combustion. Elle se concentre généralement sur les oxydes d'azotes et le monoxyde de carbone. Nous allons décrire successivement l'effet, la production et les méthodes de réduction de ces polluants.

4.2 Effets de la pollution :

Oxydes d'azotes

La famille des oxydes d'azotes contient de nombreuses espèces : N_2O , NO , N_2O_2 , N_2O_3 , NO_2 , N_2O_4 et N_2O_5 . Parmi ces composés seuls cinq sont gazeux et sont donc susceptible d'atteindre l'atmosphère : N_2O , NO , NO_2 , N_2O_4 et N_2O_2 . En générale, seules les plus abondants (NO et NO_2) sont pris en compte et sont regroupés sous le terme de NO_x .

Les oxydes d'azotes ont de nombreux effets directs et indirects sur la santé. Dissous dans l'eau, ils forment l'acide nitrique qui participe aux pluies acides. Dans les cours d'eau les NO_x conduisent à l'eutrophisation (asphyxie par excès de nutriment) avec l'apport en azote. En réagissant avec un Composé Organique Volatile, les NO_x produisent de l'ozone (O_3) dans la troposphère. Contrairement à l'ozone stratosphère qui nous protège des rayons Ultra Violet, l'ozone troposphère à un effet négatif puisqu'il conduit à des problèmes respiratoires. A l'opposé, dans la stratosphère, les monoxydes d'azotes apportés par les avions, détruisent l'ozone bénéfique à la protection des Ultra Violet Bleu. Enfin, le NO agit directement sur la santé en absorbant l'oxygène dans sang et suscite des problèmes respiratoires.

Les NO_x sont produits naturellement, mais l'activité humaine est responsable de 70% des émissions. Dans cette production, 57% sont issus de la combustion. Ces constatations induisent les pouvoirs publics à durcir fortement les seuils d'émission des installations utilisant la combustion

Monoxyde de carbone

Le monoxyde de carbone a deux effets négatifs principaux. Dans l'organisme, il réagit avec l'hémoglobine et empêche l'oxygène du sang. Dans l'atmosphère, le monoxyde de carbone participe à l'effet de serre, au même titre que le dioxyde de carbone.

4.3 Production des polluants :

Nous allons aborder en brièvement les différents mécanismes de formation des polluants. Ce qui concerne les oxydes d'azotes trois principaux mécanismes sont possible :

- Le monoxyde d'azote combustible est formé à partir des espèces azotées organiques contenues dans le combustible. Ce mécanisme est dominant lorsque le combustible contient de l'azote (80% du NO total) et absent dans le cas du gaz naturel.
- Le monoxyde d'azote précoce a une réaction rapide se déroulant très tôt dans la flamme. La production est plus élevée en combustion riche qu'en pauvre. En régime pauvre, la quantité de monoxyde d'azote produit par cette voie devient négligeable par rapport à la production de monoxyde d'azote totale.
- Le dernier mécanisme appelé le monoxyde d'azote thermique a des réactions lentes. La production de ce dernier est sensible aux temps de résidence, à la température et à la concentration d'oxygène.

Prenant maintenant le cas de monoxyde de carbone qui est le résultat d'une combustion incomplète et apparaît en même temps que les imbrûlés. Le minimum d'émission de monoxyde de carbone est atteint à la stœchiométrie en prémélange parfait et il est maximal près de l'extinction pauvre ou riche.

Il est donc très difficile d'obtenir la diminution des oxydes d'azotes sans augmenter l'émission de l'oxyde de carbone (figure 4.1).

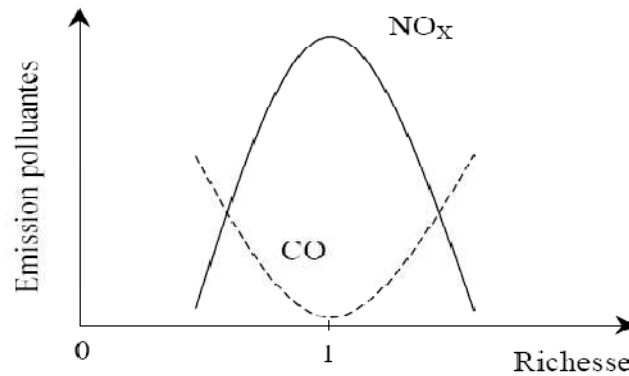


Figure 4.1 : *émission de NO_x et de CO en fonction de la richesse*

4.4 Méthode de réduction des polluants :

De nombreuses méthodes sont utilisées pour réduire les émissions des polluants. Parmi les méthodes de réduction des oxydes d'azotes on site :

- Réduction/excès de l'oxygène
- Réduction de la température en diminuant directement la température de la flamme ou en diminuant le temps de séjour des gaz dans les zones de température élevées
- Utilisant d'un catalyseur ou injecteur de gaz (ammoniac, urée, méthanol)

La première méthode de réduction des oxydes d'azotes est la combustion stratifiée. Le but est de brûler les zones à faible émissions (riche et pauvre) tout en minimisant la production de l'oxyde de carbone. L'étagement de la combustion s'effectue du riche vers le pauvre ou inversement. Dans le premier cas, la première zone très riche favorise la recombinaison du NO en N₂, puis l'air est envoyé en excès pour finir la réaction. Dans le deuxième cas, la première zone pauvre réduit le NO par faible température. Puis la deuxième zone riche, les radicaux libres Chi vont détruire le NO produit dans la zone primaire.

Ce procédé est délicat car les richesses doivent être bien ajustées pour éviter les émissions d'imbrûlés. D'une manière générale, la stratification riche-pauvre est plus efficace que la stratification pauvre-riche.

La stratification peut être obtenue en étageant le fuel aussi bien que l'air. Nous pouvons aussi distinguer l'étagement externe de l'étagement interne. Pour ce dernier la stratification est créée par l'aérodynamique. La stratification externe est due à une séparation physique : le combustible et/ou l'air sont injectés en plusieurs emplacements de la chambre de combustion créant des zones de richesses différentes.

4.5 Instabilités de combustion :

Les constructeurs de moteurs ou de turbine subissent des contraintes environnementales de plus en plus importantes, plusieurs technologies ont donc mises en point pour diminuer les émissions des polluants. Parmi ces méthodes est la voie du prémélange pauvre. Malheureusement, la combustion en prémélange pauvre induit de fortes instabilités. En premier, elles provoquent une diminution de l'efficacité de combustion et une production des oxydes d'azotes et de monoxyde de carbone plus importante. Ensuite l'hétérogénéité thermique impose de fortes contraintes aux parois. Une température de sortie non homogène est également indésirable pour les aubages de la turbine. Enfin les oscillations de pression détériorent l'installation et donc sa durée de vie.

De nombreuses études ont été entreprises pour comprendre le mécanisme complexe de ces instabilités. Dans ce qui suit nous allons décrire le mécanisme d'instabilités ainsi que leurs modes afin de parler sur les méthodes de réduction des instabilités de combustion.

4.6 Principe des instabilités :

L'apparition des instabilités met en jeu de nombreux paramètres tant géométrique que chimique. Nous avons vu que le prémélange avait deux effets différents sur les instabilités. Le même constat est effectué avec la richesse.

Les instabilités de combustion sont une classe très générale de phénomène susceptible de rendre la flamme ou le milieu qui contient instable. La clef de mécanisme réside dans le couplage entre un système résonnant, qui se trouve être la plupart du temps un mode acoustique, parfois couplés à un phénomène tiers. La figure 4.2 propose une illustration schématique du bouclage potentiellement instable. Suite à une petite perturbation modifiant l'état de l'écoulement, la flamme subit diverse fluctuation (de vitesse U' , de température T' , de pression P' , de richesse ϕ' etc....). Le dégagement de chaleur s'en trouve fortement modifié, et cause à son tour de plus grandes fluctuations susceptibles de modifier à nouveau l'état de l'écoulement par l'intermédiaire de système résonnant. L'amplification et le déphasage entre chacune de ces étapes conditionne le développement de l'instabilité.

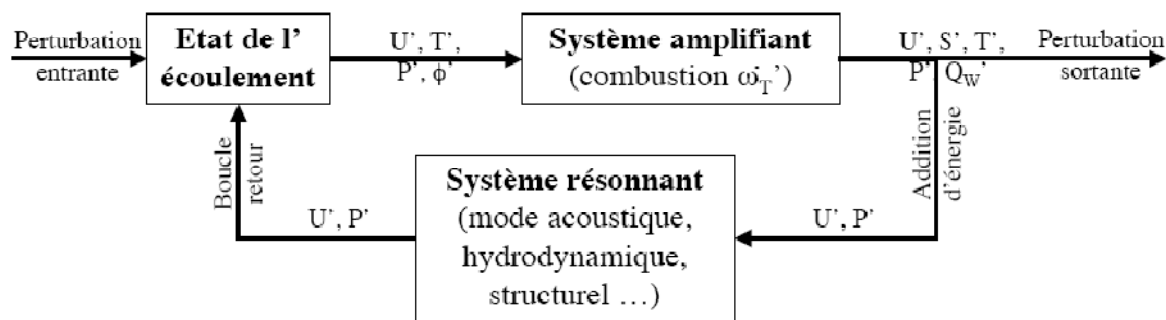


Figure 4.2 : schéma de principe de la boucle d'instabilité

La partie la plus méconnue de cette boucle instable est sans conteste le système amplifiant. En effet, les mécanismes causant des fluctuations de dégagement de chaleur sont très variés et délicats à évaluer de manière quantitative, de même que les effets produits par flamme.

Dans le cas des systèmes de combustion, de nombreux phénomènes peuvent intervenir comme intermédiaire dans cette phase. La plupart de ces phénomènes sont induits par l'interaction de l'hydrodynamique du système avec le champ acoustique. La liste exhaustive de ces phénomènes est assez difficile à établir.

On peut citer comme phénomène pouvant induire une perturbation du dégagement de chaleur :

Variation de la richesse : ces variations peuvent être dues au mélange incomplet de l'air et du combustible en amont de la flamme. La perturbation des débits d'alimentation en carburant par l'acoustique est alors à prendre en compte. La variation de débit peut ainsi provoquer l'effet de la pression instationnaire sur le système d'alimentation de combustible en faisant varier la pression différentielle entre les lignes d'alimentation et le brûleur.

Néanmoins, même avec des alimentations amorcées (débit bloqué), le champ de vitesse instationnaire d'un mode longitudinale peut avoir la même conséquence. En se superposant au champ moyen, la vitesse acoustique fait osciller la vitesse de convection au niveau de l'injecteur. Se créent alors alternativement des poches riches et pauvres qui sont alors largement atténuées avec un mélange efficace.

Cependant, si elles ne le sont pas, elles peuvent causer des oscillations fortes. Les perturbations de la richesse sur une flamme proche de la limite d'extinction pauvre, produisent des variations importantes des caractéristiques de la flamme telles que la température de la flamme et la vitesse de la flamme. Les temps chimiques associés sont inversement proportionnels à la vitesse de la flamme. Ils subissent ainsi de fortes variations sur la branche pauvre comparée à des flammes plus riches proches de la stœchiométrie.

Variation de surface de flamme : les perturbations de vitesse déforment directement la flamme qui se traduit par une modification de la surface de flamme par étirement induisant une fluctuation du dégagement de chaleur. La détermination de la réponse de flammes de prémélange à des perturbations acoustique (forcées) a fait l'objet de nombreuses études expérimentales, théoriques et numériques.

Ces études montrent que la réponse de la surface de la flamme dépend de la géométrie du brûleur et de celle de la flamme stationnaire. Une forte dépendance en fréquence est aussi à noter. Si les longueurs d'onde associées aux perturbations convectives sont de l'ordre de la taille de la flamme ; alors on observe des déformations importantes de front de flamme. Les conditions du maximum

d'interaction semblent reliées à des valeurs spécifiques de nombre de **STROUHAL**.

Interaction flamme et tourbillon : les instabilités hydrodynamiques peuvent aussi jouer un rôle important, en premier sur les brûleurs où la flamme est stabilisée dans le sillage d'une accroche flamme en effet des tourbillons sont émis par les couches de mélange déstabilisées. Ces couches de mélange sont aussi présentes dans les brûleurs une marche descendante ou un élargissement brusque. Ce dernier est en générale formé par le débouchement de systèmes d'injection dans la chambre de combustion plus large.

Les observations rendant compte de l'importance de l'interaction flamme et tourbillons sont nombreuses. La fréquence de détachement des tourbillons peut être un multiple de la fréquence d'un mode propre de la chambre de combustion pour qu'un couplage puisse s'installer. Le couplage de mode hydrodynamique avec l'acoustique est aussi envisageable puisque les couches de mélange peuvent être efficacement par le champ de vitesse acoustique observent un détachement à la fréquence du mode acoustique.

Le détachement a lieu lorsque la vitesse dû à la vitesse acoustique est maximale. Ces structures cohérentes augmentent significativement le plissement et l'étirement lorsqu'elles interagissent avec le front de la flamme. Certaines zones présentes une densité de la flamme importante alors que les zones trop étirées peuvent s'éteindre. Le fort cisaillement combiné au mouvement convectif des structures peut arracher des poches de flamme sont de puissances sources sonores.

Ondes entropiques : Une autre catégorie d'ondes convective peut aussi intervenir. Les ondes entropique transportent des perturbations de température et densité (point chauds). Ces ondes peuvent en particulier interagir avec les tuyères amorcées de sortie de chambre et conduire à la création d'ondes acoustique. Ce phénomène est en générales associé aux instabilités de types grondement qui apparaît parfois au démarrage de turbines aéronautique.

Vibration de la structure : Les modes vibratoires de la structure sont aussi susceptibles d'interagir avec le champ acoustique et la flamme. En effet, les vibrations des parois latérales de la chambre de combustion peuvent se comporter comme des haut-parleurs qui excitent transversalement la flamme. L'action globale du champ acoustique sur la flamme est indirecte et résulte d'une combinaison de ces différents types d'effets. Chacun induisant un déphasage particulier entre pression et dégagement de chaleur. Ce déphasage est fonction des temps caractéristiques respectivement associés aux phénomènes mise en jeu. La grande variété des mécanismes présentés nous amènes naturellement à la tentative de classification.

4.7 Classification des instabilités de combustion :

La première étape d'une étude des instabilités de combustion est donc leur classification. Pour cela, nous reprenons les propositions de *Barrère & Williams*, basant leur classement sur la fréquence de l'instabilité. Il se dégage trois grandes classes d'instabilités :

- **Les instabilités de système :**

Les instabilités de système impliquent toute l'installation, des lignes d'alimentation du carburant et du comburant jusqu'à l'échappement en passant par les injecteurs de la chambre de combustion. Les fréquences sont inférieures à la centaine de Hertz (200 Hertz comme maximum).

- **Les instabilités propres du foyer (cambre de combustion) :**

Ces instabilités se déroulent dans la chambre de combustion. La fréquence de ces oscillations varie de quelques centaines de Hertz à plusieurs milliers de Hertz (de 300 Hz à 10 KHz). Cette famille comprend les instabilités acoustiques, les ondes de choc et les instabilités hydrodynamiques.

- **Les instabilités des intrinsèques :**

Ces instabilités sont uniquement liées au phénomène de combustion. Elles sont indépendantes de la géométrie. La fréquence de ces oscillations est de l'ordre

de plusieurs milles d'Hertz. Ces instabilités se divisent en deux : les instabilités thermo-diffusives (compétition entre la diffusion moléculaire et la diffusion de chaleur), et les instabilités de *Darries-Landau* (création de tourbillon par le front de flamme).

Selon leur fréquence, on peut classer ces différents types d'instabilités dans la figure ci-dessous :

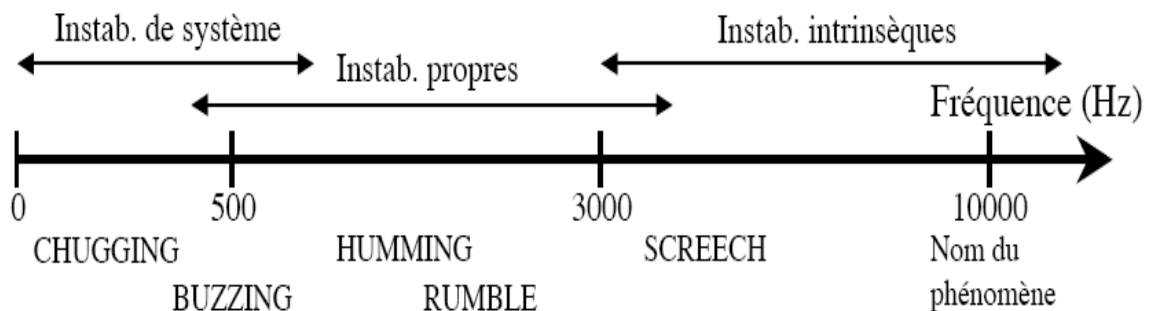


Figure 4.3 : *classification des types d'instabilités selon leur fréquence*

Les origines des instabilités sont donc multiples. On peut aussi distinguer deux autres modes d'instabilités qui sont les modes acoustiques et les modes convectifs.

Modes acoustique : les modes acoustiques jouent un rôle important dans le mécanisme de couplage entre les fluctuations de pression et de dégagement de chaleur. Quatre fréquences acoustiques sont rencontrées dans les chambres de combustion :

- Les modes longitudinaux : ce sont les fréquences le plus fréquemment observées, les fréquences dépendent de la longueur de la conduite.
- Les modes transversaux : ces hautes fréquences dépendent du diamètre de la chambre.
- Les fréquences circonférentielles : ces fréquences sont rencontrées dans les foyers annulaires.

- d) La fréquence *Helmholtz* : contrairement aux modes acoustiques précédentes cette instabilité s'effectue en volume, la pression varie au cours du temps mais reste uniforme spatialement.

Modes convectifs : les modes convectifs sont souvent décrits dans les écoulements non réactifs, mais ils peuvent aussi être observés en combustion sous certaines conditions. Il faut que les tourbillons soient stabilisés par la présence de pression acoustique. Les deux modes d'instabilités (acoustique et aérodynamique) peuvent ensuite interagir entre eux. Sans combustion, cette instabilité est plus difficilement remarquable que les fréquences acoustiques, car il y a une faible interaction entre l'écoulement et l'acoustique de la chambre.

En écoulement réactif, les lâchés périodiques de chaleur fournissent le lien manquant pour boucler le cycle d'amplification de l'instabilité. Mais le dégagement de chaleur dû à la combustion tend à inhiber les tourbillons, d'où la nécessité d'une interaction entre les instabilités acoustiques et aérodynamiques. Dans ce cas, les tourbillons créent des zones de combustion localisée qui excitent un mode acoustique. En retour l'instabilité acoustique produit un nouveau tourbillon. L'onde acoustique peut aussi provoquer un regroupement des tourbillons de telle sorte que les tourbillons ont la même fréquence que la perturbation acoustique. La fréquence des tourbillons après coalescence est alors une sous harmonique de la fréquence aérodynamique initiale.

Les grosses structures générées par les instabilités aérodynamiques améliorent le mélange. Mais ces mêmes tourbillons retardent l'apparition des petites structures nécessaires pour initier la combustion. En effet, l'allumage de combustion s'effectue par un apport d'énergie sous forme de chaleur et de radicaux.

La chaleur est transportée radialement à travers les lignes de courant de la zone de recirculation par le processus de turbulence. Il est donc préférable de diminuer les grosses structures et de favoriser de petites turbulences pour avoir une combustion homogène plutôt que pulsée.

Les instabilités aérodynamiques qui sont généralement à haute fréquence (supérieure à un KHz), peuvent donc interagir sur la combustion. Si les fréquences de résonance sont les plus courantes, les instabilités créées par l'élargissement brusque peuvent aussi devenir dominantes dans certains cas. On voit ici la difficulté pour déterminer l'origine des oscillations puisqu'elles peuvent être purement acoustiques, aérodynamiques ou un couplage des deux.

Les modes convectifs comprennent aussi les modes entropiques. L'instabilité est créée par une perturbation de température convectée par l'écoulement. La perturbation initiale est provoquée par une variation de richesse du mélange à l'entrée des injecteurs. Ces ondes conduisent à une modulation du débit en sortie de chambre et en retour créent une onde de pression vers les injecteurs.

Critère de Rayleigh :

Un critère classique du domaine des instabilités de combustion a été énoncé par *Lord Rayleigh* (1978). Il est postulé que l'entretien d'une oscillation est favorisé lorsqu'un apport de chaleur a lieu en phase avec une augmentation de la pression acoustique dans le foyer. Ce critère peut être déduit des équations de propagation. Puisque les oscillations sont naturellement amorties par les pertes mécaniques à l'échappement, les pertes dues au transfert de chaleur aux parois et de la dissipation visqueuse sur la surface de la chambre de combustion.

La source de l'instabilité doit donc émettre en continu pour compenser ces pertes. Une amplification a lieu si les fluctuations de pression et de dégagement de chaleur respectent le critère de *Rayleigh*. Ce critère stipule que les fluctuations doivent être en phase pour avoir une amplification des oscillations. Le critère de *Rayleigh* s'écrit sous la forme suivante :

$$G = \frac{1}{T} \int_0^T p'(x, t) q'(x, t) dt > 0$$

Avec p' et q' représentent les fluctuations de pression et de chaleur locaux au temps. T est la période de l'instabilité.

Lorsque l'indice de **Rayleigh** est positif, la fluctuation est amplifiée localement. Inversement lorsqu'il est négatif la fluctuation est amortie localement. Le critère de **Rayleigh** est une condition nécessaire mais non suffisante pour l'amplification des instabilités. La phase entre le dégagement de chaleur et la pression modifie également la fréquence de l'oscillation. Le tableau ci-dessous résume l'effet de la phase sur les instabilités.

Phase entre le dégagement de chaleur et la pression	Effet sur l'amplitude de l'oscillation	Effet sur la fréquence de l'oscillation
-90	Nul	Amplification
0	Amplification	Nul
90	Nul	Atténuation
180	Atténuation	nul

Tableau 4.1 : *Effet de la phase sur les instabilités*

4.8 Les méthodes de contrôle :

Le contrôle des instabilités de combustion est un défi majeur pour le dessin et le développement des chambres de combustion à haute performance. Les systèmes de contrôle se divisent en deux grandes catégories, le contrôle actif et le contrôle passif.

4.8.1 Le contrôle actif

Le contrôle actif implique l'usage de procédures dynamiques, fonction de l'état du système (injection carburant pulsée, forçage acoustique etc.).

Initiés dans les années 1950 par les pionniers étudiant les instabilités dans les moteurs fusées (**Marble, Cox et Rodgers, Crocco et Cheng**), les systèmes de contrôle actif injectent dans les brûleurs des perturbations dont l'effet découple les phénomènes responsables des oscillations.

Les systèmes en « boucle fermée » utilisent en plus un senseur (microphone) pour informer le contrôleur de l'état réel du brûleur, et ainsi commander une

réponse adéquate. Toute la difficulté réside dans l'établissement de modèle d'instabilité qui va permettre au contrôleur de réagir correctement.

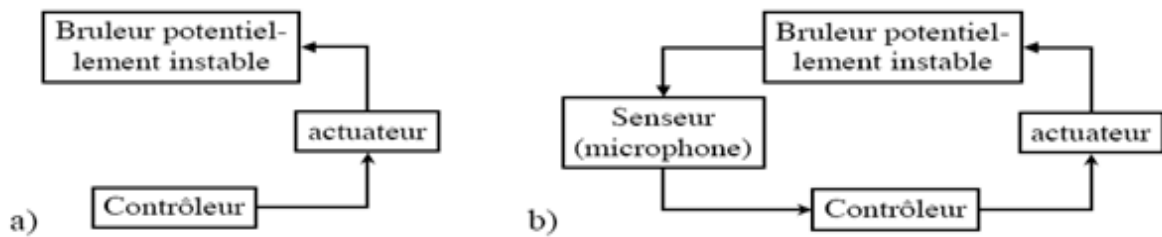


Figure 4.4 : *contrôle actif en boucle ouverte a) et fermée b)*

Appliquées avec succès sur des brûleurs modernes, les perturbations peuvent être appliquées sur l'alimentation de carburant ou utiliser un forçage acoustique déphasé (type antibruit). S'ils sont extrêmement efficaces, en particulier en boucle fermée auto adaptatif, les systèmes de contrôle actifs peuvent néanmoins être assez cher à mettre au point. L'ajout d'un système en boucle fermée, pose toujours le problème de la fiabilité des éléments de la boucle. Si un capteur fournit une information erronée, la réponse du système de contrôle peut être problématique. Les redondances nécessaires alourdissent alors le système. Les industriels les considèrent actuellement comme des palliatifs.

4.8.2 Le contrôle passif :

L'usage du contrôle passif implique la modification du système, par un changement de géométrie, de type d'injection, l'installation d'augmentation de mélange, de générateurs de tourbillons, de résonateurs acoustique etc....

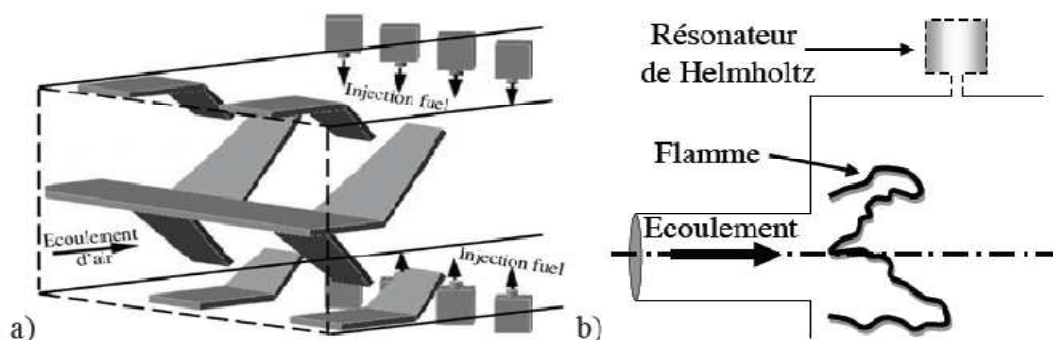


Figure 4.5 : *contrôle passif : a) augmentation de mélange et b) résonateurs de Helmholtz*

Cette méthode a prouvé son efficacité opérationnelle. *Paschereit* notamment, conforté à différentes instabilités dans un brûleur expérimental, met en œuvre un système de l'instabilité thermo-acoustique, il propose un générateur de tourbillons capable d'interagir avec les structures détachées (au niveau de l'élargissement) en déstabilisant la fusion et l'appariement des tourbillons en large structure. En empêchant la formation de ces gros tourbillons ; on brise un des chaînons de la boucle instable. Il obtient une réduction de 28dB sur l'instabilité haute fréquence visée par le système de contrôle [3], mais aussi une réduction de 50% de l'amplitude d'un mode instable secondaire basse fréquence.

Les systèmes de contrôle passifs nécessitent donc une certaine connaissance du phénomène que l'on souhaite altérer. La mise au points de ces systèmes peut être longue pour optimiser l'efficacité du système déterminer les possible instabilités des brûleurs. Si l'objectif de performance reste inchangé, la stabilité des systèmes de combustion doit être contrôlée dès les premières phases du développement, à un stade où les mécanismes mis en jeu dans les instabilités de combustion.

4.9 Conclusion :

La combustion dans les chambres de réacteur contrôle la puissance du réacteur mais aussi les émissions de polluants. La maîtrise de ces polluants est enjeu important en ce qui concerne les moteurs d'avions. Elles passent par l'étude des chambres de prémélange pauvre qui permettent de réduire la production de polluants mais qui se révèlent particulièrement sensible aux phénomènes d'instabilité de combustion (régimes transitoires, flash-back, décrochage de flamme, instabilités thermo-acoustiques).

Ces instabilités se manifestent par des oscillations intenses des différents paramètres de l'écoulement qui peuvent considérablement perturber le fonctionnement du système. Pour réduire ces instabilités deux voies sont possible qui sont les méthodes actifs et les méthodes passifs. La seule solution passive est la modification de la géométrie de la chambre ou des injecteurs.

Cette modification peut être un simple changement de taille ou bien elle peut être plus profonde, avec par exemple l'ajout d'un résonateur d'onde, par rapport le contrôle actif est aujourd'hui une méthode en plein développement, il est caractérisé par une perturbation acoustique qu'est envoyée dans la chambre de combustion pour détruire les fréquences néfastes.

La perturbation peut être créée par un haut parleur ou directement en modulant le débit d'injection d'air ou de carburant. La modulation du débit de gaz s'effectue en boucle ouverte ou en boucle fermée. La boucle ouverte qui la plus simple, consiste à envoyer un bruit blanc (perturbation sans fréquence dominante). En boucle fermée, les perturbations sont mesurées soit en aval de la flamme par un capteur de pression au niveau de la flamme avec un photomultiplicateur.

Puis, le débit de gaz est modulé avec n temps de retard afin que la fluctuation créée soit opposition de phase avec la fluctuation de pression de chambre de combustion. Le contrôle actif réduit les oxydes d'azotes de vingt à trente pourcent et peut aussi diminuer le monoxyde de carbone de zéro à cinq pourcent ce qui est l'intérêt de tout les motoristes.

CHAPITRE 5

Simulation numérique des flammes pauvres

Chapitre 5

Simulation numérique des flammes pauvres

Ce chapitre constitue des exemples de simulation sur des flammes avec des richesses pauvres. Le premier cas est celui d'un exemple de simulation de combustion prémélangée instationnaire, le second un banc d'essai ORACLES, le troisième concerne une combustion prémélangée avec un jet d'air, le quatrième cas c'est une flamme de diffusion du méthane avec la méthode PDF, le dernier cas celui d'une flamme de diffusion dans une chambre tubulaire, et combustion de kérosène.

5-1 Simulation d'une flamme prémélangée instationnaire turbulente

Cet exemple intitulé « recherches des instabilités de combustion à travers les corps non profilés » est réalisé dans le but de fournir une analyse précise régissant le taux de distribution de chaleur libérée dans les moteurs aérobies en démontant l'effet du bluff corps sur la flamme. Ce control est important afin de diminuer les instabilités acoustiques dans des cas de richesse pauvre.

a-La géométrie

Cette configuration est axisymétrique avec un corps à l'intérieur de la chambre de combustion toutes les dimensions sont dans la (figure 5.1). Sachant que ' $D=7.62\text{cm}$ $d=3\text{ cm}$.

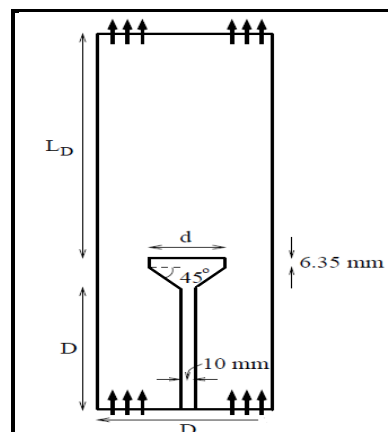


Figure 5.1 : chambre de combustion avec un corps non profilé.

b-Le maillage

La géométrie est réalisée par le logiciel GUMBIT, le maillage est structuré toute la surface de la chambre de combustion est maillée en maille quadratique qui est souvent appliqué sur des configurations bidimensionnelles (**figure 5.2**).

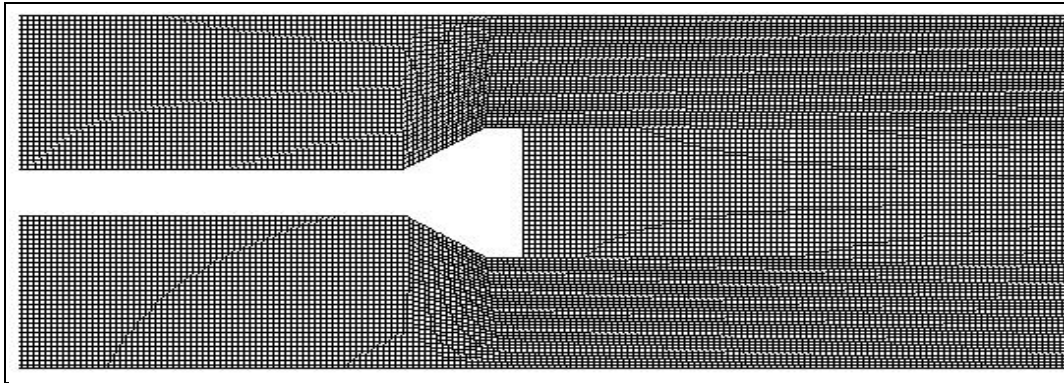


Figure 5.2 : maillage de la chambre de combustion.

c-Conditions aux limites

Les conditions aux limites appliquées sur ce modèle sont récapitulées dans comme suit :

Conditions d'entrée :

Vitesse de l'écoulement : 15m/s.

Combustion du méthane avec l'air avec une richesse de 0.8.

Température du mélange : 300°k.

Conditions aux parois :

Les parois sont à une température de 300°k.

Condition de sortie :

La pression de sortie est égale à la pression atmosphérique soit 1013252 pascal.

Solveur :

Le cas étudié dans cette simulation est instationnaire et le modèle de turbulence utilisé est RNG $k-\varepsilon$ avec un pas temporel de 10^{-5} s.

d-Résultats et comparaison :

Contours iso- vitesse

La **figure 5.3** illustre les contours iso-vitesse obtenus dans la chambre de combustion. La **figure a** montre les résultats obtenus par la simulation et la **figure b** illustre ceux qui est mentionné la référence [10]. On remarque que les résultats sont semblables.

Champs de vitesse :

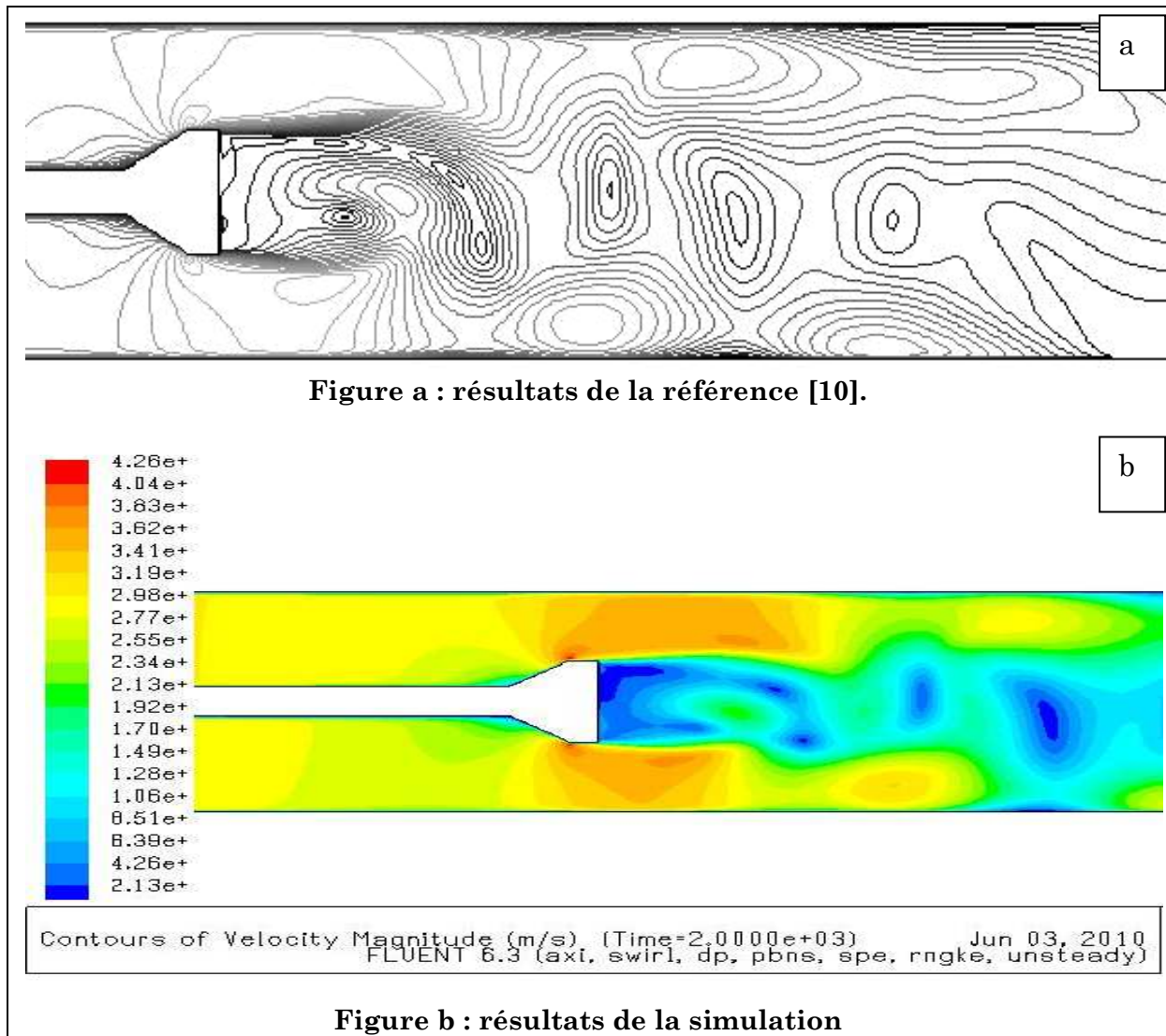


Figure 5.3 : résultats des contours iso- vitesse

5-2 Simulation d'une flamme prémélangée stationnaire turbulente

Dans cet exemple, la géométrie utilisée est celle du banc d'essai ORACLES (One Rig for Accurate Comparisons with Large Eddy Simulation), les résultats obtenus sont comparés avec ceux de l'expérimental dans cette application le carburant utilisé est le propane.

a-La géométrie

La configuration du banc d'essai ORACLES est constitué de deux canaux de prémélange d'une longueur de trois mètres est d'une chambre de combustion d'une longueur de trois mètres aussi, les détails de la géométrie sont illustrés dans la (figure 5.4).

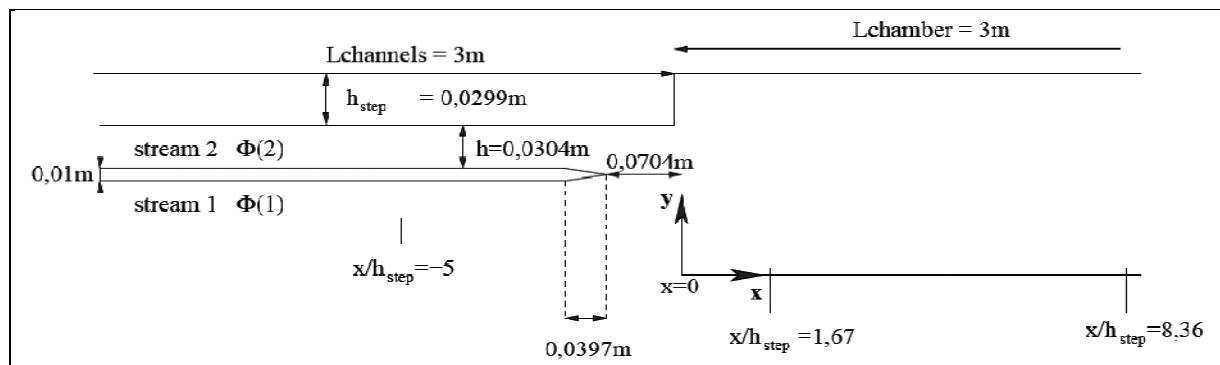


Figure 5.4 : géométrie du banc d'essai ORACLES

b- Le maillage :

Le maillage de la chambre de combustion est quadrilatérale, il contient 47000 maille la configuration du maillage est limité à 0.600m des deux canaux et une longueur de 2m dans la chambre la figure 5.5 montre la disposition du maillage.

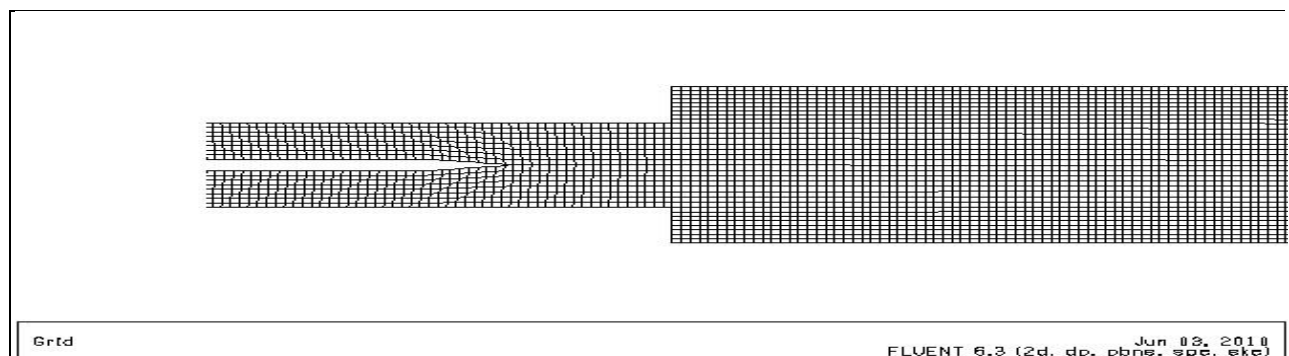


Figure 5.5 : maillage de la géométrie

c- Conditions aux limites

Les conditions aux limites appliquées dans cette expérience sont les suivantes :

Conditions d'entrée :

Vitesse du mélange combustible propane-air : 20m/s.

La richesse dans ce model de combustion est de 0.8 ce qui implique que la fraction massique du propane est de 0.048 et celle de l'oxygène est de 0.2217.

Température du mélange : 300°k.

Conditions aux parois :

Les parois sont adiabatiques à une température de 300°k

Conditions de sortie :

Pression de sortie est égale à la pression atmosphérique soit 101325 pascal.

d-Solveur :

Le model de combustion dans cette simulation est stationnaire turbulent, le model de turbulence appliqué est le k- ϵ .

e- Résultats et comparaison :

Contours isotherme :

La **figure 5.6** illustre les contours isothermes obtenus pour la chambre de combustion. La **figure a** montre les résultats obtenus par la simulation et la **figure b** montre une photo de la flamme sur la chambre de combustion ORACLES. On remarque que les résultats sont semblables.

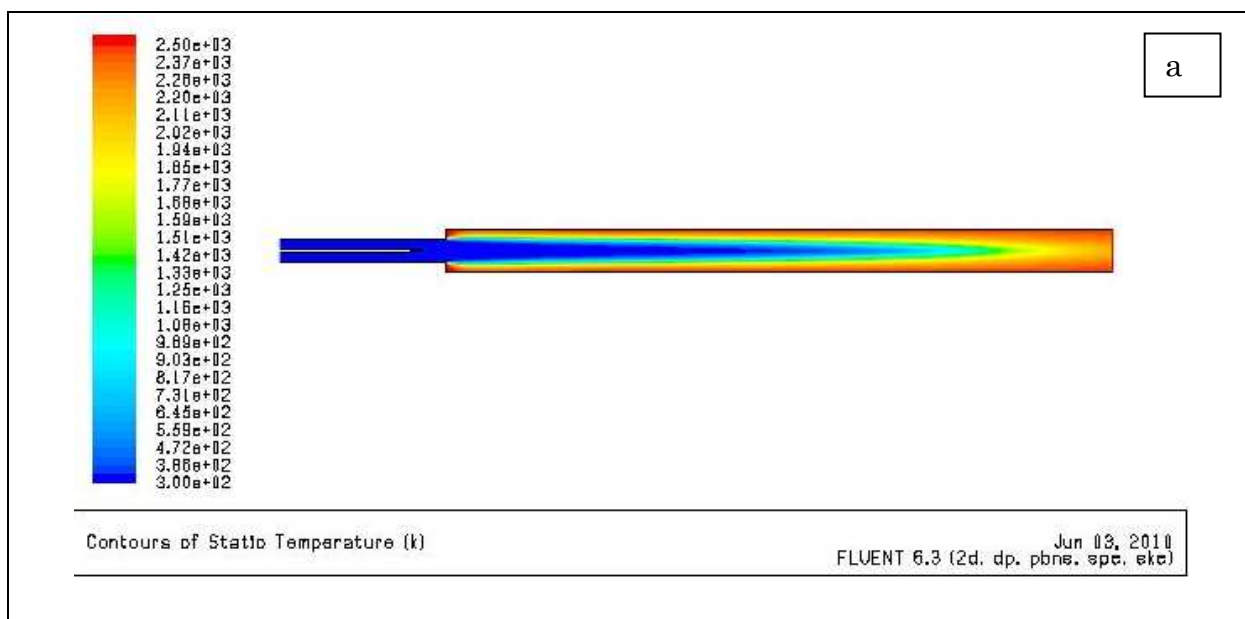


Figure a : résultats de la simulation de la température totale

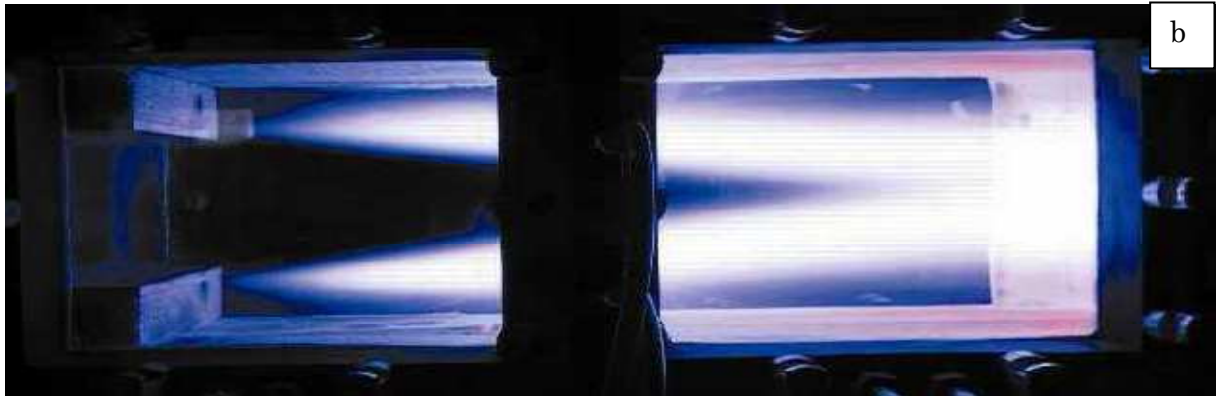


Figure b : résultats expérimental

Figure 5.6 : résultats des contours isothermes.

Sur le banc d'essai ORACLES quatre stations sont utilisées pour la mesure des paramètres de combustion, elles sont reproduites par le model de la simulation comme des iso surfaces suivant l'axe de ordonnées x comme suis :

La station 1 : $x/h=-5$.

La station 2 : $x/h=0$

La station 3 : $x/h=1.68$.

La station 4 : $x/h=8.37$

La **figure 5.7** est une illustration des vecteurs de vitesse dans les stations précédentes.

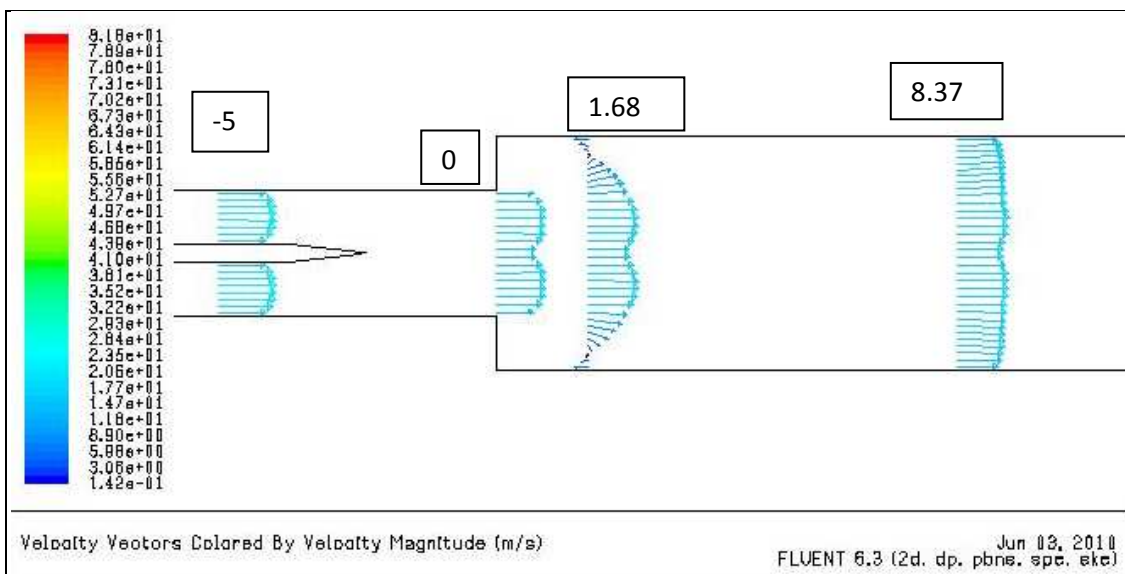


Figure 5.7: résultats des vecteurs vitesse dans les quatre stations de mesure.

Une validation des résultats expérimentaux est effectuée pour trois stations précédemment mentionnées. Dans chaque cas de figure la vitesse axiale et radiale ainsi que l'énergie cinétique turbulente et la température ont été comparé aux valeurs de l'expérimentales .

Station $x/h=8.37$

Comparaison de la vitesse radiale

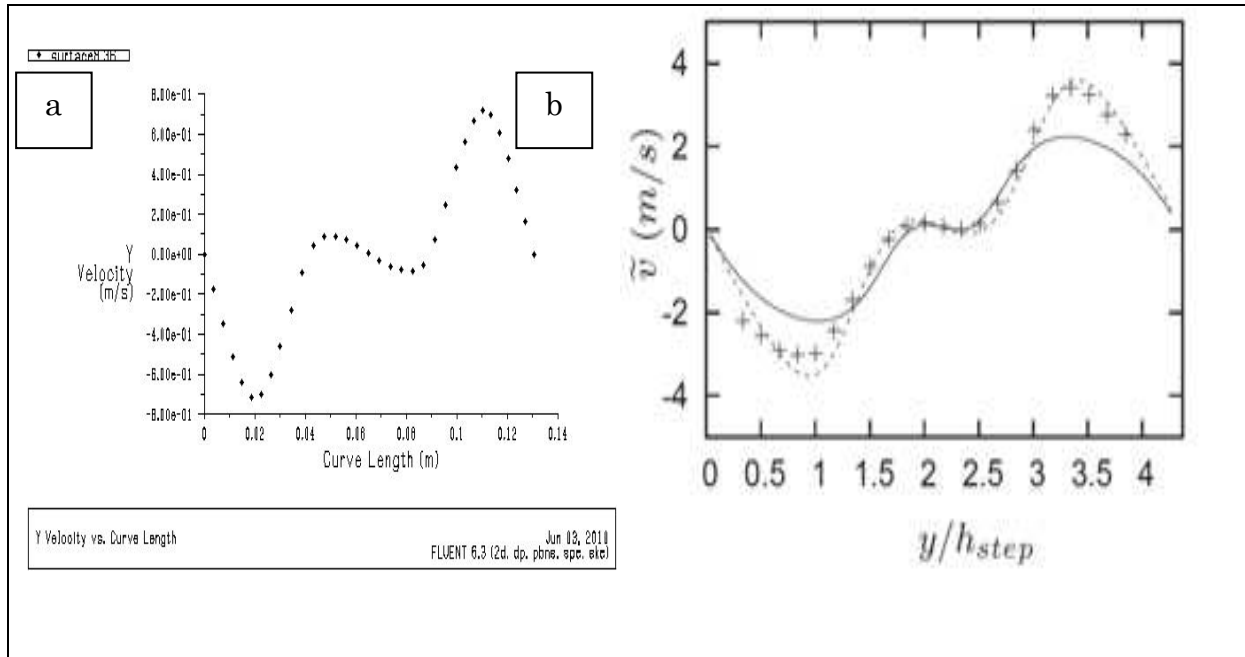


Figure 5.8 : vitesse radiale (figure a) résultat de la simulation (figure b) résultat expérimental.

Interprétation du graphe de la vitesse radiale :

On constate d'après ce graphe que la composante radiale de la vitesse a une valeur nulle pour une position axiale de $y=0$ ce qui est logique car le profil de vitesse radiale est nulle au niveau de parois, puis elle diminue linéairement pour atteindre une valeur de -8m/s pour $y=0.02\text{ m}$, l'intensité de la vitesse diminue en changeant le sens, elle diminue jusqu'à atteindre la valeur de 1m/s pour $y=0.05\text{m}$ puis elle diminue pour devenir négative elle une valeur de -1m/s pour $y=0.08\text{m}$, la vitesse augmente linéairement jusqu'à atteindre la valeur de 7m/s pour $y=0.11$, puis on constate une diminution de la vitesse jusqu'à devenir nulle au niveau de la deuxième parois .

Comparaison de la vitesse axiale :

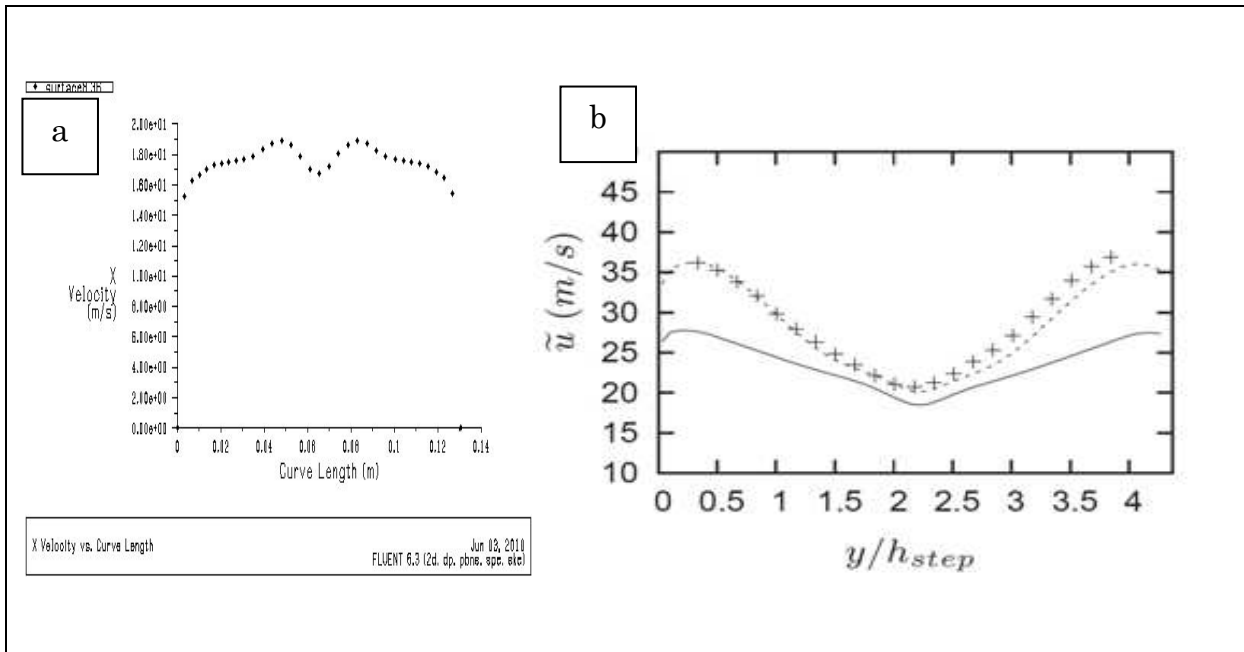


Figure 5.9: vitesse axiale (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Interprétation du graphe de la vitesse axiale :

On constate depuis ce graphe que pour une position $y=0\text{m}$, la valeur de la vitesse axiale est 15m/s , elle augmente selon une évolution parabolique pour atteindre la valeur 20m/s pour une position de $y=0.05\text{m}$ puis elle diminue jusqu'à 16m/s pour $y=0.7\text{ m}$, la vitesse augmente pour atteindre son sommet de 20m/s pour $y=0.09$, puis elle diminue jusqu'à 14m/s pour $y=0.13$.

Comparaison de la température totale

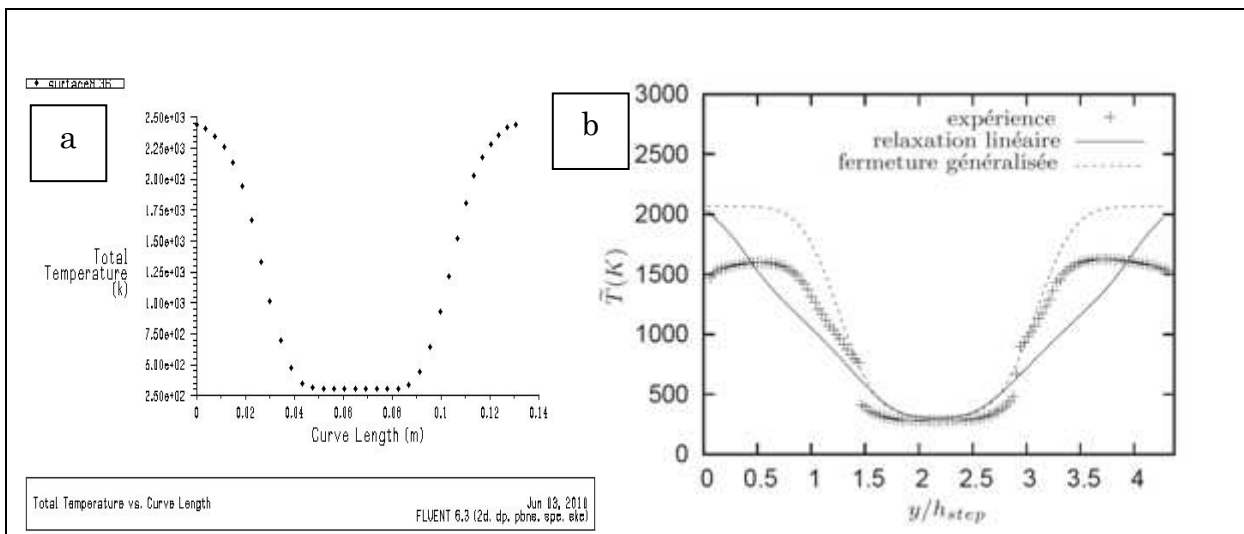


Figure 5.10 : température totale, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Comparaison de l'énergie cinétique turbulente

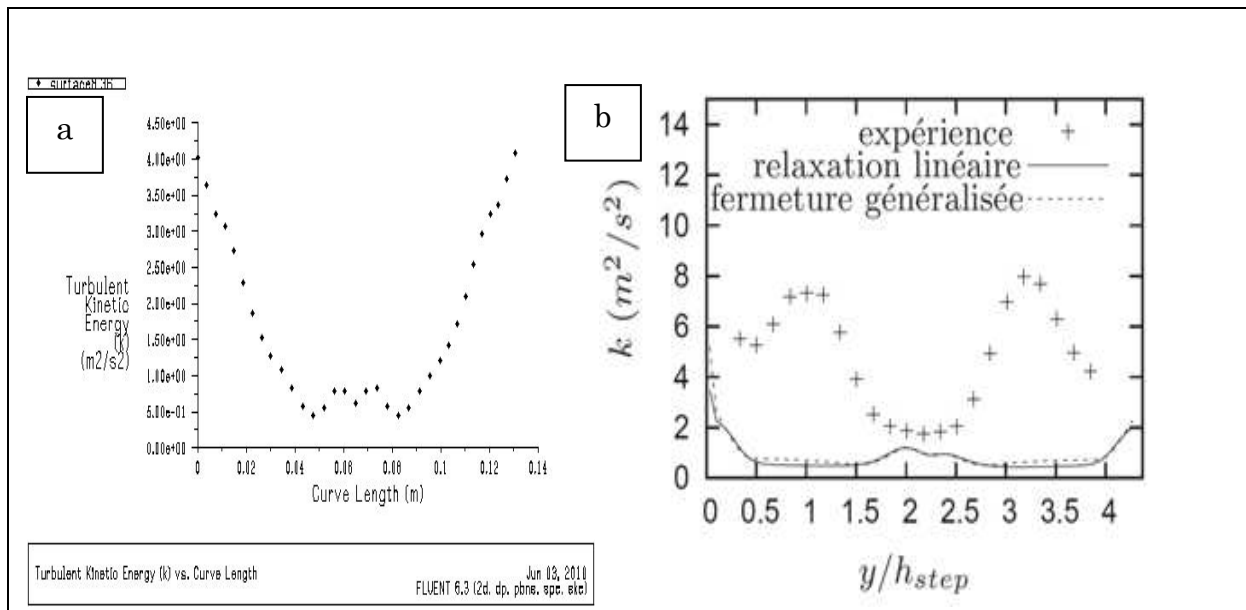


Figure 5.11: énergie cinétique turbulente, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Station x/h=1.67

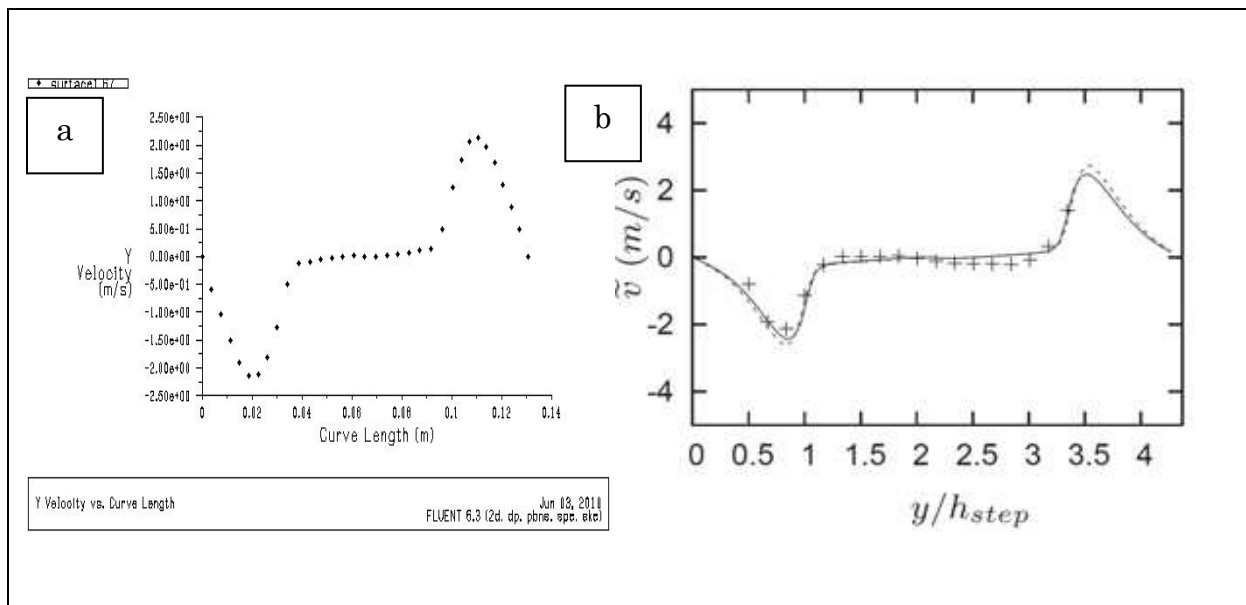


Figure 5.12: vitesse radiale (figure a) résultat de la simulation (figure b) résultat expérimental.

Comparaison de la vitesse axiale

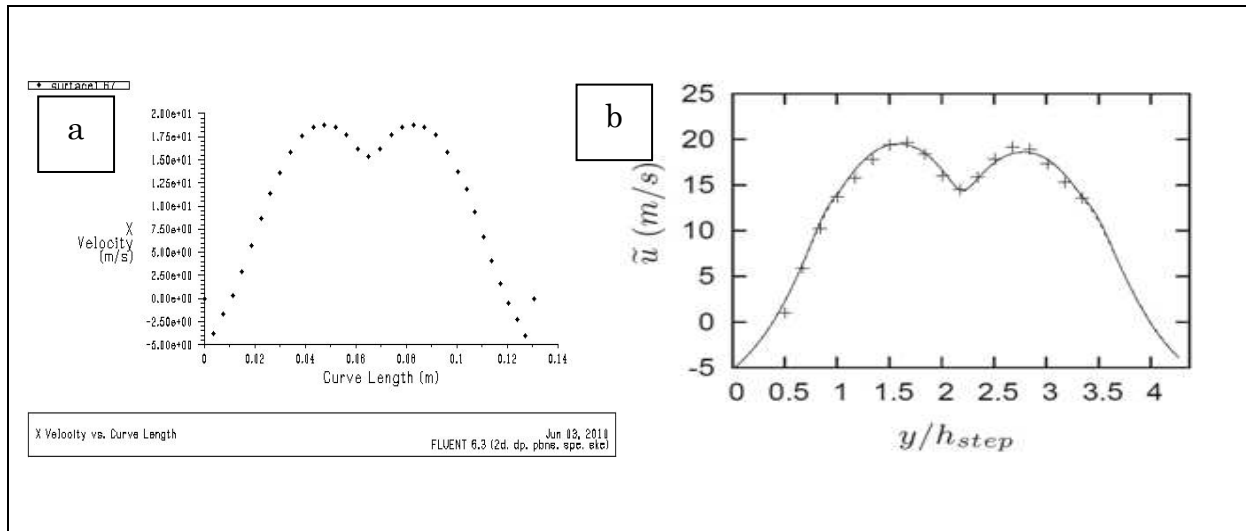


Figure 5.13: vitesse axiale (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Comparaison de la température totale

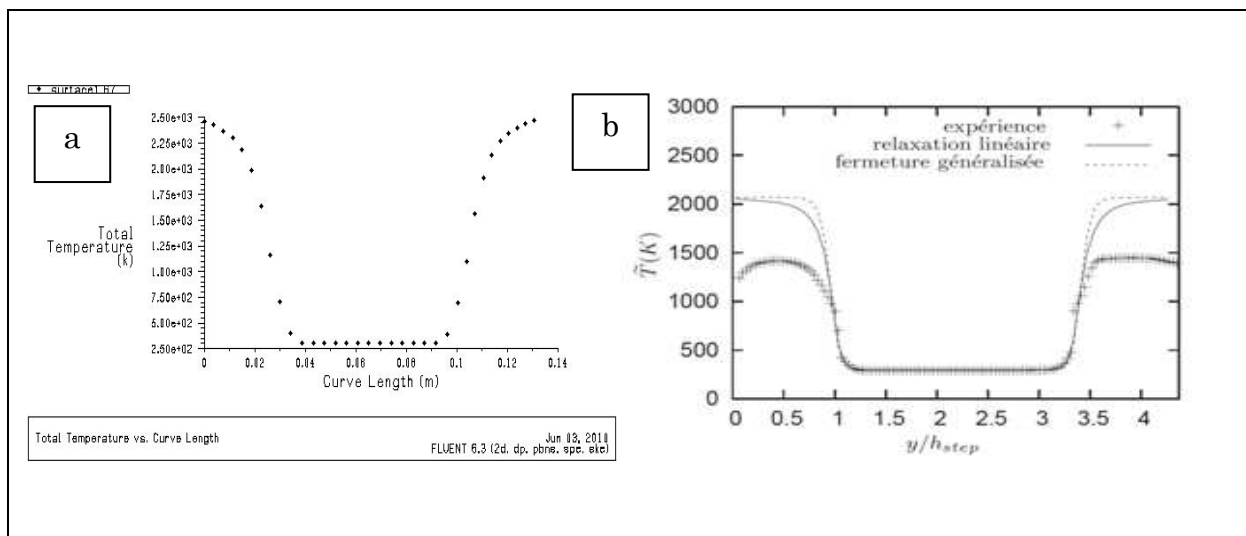


Figure 5.14 : température totale, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Comparaison de l'énergie cinétique turbulente

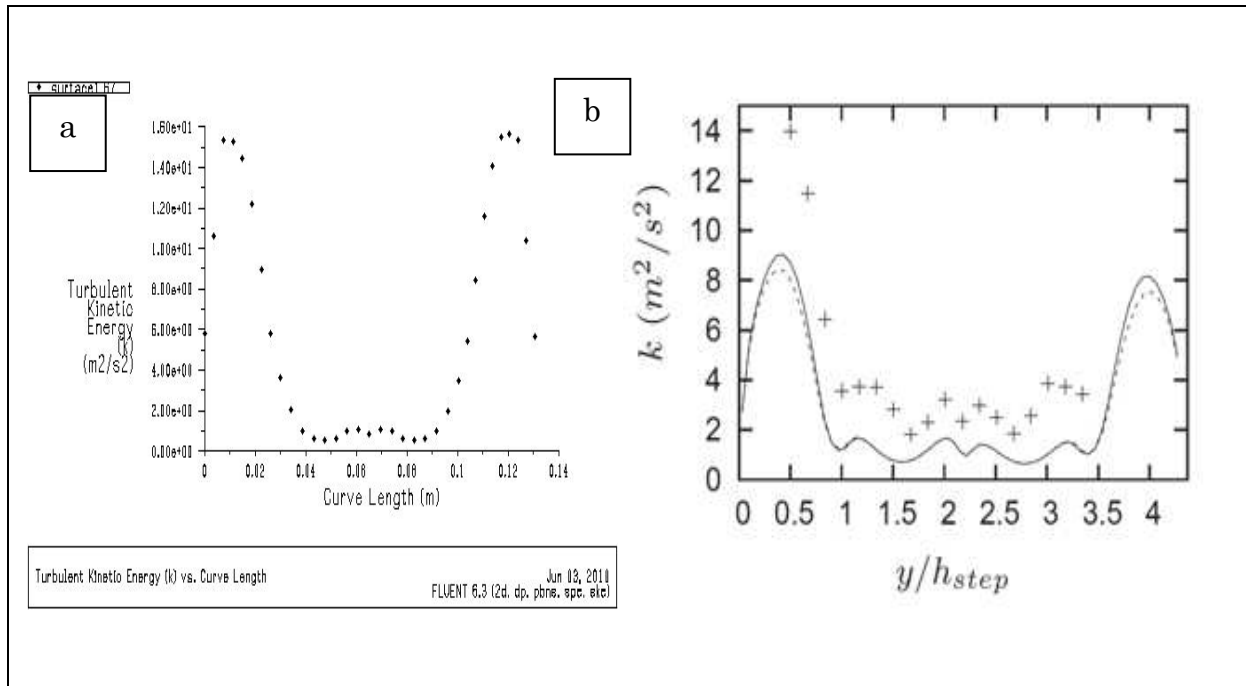


Figure 5.15 : énergie cinétique turbulente, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Station $x/h=0$:

Comparaison de la vitesse radiale

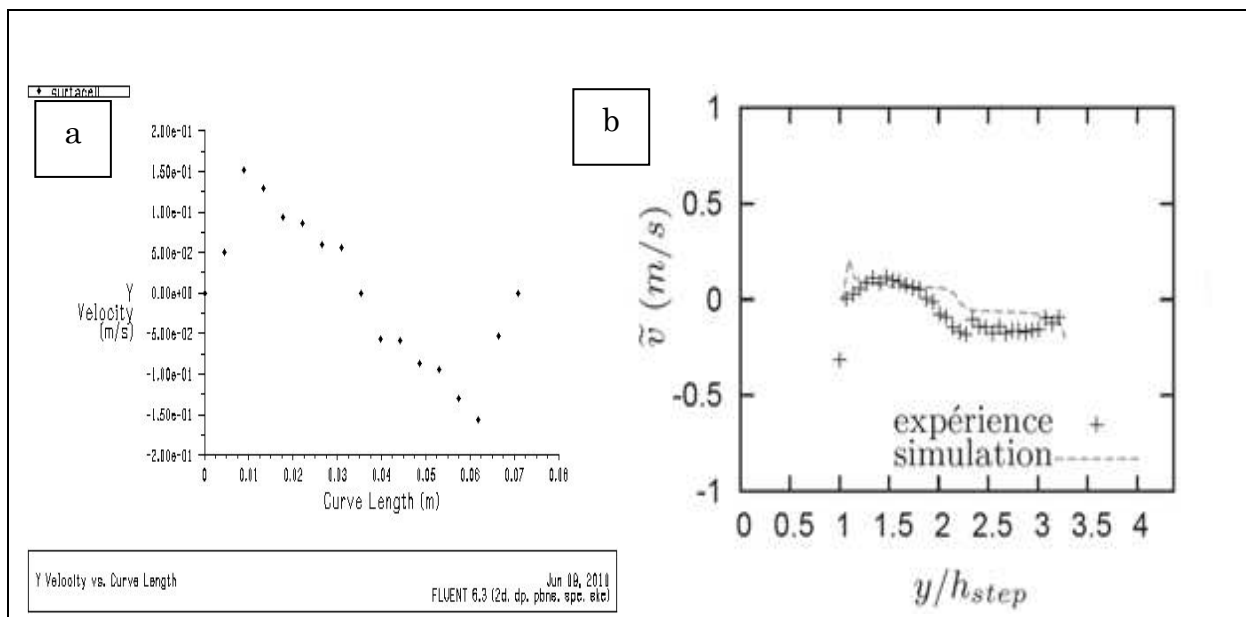


Figure 5.16: vitesse radiale (figure a) résultat de la simulation (figure b) résultat expérimental.

Comparaison de la vitesse axiale

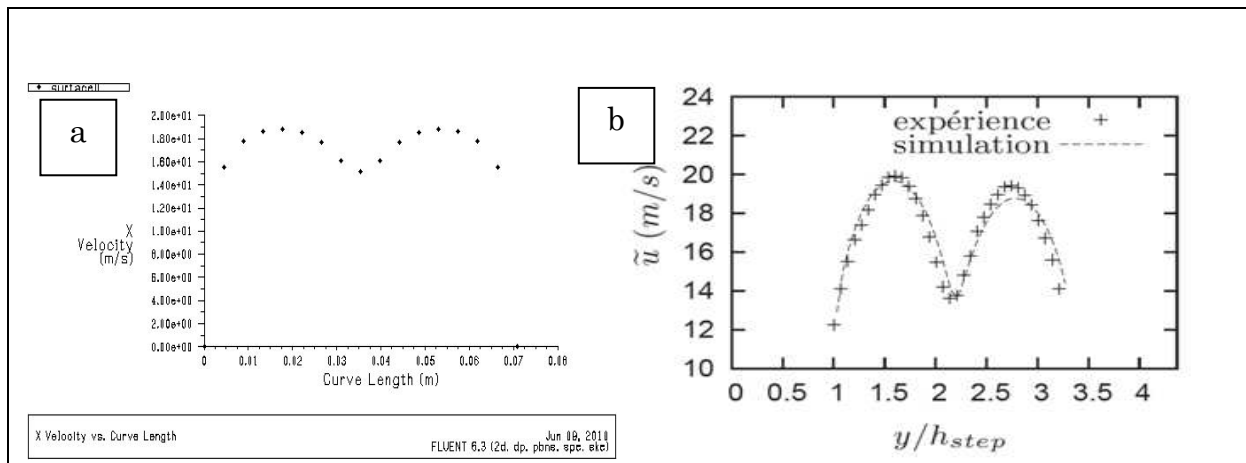


Figure 5.17: vitesse axiale (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Comparaison de l'énergie cinétique turbulente

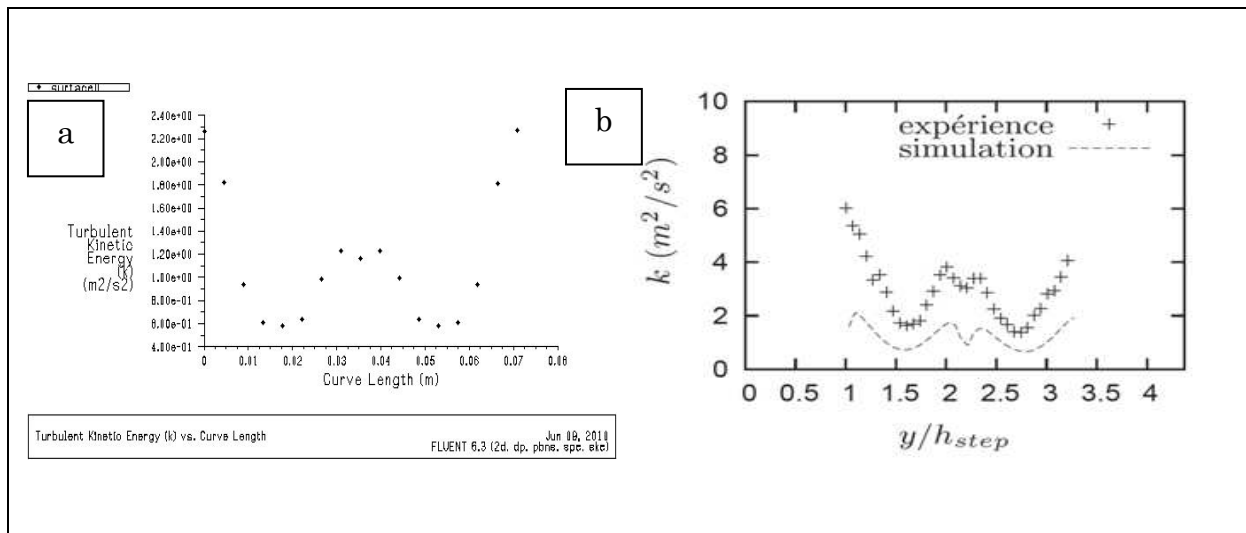


Figure 5.18 : énergie cinétique turbulente, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Interprétation des résultats :

Nous constatons que les résultats obtenus par la simulation sont proches de la réalité, avec une certaine marge d'erreurs qui est due à la non connaissance de certains paramètres comme les conditions de sortie et le modèle de radiation pris dans le cas expérimental sachant que dans la simulation, la radiation est nulle et les parois sont adiabatiques à une température de 300°K, et on a pris l'hypothèse que la combustion est effectuée selon une réaction généralisée.

Nous avons effectué un changement de la chaleur spécifique en utilisant la forme polynomial de MACK BRID et nous avons ajouté à la simulation la production du monoxyde de carbone et monoxyde de nitrogène.

Les résultats obtenus avec ces changements sont les suivants :

Contours des isothermes

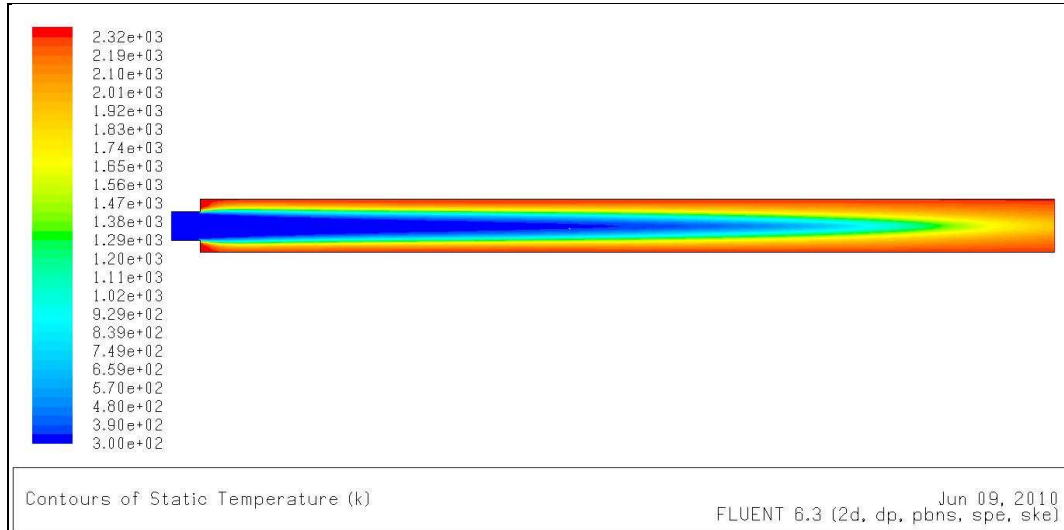


Figure 5.19 : résultats de la simulation de la température statique

Interprétation

Nous remarquons une diminution de la température de 2500°k à une température de 2300°k ce qui est proche de la solution expérimentale, sur cette figure nous constatons une évolution de la température de l'axe de symétrie jusqu'aux parois pour atteindre la valeur maximale à la sortie de la chambre de combustion.

Le contour de l'évolution de la chaleur spécifique :

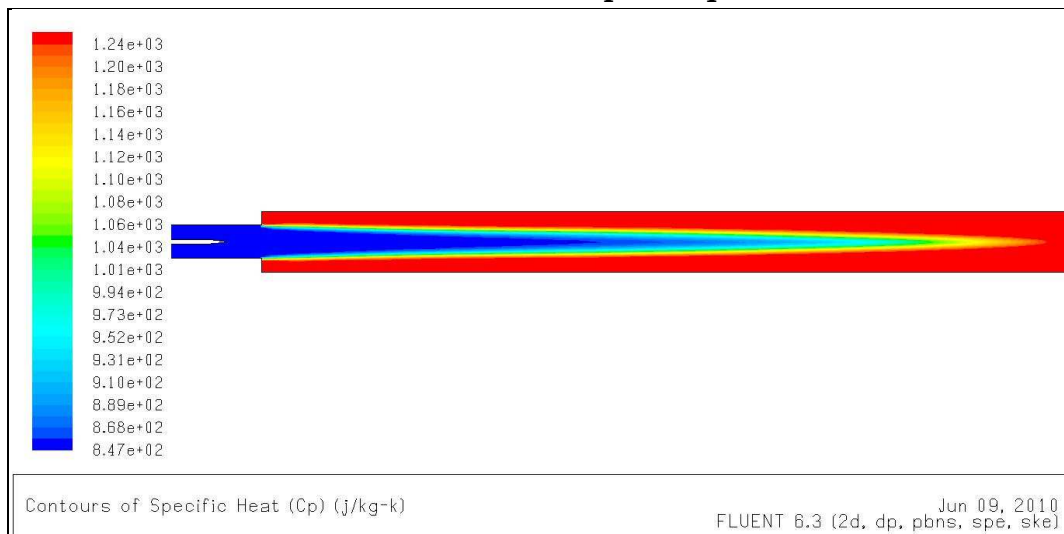


Figure 5.20 : résultats de la simulation de chaleur massique cp.

L'évolution de la chaleur spécifique, est proportionnelle à l'évolution de la température ou la valeur minimale de C_p est de $847\text{J/kg}\cdot\text{k}$ sur à l'axe de symétrie et une valeur maximale $1240\text{J/kg}\cdot\text{k}$, la gradient da la chaleur spécifique est cohérent avec le gradient de la température.

Le profil d'évolution de la production de NO_x dans la chambre de combustion est le suivant :

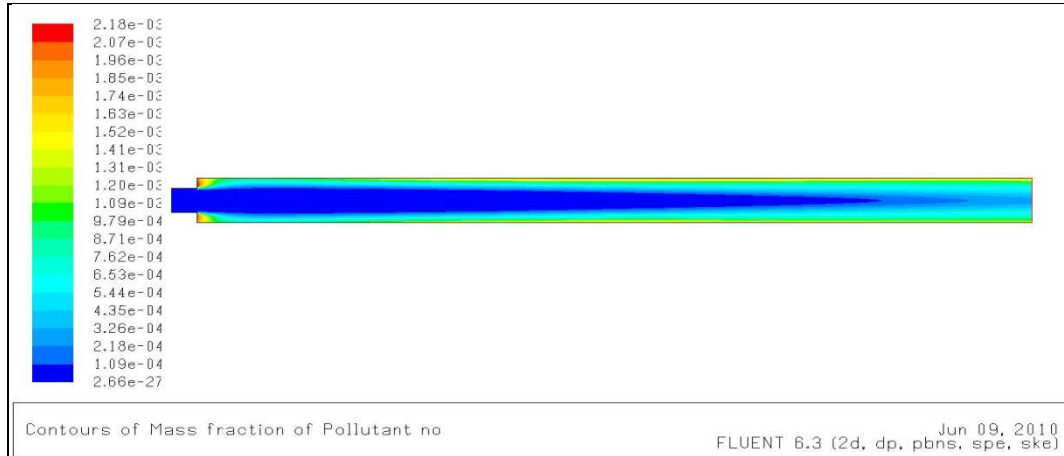


Figure 5.21 : vecteur d'évolution de la fraction massique de NO .

La concentration maximale de monoxyde d'azote est située dans une zone de température où l'oxygène et l'azote sont disponibles.

La fraction massique du NO dans le produit de combustion est de 0.00065 . Vu que la combustion est prémélangée, L'évolution de la production de monoxyde de nitrogène, est compatible avec celle de la température car dans ce cas, l'effet de température augmente la production des NO thermique et non le NO précoce.

Le profile d'évolution de la production de CO dans la chambre de combustion est le suivant :

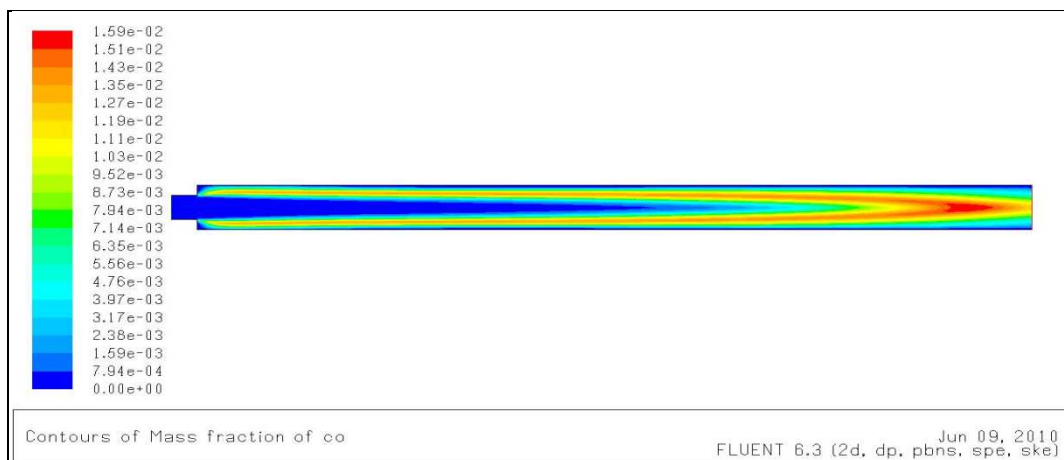


Figure 5.22 : vecteur d'évolution de la fraction massique de CO .

La concentration maximale de monoxyde de carbone est située dans une zone de température ou la concentration de CO₂ est maximale ce qui génère une dissociation du CO₂ en CO.

La fraction massique du CO dans le produit de combustion est de 0.0062.

La vitesse moyenne de sortie des gaz est calculée selon la formule suivante :

$$\bar{v} = \frac{1}{A} \int v \, dA \quad (5.1)$$

La température moyenne de sortie des gaz est calculée par :

$$\bar{T} = \frac{\int T \, \rho \bar{v} \cdot d\vec{A}}{\int \rho \bar{v} \cdot d\vec{A}} \quad (5.2)$$

Pour les deux cas de simulation on a obtenu les résultats suivants :

La vitesse moyenne de sortie pour les cas où le cp est pris par défaut mixing low est de 71.78 m/s et la température moyenne est de 2299.244 °k.

La vitesse moyenne de sortie pour les cas où le cp est un polynôme est de 65.69m/s et la température moyenne est de 2104.504 °k.

On constate que le Cp est d'une grande importance dans la précision de la solution numérique.

Effet de variation de la richesse sur les paramètres thermodynamique de la flamme :

Dans ce qui suit, nous avons effectué des variations de la richesse afin de voir son influence sur la température de fin de combustion, la vitesse de la flamme et le taux de production des polluants. Les valeurs de la richesse sont :

$$\phi = 0.2, \quad \phi = 0.4, \quad \phi = 0.8 \text{ et } \phi = 0.95$$

a- sur la température totale :

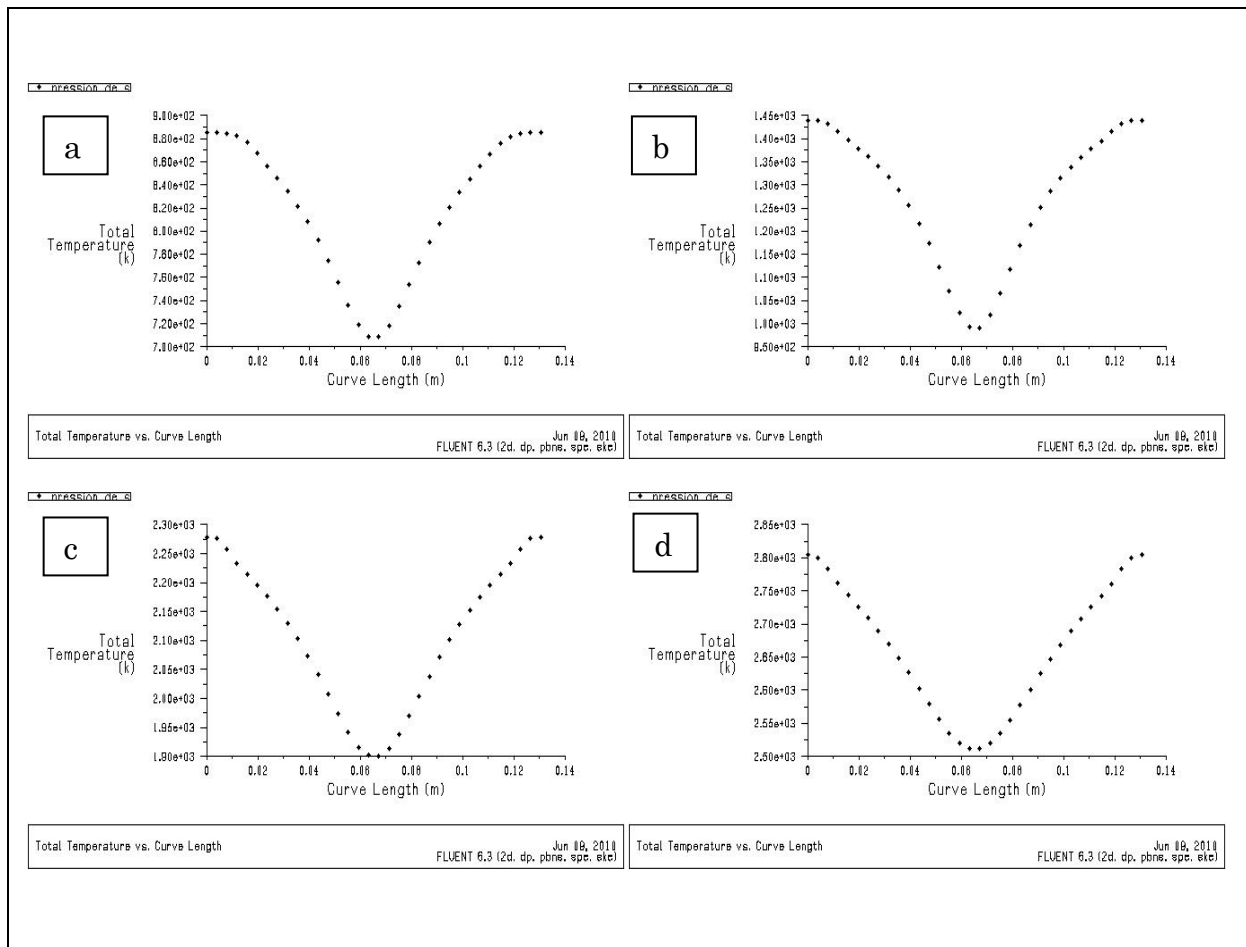


Figure 5.23 : effet de la variation de la richesse sur la température totale.

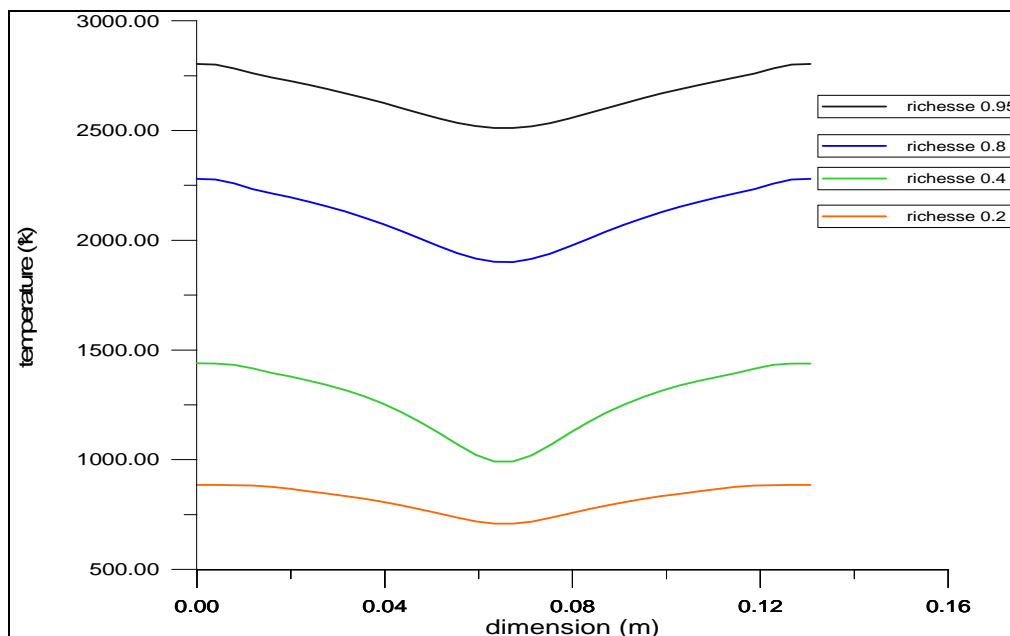


Figure 5.24 : évolution de la température avec la richesse.

Après avoir effectué un changement de richesse comme le montre le graphe précédent, nous constatons que la température de fin de combustion, augmente avec l'augmentation de la richesse est atteint sa valeur maximale dans le cas stœchiométrique.

b- sur la vitesse :

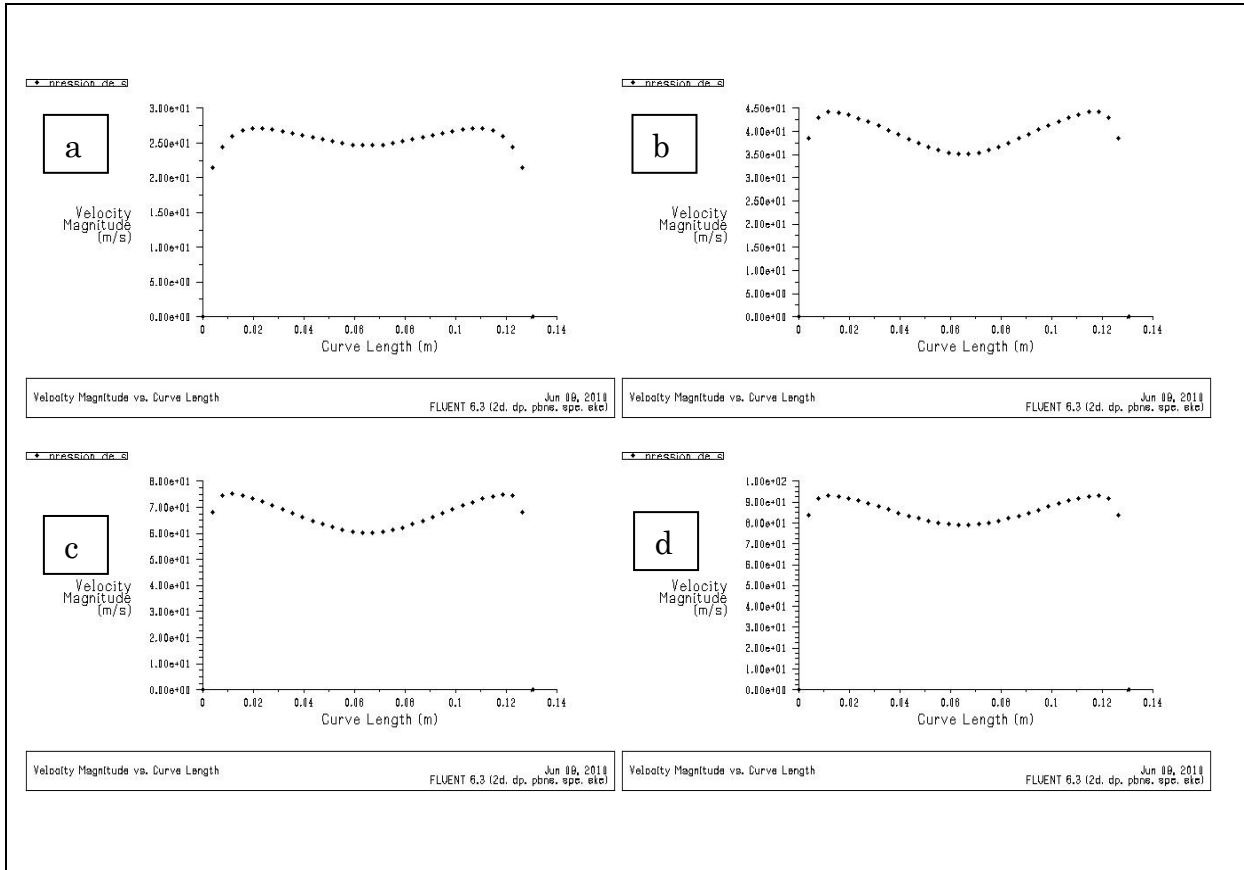


Figure 5.25 : effet de la variation de la richesse sur le champ de vitesse.

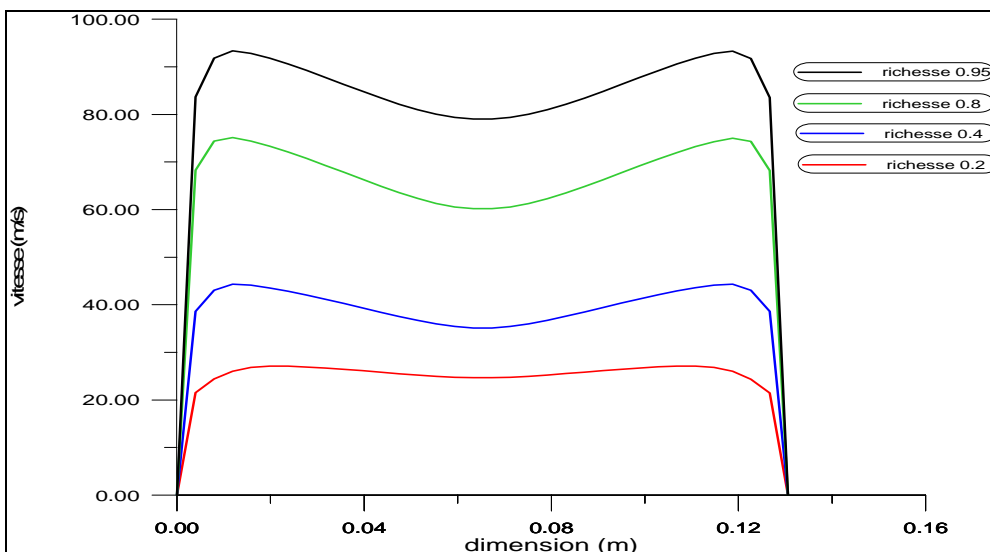


Figure 5.26 : évolution de la vitesse avec la richesse.

Nous constatons depuis ce graphe que l'augmentation de la richesse, engendre un accroissement de la vitesse des gaz brûlés, ce qui implique que les deux paramètres évoluent d'une manière proportionnelle.

c- sur la production de CO :

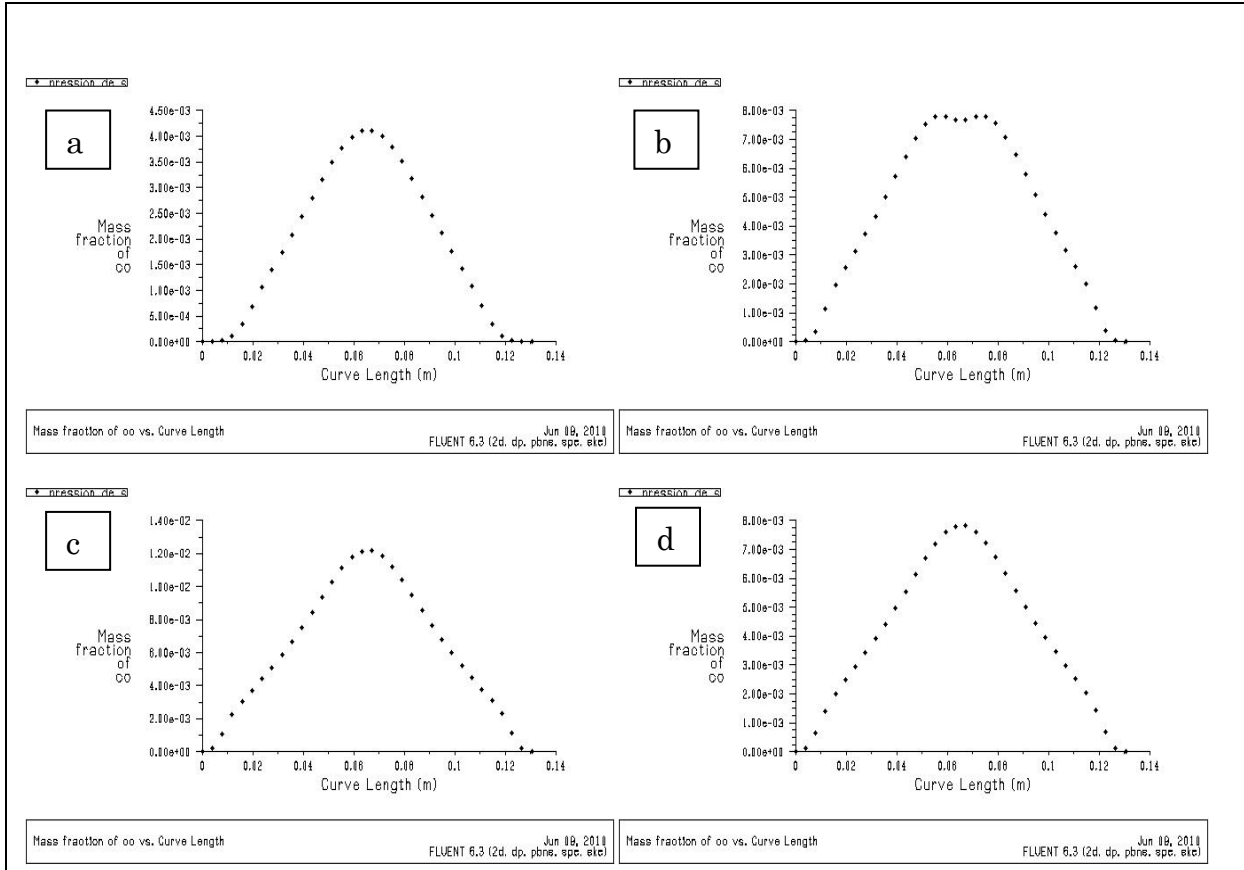


Figure 5.27 : effet de la variation de la richesse sur la production de CO.

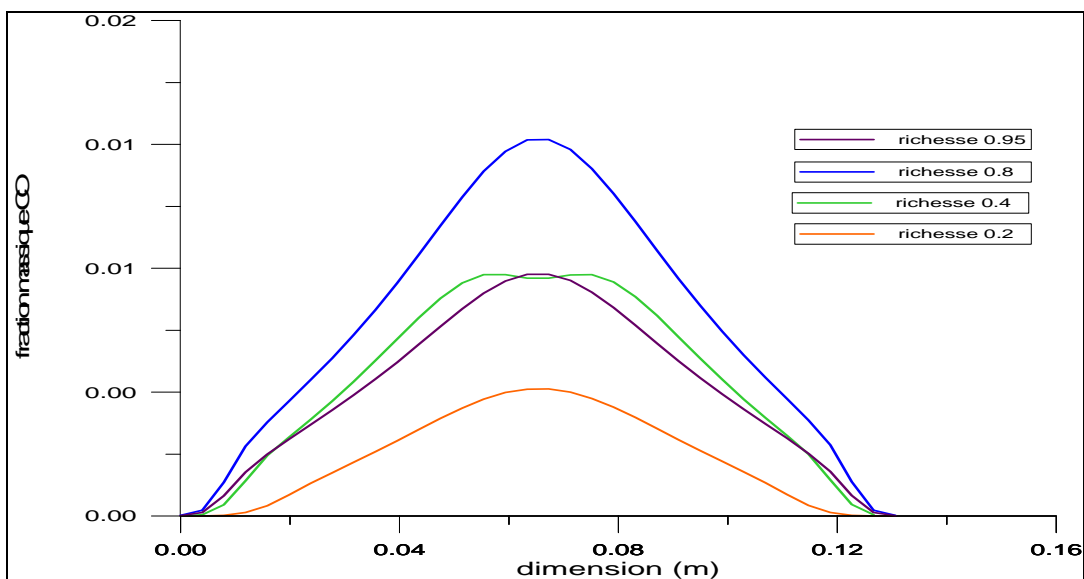


Figure 5.28 : évolution de la production de CO avec la richesse.

Nous constatons depuis le graphe que la production de monoxyde de carbone est inversement proportionnelle avec l'augmentation de la richesse dans la combustion, car lors d'une combustion stœchiométrique, nous avons une fraction massique de CO très minime.

d- sur la production de NO :

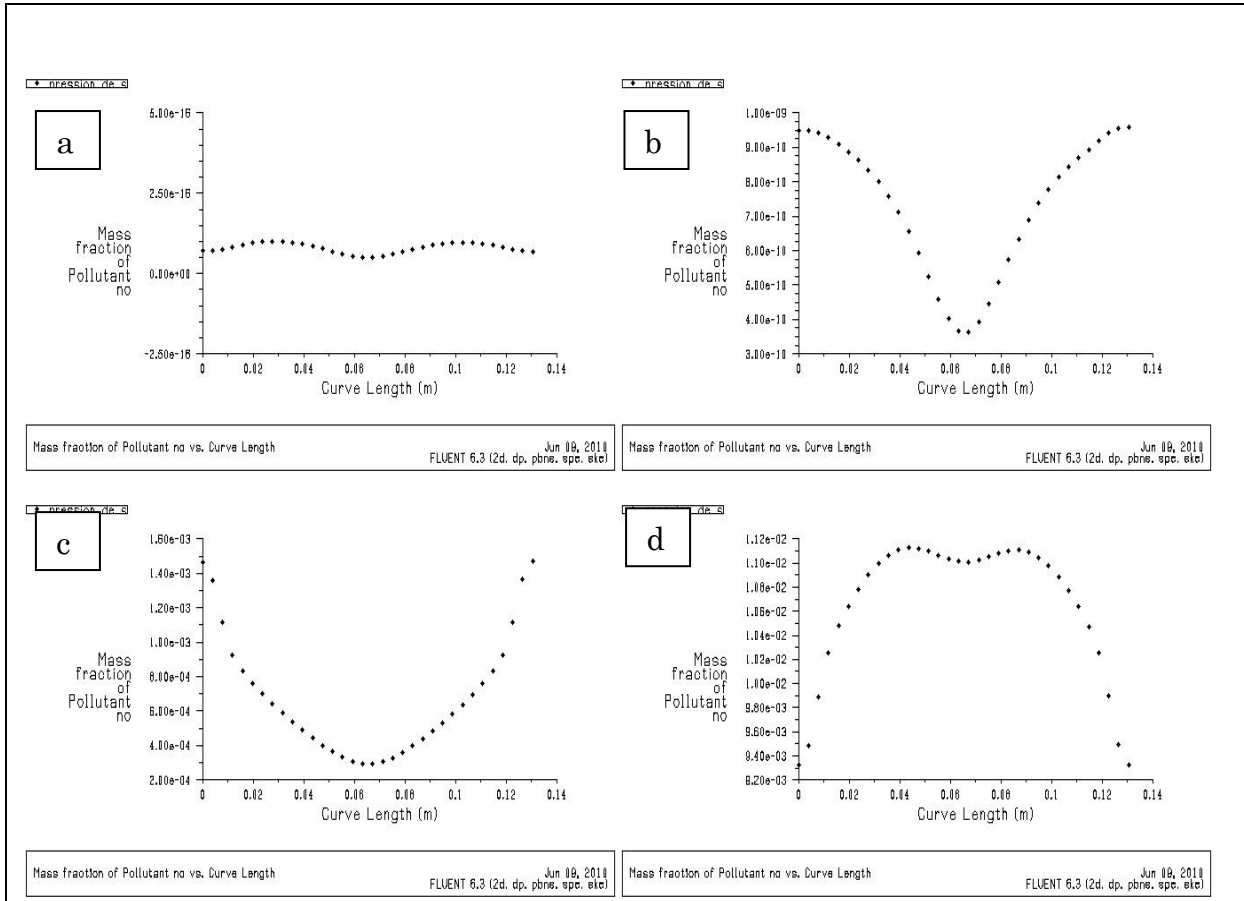


Figure 5.29 : évolution de la fraction massique de no avec la richesse.

Nous constatons depuis le graphe que la production de monoxyde d'azote est proportionnelle avec l'augmentation de la richesse dans la combustion, car lors d'une combustion stœchiométrique, nous avons une fraction massique de NO très importante.

5.3 Simulation d'une flamme prémélangée avec injection d'air

a- La géométrie :

Cette géométrie est celle d'un banc d'essai de LULEA university, elle est réalisée dans le but de visualiser l'effet d'un jet d'air sur la combustion.

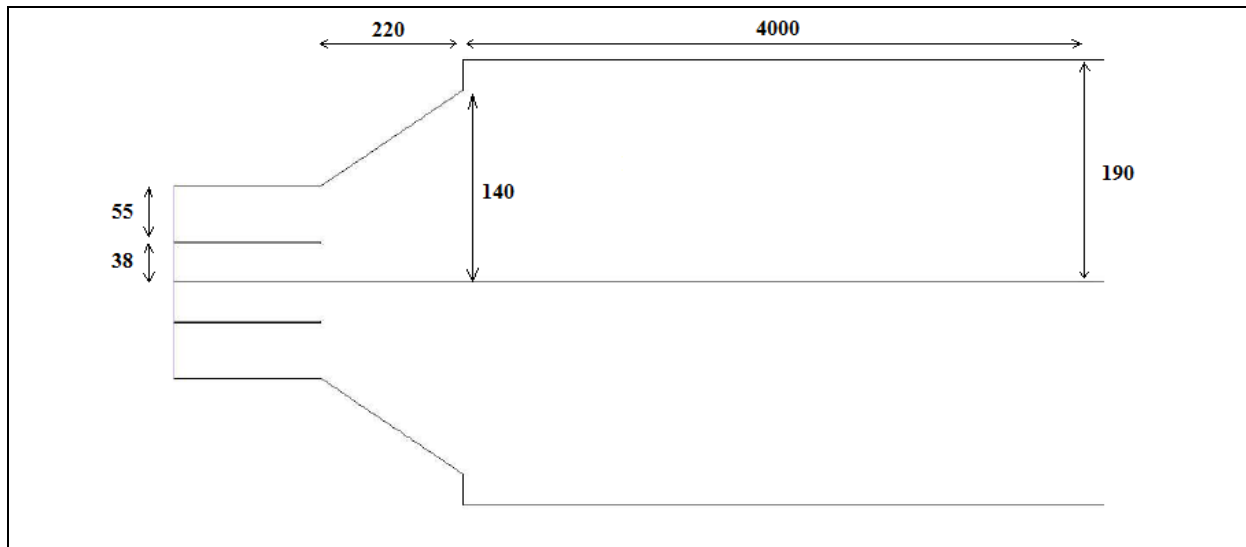


Figure 5.30 : *La Géométrie*

Figure 5. le maillage :

Le maillage est réaliser quadrilatérale, le nombre de cellules est de 58000



Figure 5.31 : *Le maillage*

Figure 5. condition aux limites :

Condition d'entrée :

1. Pour la flamme de prémélange

Vitesse d'entrée de mélange air-méthane 20 m/s.

Température de mélange air-méthane 300 °K.

Fraction massique de méthane 0.04554.

Intensité de turbulence 10%.

Diamètre hydraulique 0.11 m

2. Pour le jet d'air.

Vitesse de l'ajout d'air 5 m/s.

Température de l'air ajouter 300 °K.

Intensité de turbulence est de 22%.

Diamètre hydraulique 0.076 m

Condition de sortie :

Pression de sortie est égale à la pression atmosphérique.

Figure 5. Résultats et interprétation :

Les résultats de la simulation sont les suivantes :

Contour isotherme :

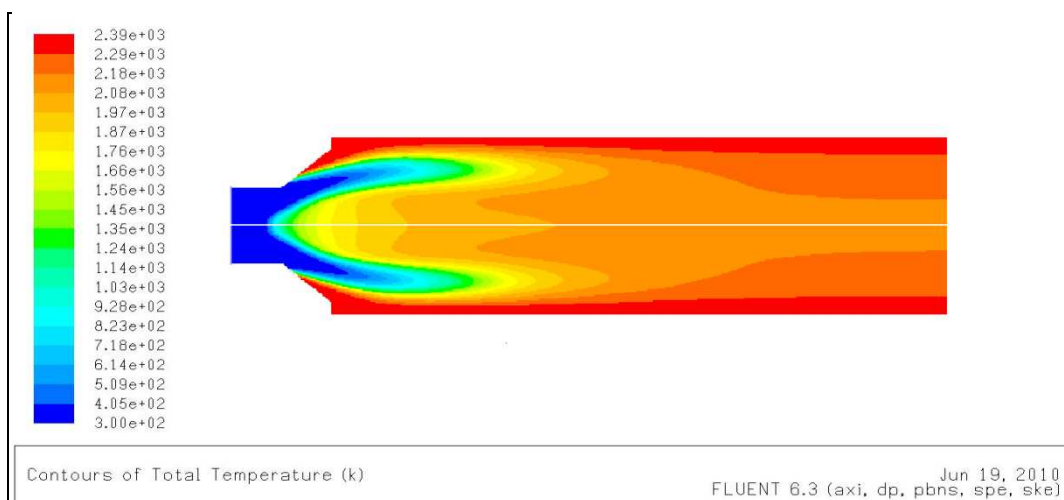


Figure 5.32 : Le contour isotherme.

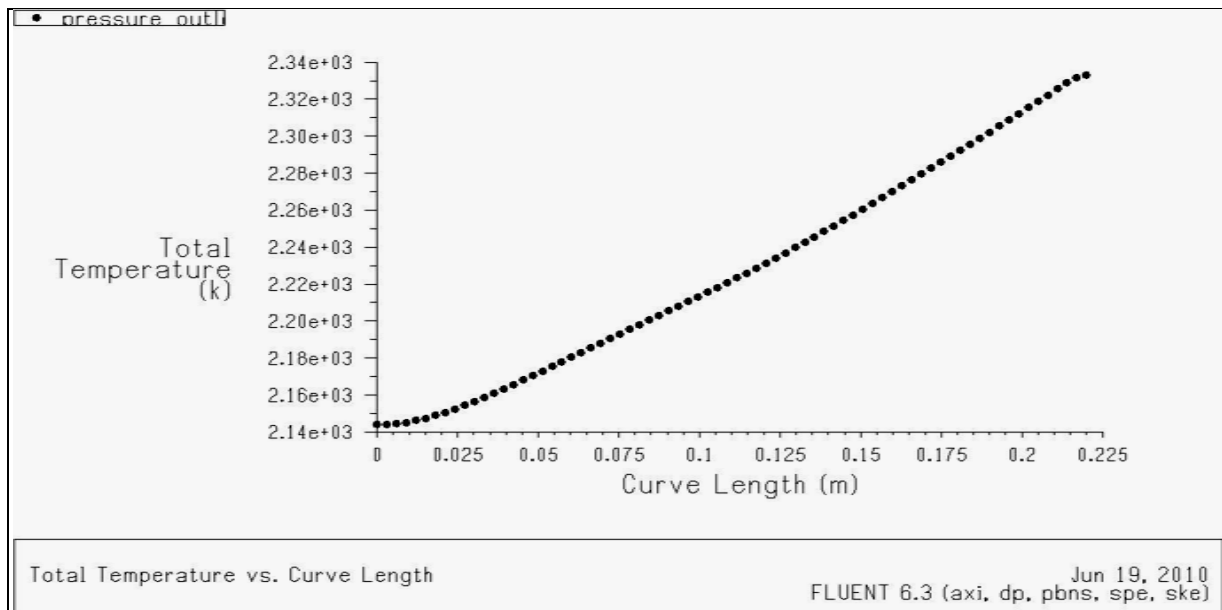


Figure 5.33 : *évolution de la température*

Interprétation :

Nous constatons que depuis le graphe que la température maximale est de 2340°k aux parois est à la sortie de la chambre de combustion, par contre sur l'axe de symétrie 1760°k, nous remarquons une zone de séparation sur l'axe de symétrie qui est due à l'injection de l'air.

Contours iso-vitesse axiale

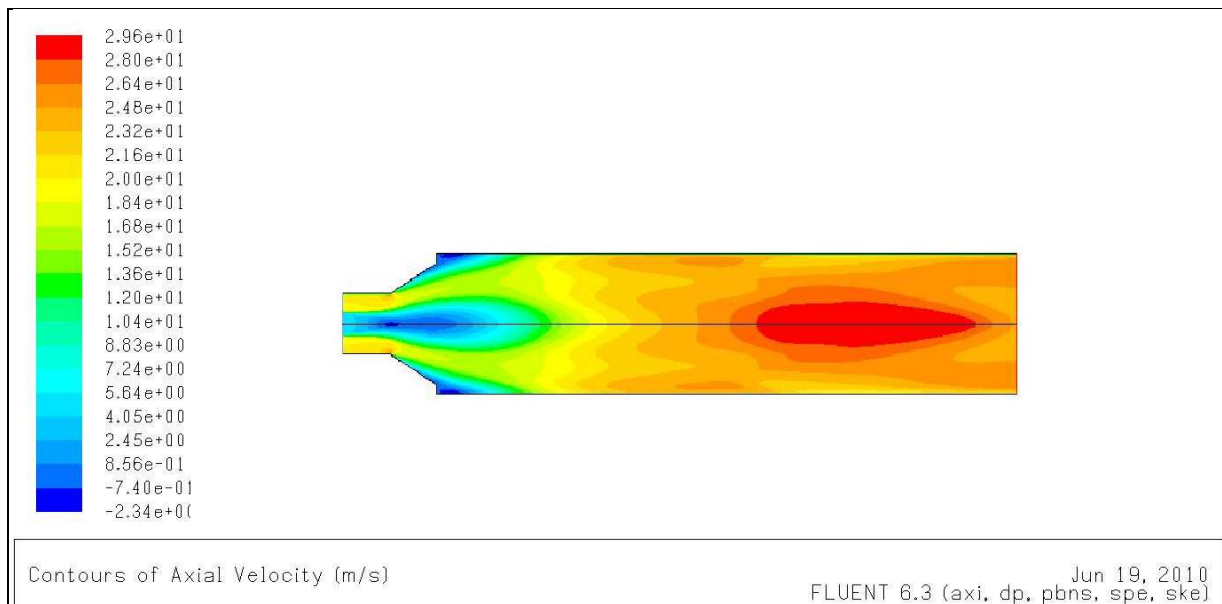


Figure 5.34 : *contours iso- vitesse*

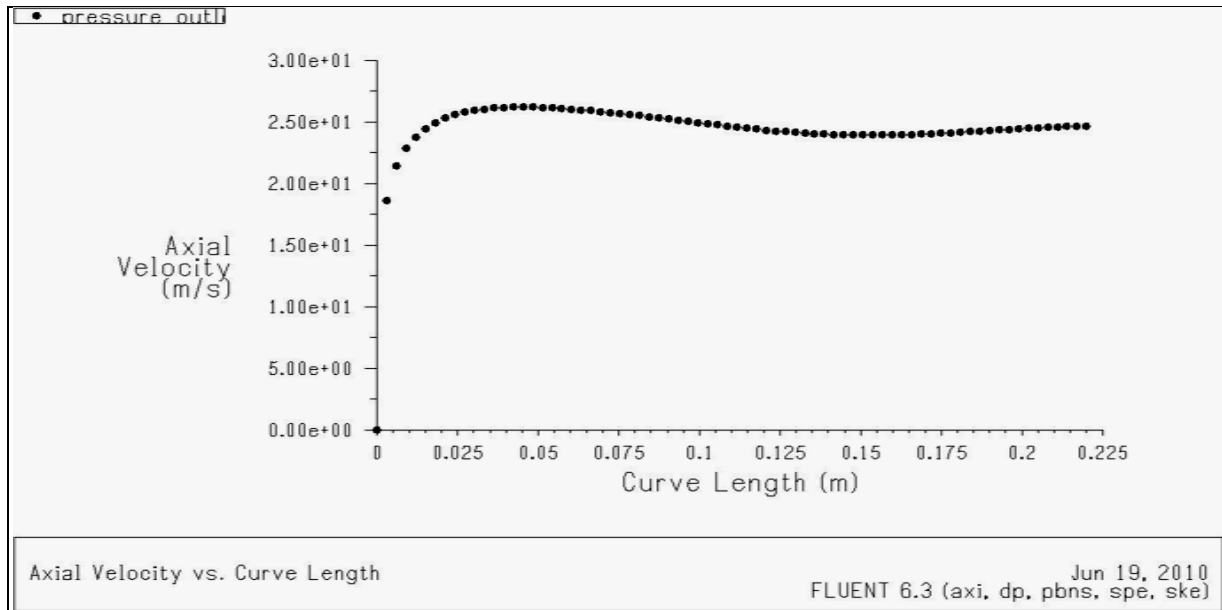


Figure 5.35 : *évolution de la vitesse*

Interprétation :

Nous constatons depuis la figure du profile de vitesse que la vitesse maximale est de 30m/s, à la sortie de la chambre de combustion, est la zone de pénétration de l'air déforme le profile de vitesse sur l'axe de symétrie .

Evolution de la fraction massique de cha4 :

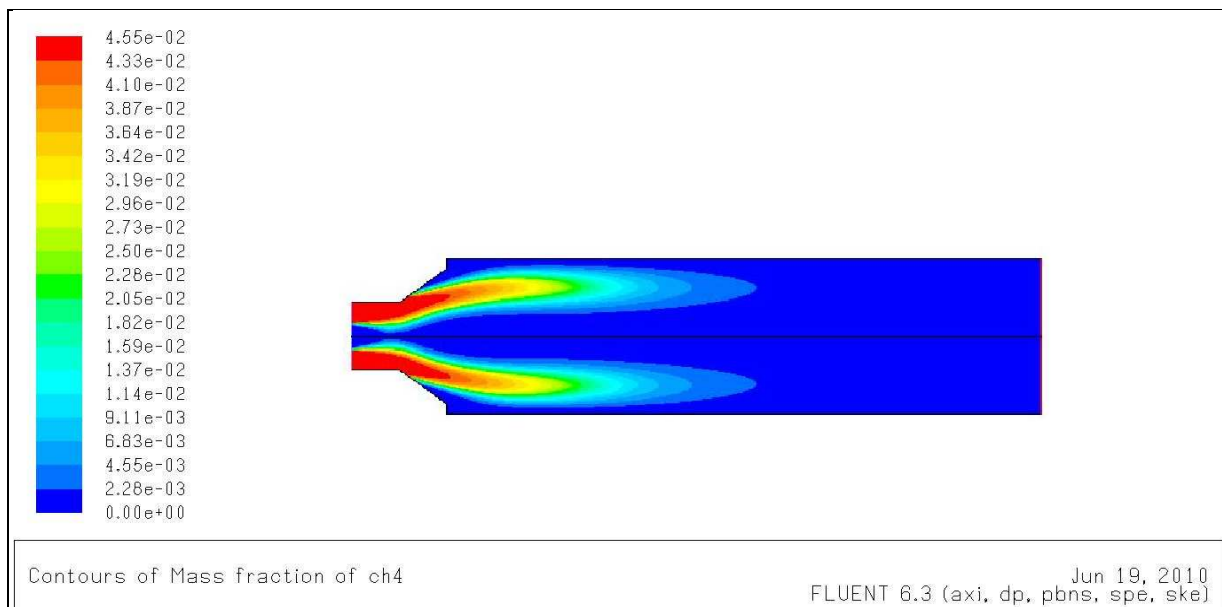


Figure 5.36 : *contours d'évolution de la fraction massique de ch4.*

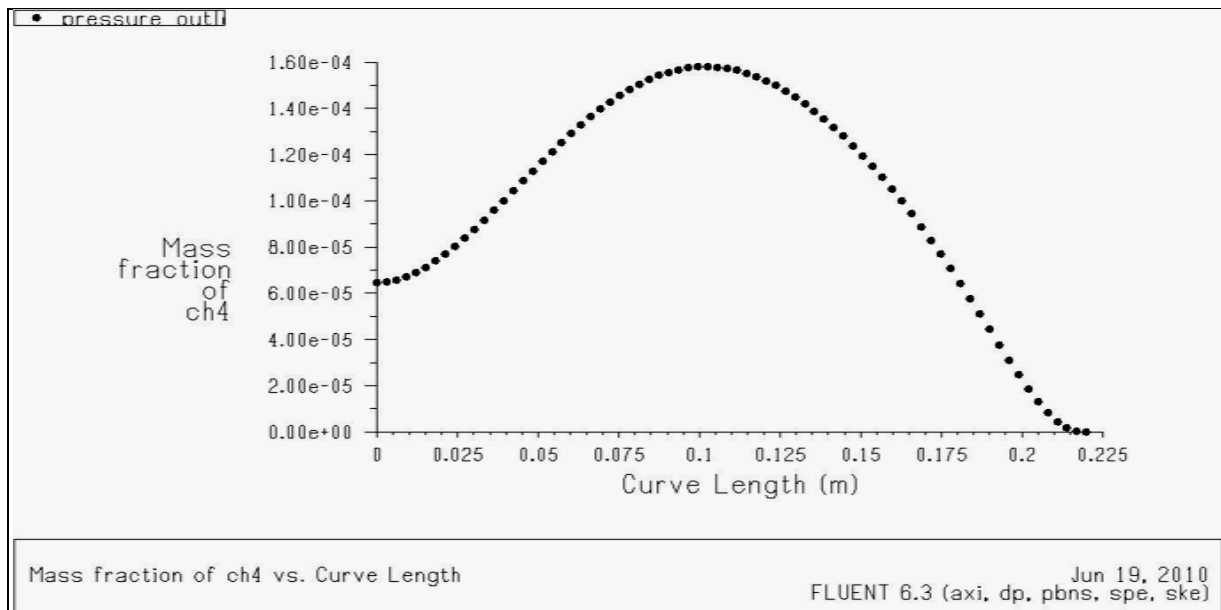


Figure 5.37 : fraction massique de ch_4

Interprétation :

La fraction massique de ch_4 est de 0.0455 au niveau des injecteurs, elle diminue le long de l'axe de symétrie pour atteindre sa valeur nulle, car tout le méthane c'est brûlé.

Evolution des la fraction massique de O_2

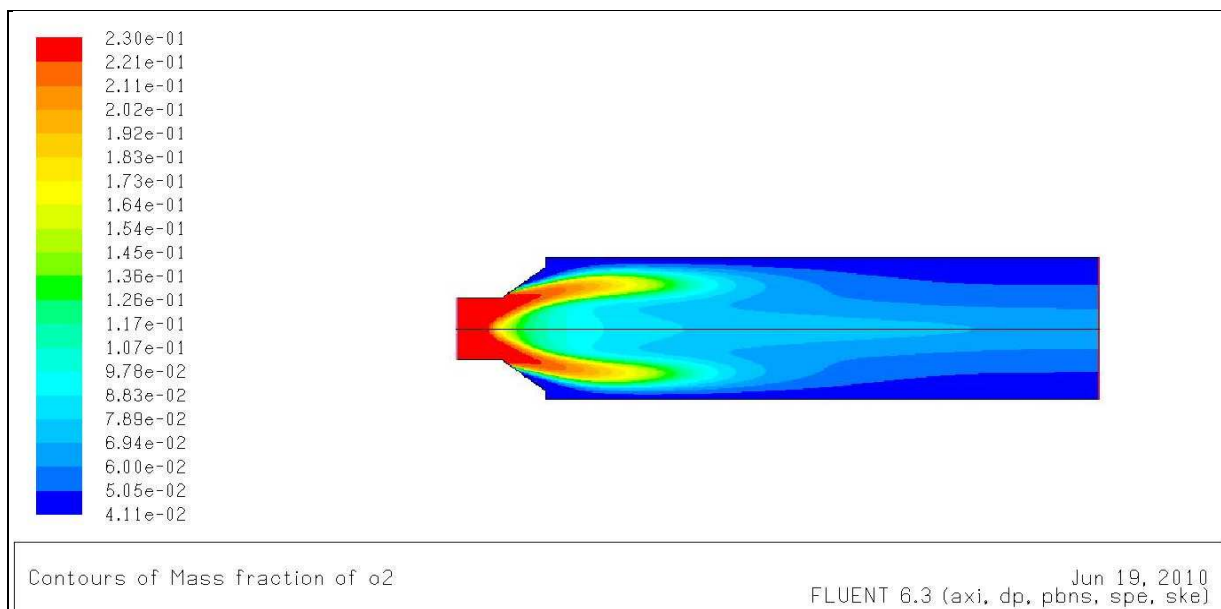


Figure 5.38 : évolution de la fraction massique d' O_2

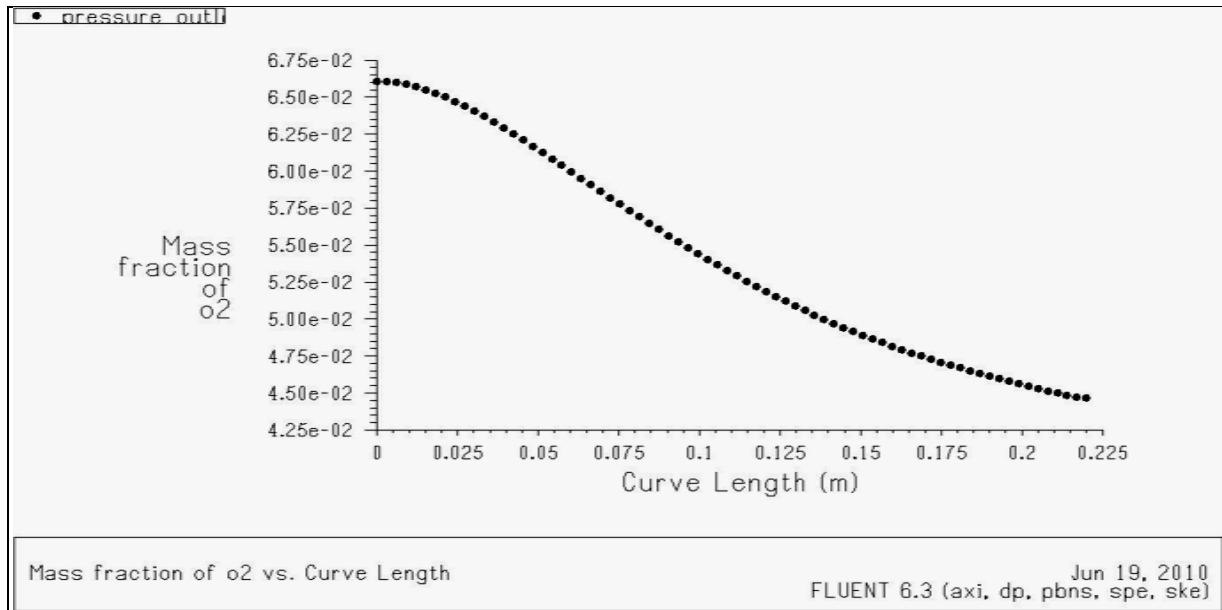


Figure 5.39 : évolution de la fraction massique d'O₂

Interprétation :

Nous remarquons que la fraction massique de l'oxygène est de 0.23 à l'injection du prémélange et le jet d'air, mais on constate une zone de séparation qui est due à l'injection de l'air au niveau de l'axe de symétrie.

5.4 Simulation d'une flamme turbulente de diffusion.

Cet exemple de simulation montre un exemple concret d'une flamme laminaire de diffusion dans une chambre de combustion du four HARWELL, le combustible utilisé est le méthane.

a- La géométrie :

La chambre de combustion est illustrée dans la **figure 5.16**

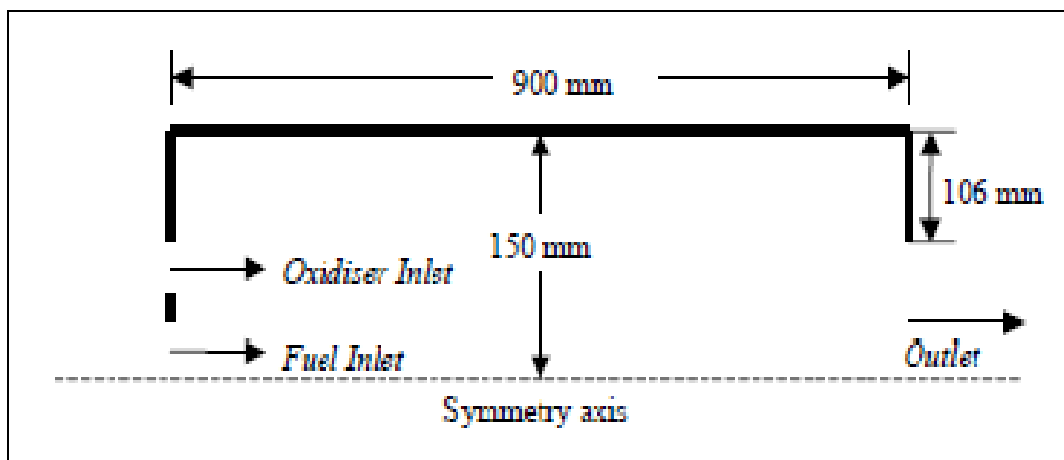


Figure 5.40 : dimensions de la chambre de combustion HARWELL.

b- Le maillage :

Le maillage de la chambre de combustion est constitué de 15000 mailles quadratiques illustré dans la **figure 5.17**

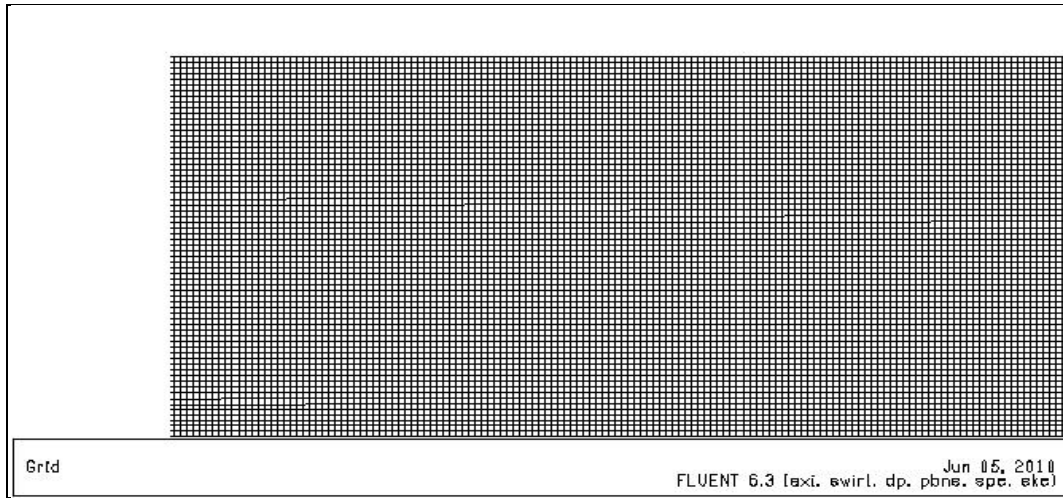


Figure 5.41 : *maillage de la chambre de combustion HARWEL*

c-Condition aux limites.

Condition d'entrée

Carburant CH4	L'oxydant
Vitesse axiale : 15.03 m/s.	Vitesse axiale : 12.76 m/s.
Vitesse de rotation 0.00 m/s.	Vitesse de rotation 8.24 m/s.
Energie cinétique turbulente : 2.26 m ² /s ²	Energie cinétique turbulente : 1.67 m ² /s ²
Taux de dissipation de la turbulence : 1131.8 m ² /s ³ .	Taux de dissipation de la turbulence : 692 m ² /s ³ .
Température : 291°k.	Température : 291°k.
Les fractions massiques	Les fractions massiques
Méthane : 0.091	Oxygène : 0.300.
Azote : 0.90	Nitrogène 0.625.
	Vapeur d'eau : 0.075-

Tableau 5.1 : *conditions aux limites.*

d-Résultats.

Les résultats de la simulation sont illustrée par les contours les suivants :

Contours isothermes :

La **figure 5.3** illustre les contours isothermes obtenu pour la chambre de combustion .la **figure a** montre les résultats obtenus par la simulation et la **figure b** montre ceux mentionnés dans la référence [11], nous remarquons que les résultats sont semblables.

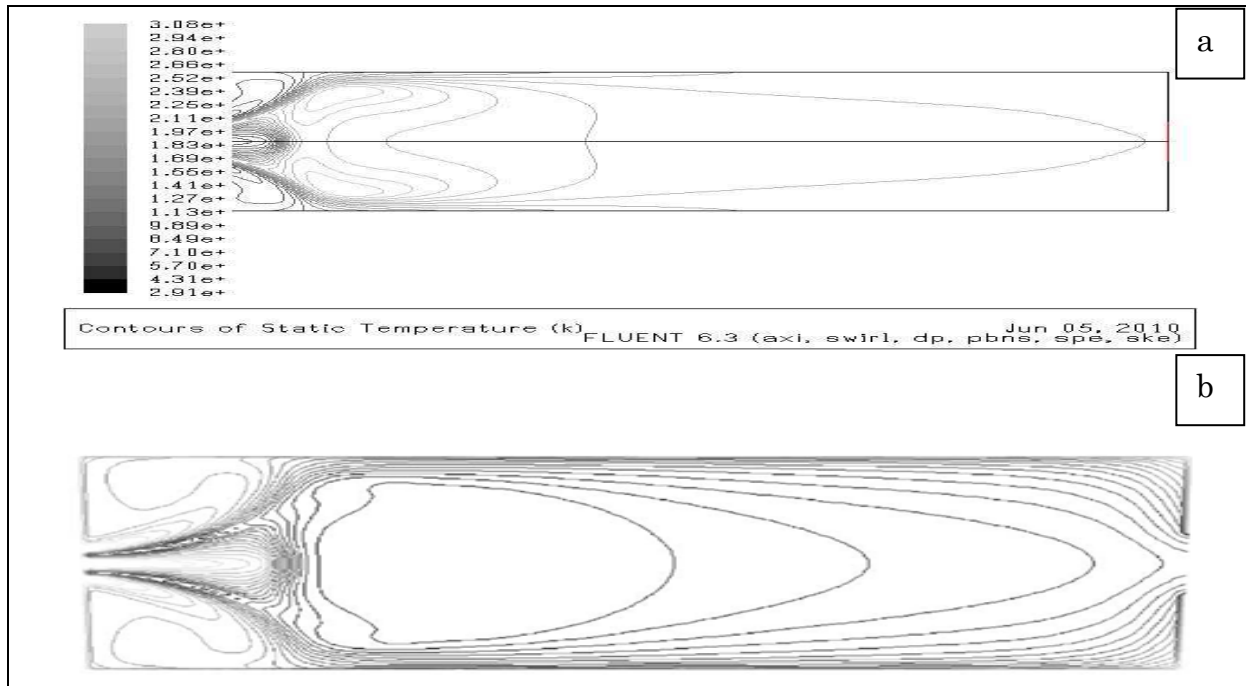


Figure 5.42 : contours isothermes

Le profil de vitesses.

La figure 5.3 illustre les contours iso-vitesse obtenu pour la chambre de combustion .la figure a montre les résultats obtenus par la simulation et la figure b montre ceux mentionné par la reference [11].nous remarquons que les résultats sont presque semblables.

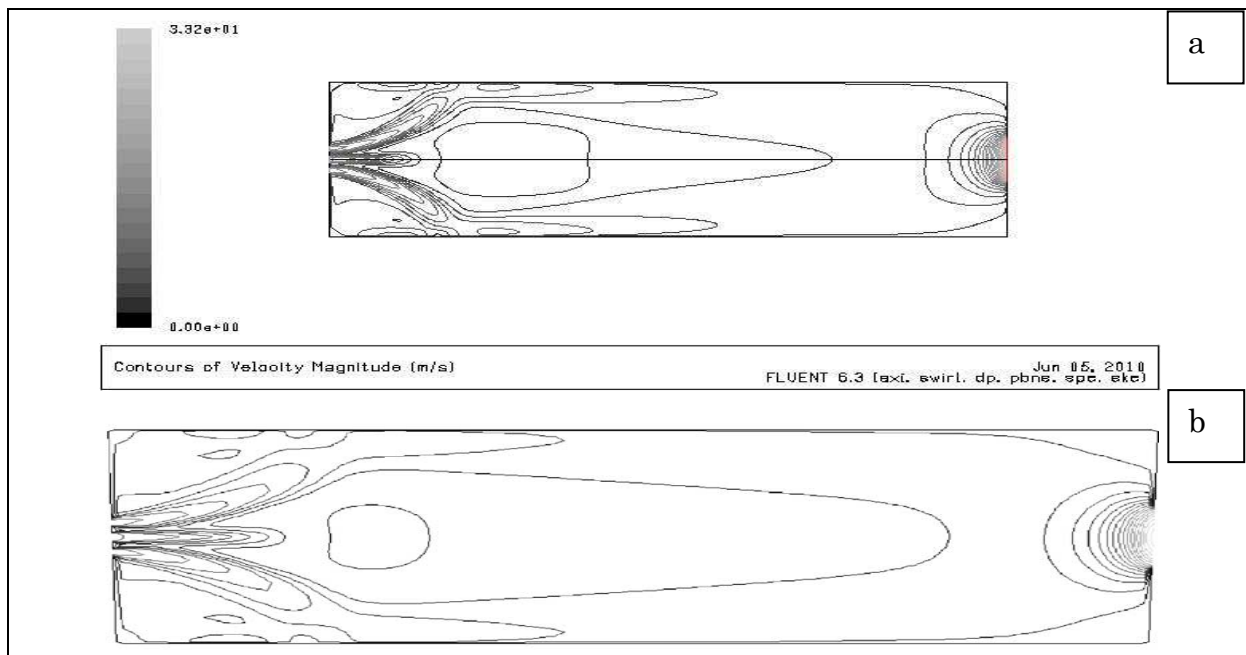


Figure 5.43 : contours iso-vitesses.

e-Interprétation des résultats :

D'après les résultats de simulation, nous constatons que les résultats sont proches de la réalité mais avec une marge d'erreur qui est due a la non connaissance des conditions de sortie.

La température maximale dans la simulation est de 3000°k et dans le cas pratique est de 2700°k. Concernant la vitesse maximale obtenue avec la simulation elle est de 33 m/s et dans le cas pratique elle est égale à 38m/s ce qui est proche de la réalité.

Une schématisation des fractions massiques ainsi que les températures sont illustrées dans la figure suivante :

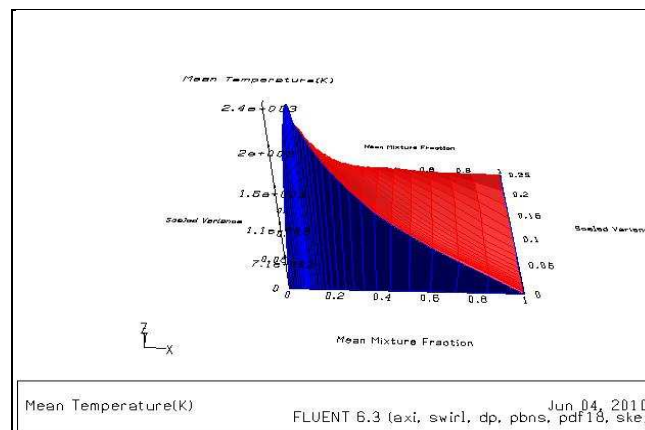


Figure5.44 : La température non adiabatique dans la tranche d'enthalpie adiabatique.

Comparaison entre les évolutions des fractions massiques du méthane et de l'oxygène.

Fraction massique du méthane :

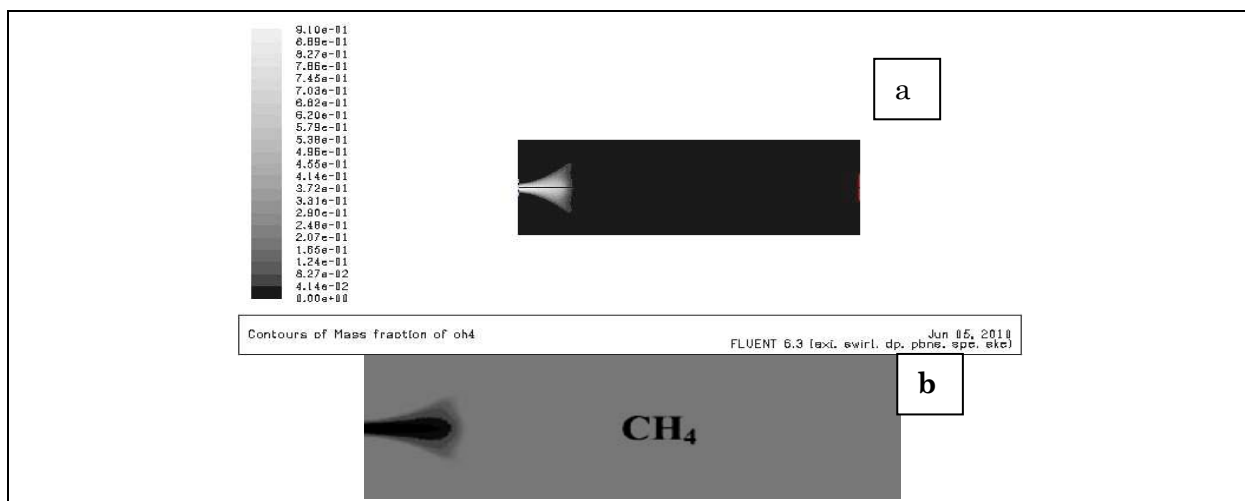


Figure5.45: fraction massique du ch4 (figure a) simulée, (figure b) expérimentale

Fraction massique de l'oxygène :

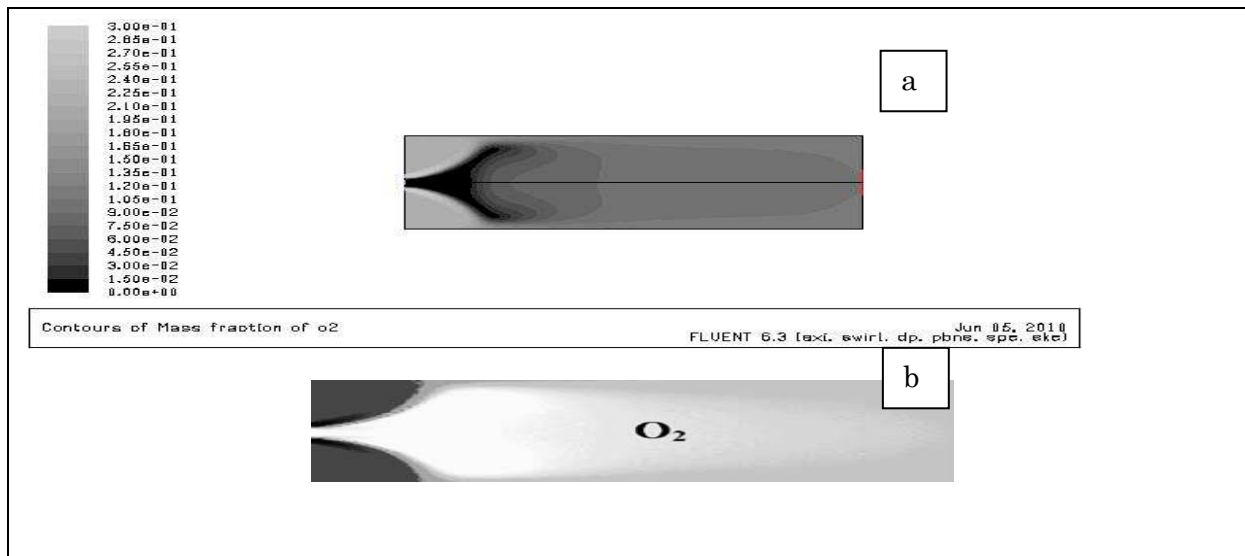


Figure 5.46 : fraction massique du O_2 (figure a) simulée, (figure b) expérimentale.

On constate que les deux profils sont presque identiques ce que montre que notre simulation a donné de bon résultats.

5.5 Simulation d'une flamme dans une chambre de turboréacteur

La chambre de combustion étudiée est de type tubo-annulaire composée de plusieurs tubes de flammes répartis sur le périphérique de sa base. Ces derniers seront modélisés par une seule injection coaxiale à laquelle on rapportera un débit global (figure 5.22). L'injecteur introduit partiellement dans le volume de la chambre de combustion délivre le combustible (Jet-A) supposé à l'état vapeur entouré d'un écoulement d'air prélevé du dernier étage du compresseur haute pression dont la pression et la température sont fonction de l'altitude locale, pour un régime fixé du moteur.

a- La géométrie :

La géométrie est constituée d'un injecteur de carburant et d'une prise d'air ainsi que d'un tube à flamme les détails sur la chambre sont illustrés dans la figure suivante :

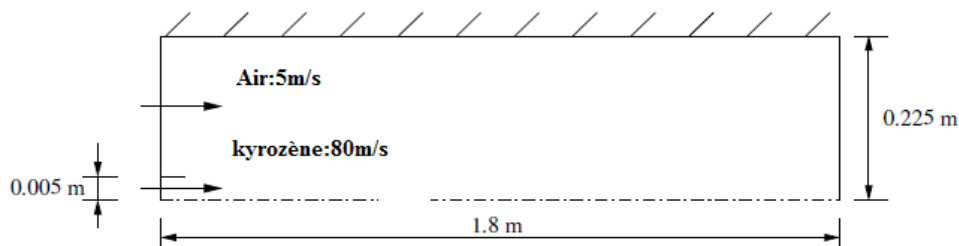


Figure 5.47 : dimensions de la chambre de combustion.

b-maillage :

Le maillage est quadratique contenant 9000 mailles, il est raffiné au niveau de l'axe de symétrie qui est le siège d'un grand gradient de température.

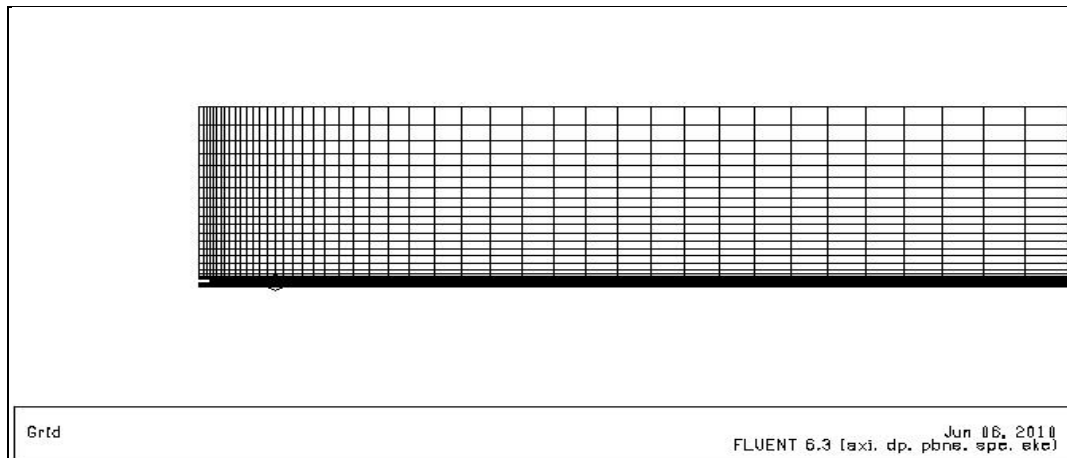


Figure 5.48 : *maillage de la chambre de combustion.*

c-conditions aux limites

Les conditions aux limites appliquées dans ce modèle sont récapitulées dans le tableau suivant :

Carburant <i>c12h23</i>	L'oxydant
Vitesse axiale d'entrée : 80 m/s. Température : 300. Les fractions massiques Kérosène : 1	Vitesse axiale : 5 m/s. Température : 680°k. Les fractions massiques Oxygène : 0.230. Nitrogène 0.770. Vapeur d'eau : 0

Tableau 5.3 : condition aux limites

La pression de sortie est égale à 10 bar.

d-Résultat et interprétation :

Les résultats de cette simulation sont les suivants :

Contour isotherme :

Le profile de champs de température statique pour les deux cas simulé et pratique sont illustrés par la **figure 5.49** :

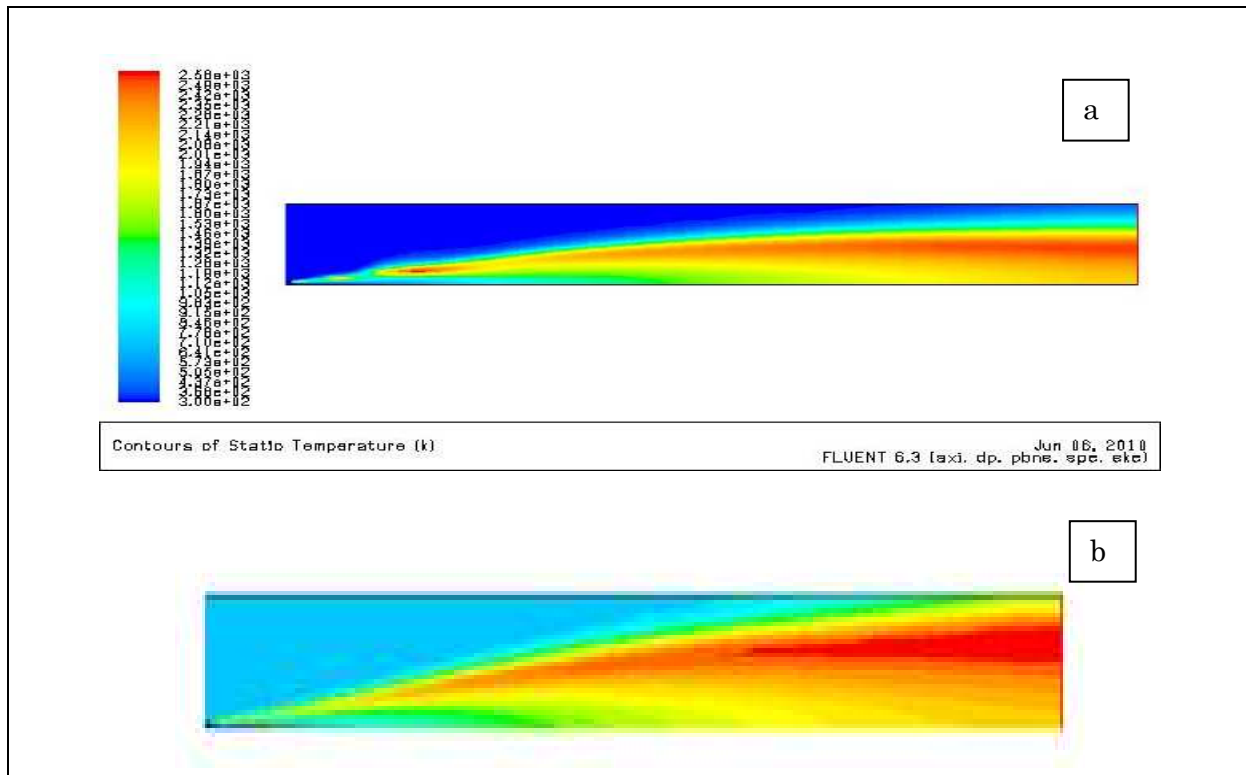


Figure 5.49 : température statique, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Nous remarquons bien que les deux profiles sont presque identique. La température maximale dans notre simulation est égale à 2580°k qui est proche de la température pratique qui est de l'ordre de 2390°k.

Le contour des isothermes dans la chambre de combustion complète, est illustré dans la **figure 5.50**

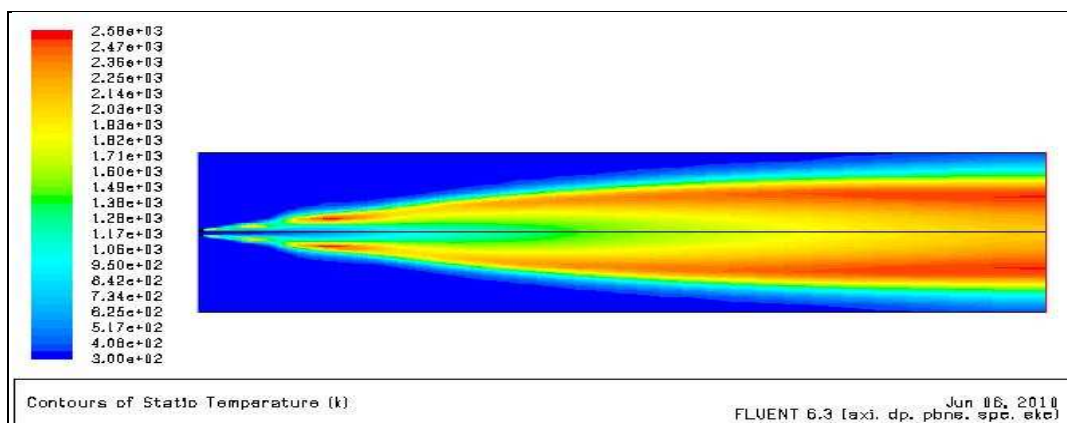


Figure 5.50 : température statique dans la chambre

Contours de la fraction massique de kérosène :

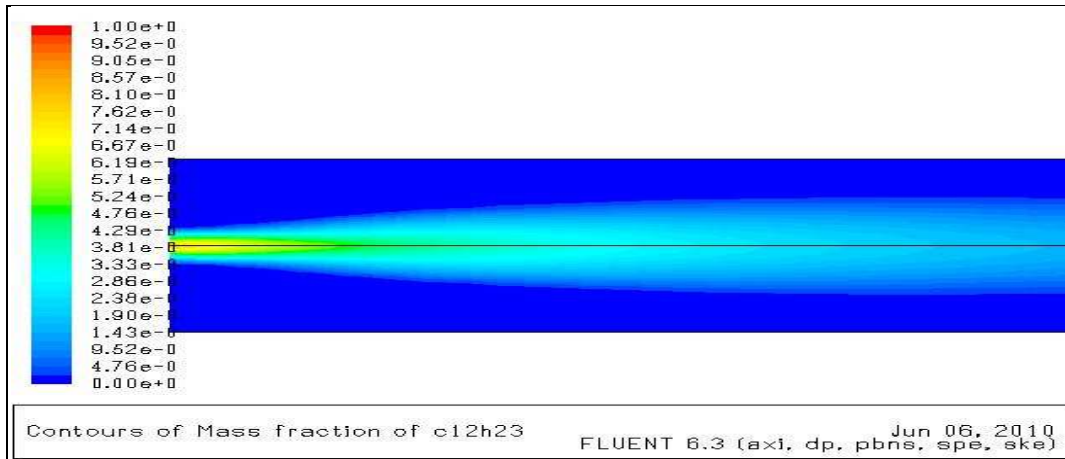


Figure 5.51 : fraction massique de kérosène.

Contours de la fraction massique de l'oxygène :

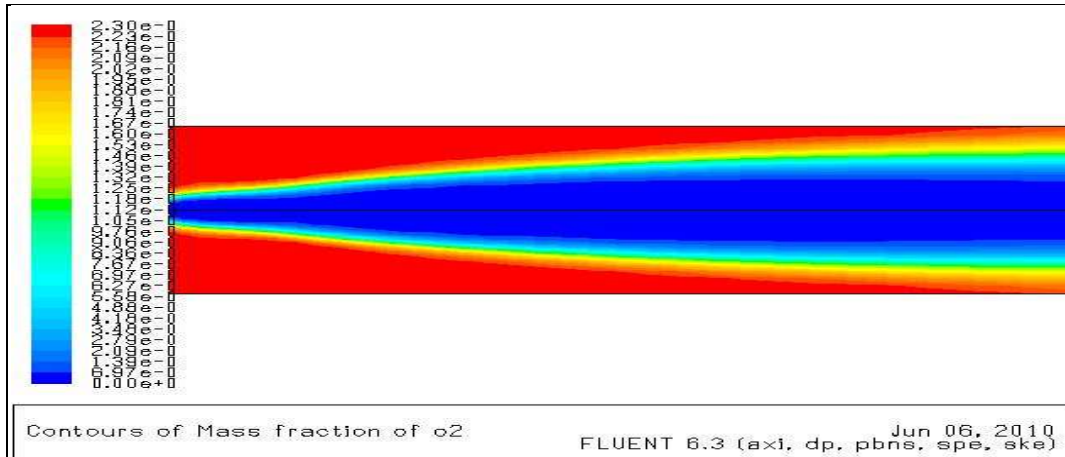


Figure 5.52 : fraction massique de l'oxygène.

Contours de la fraction massique du dioxyde de carbone :

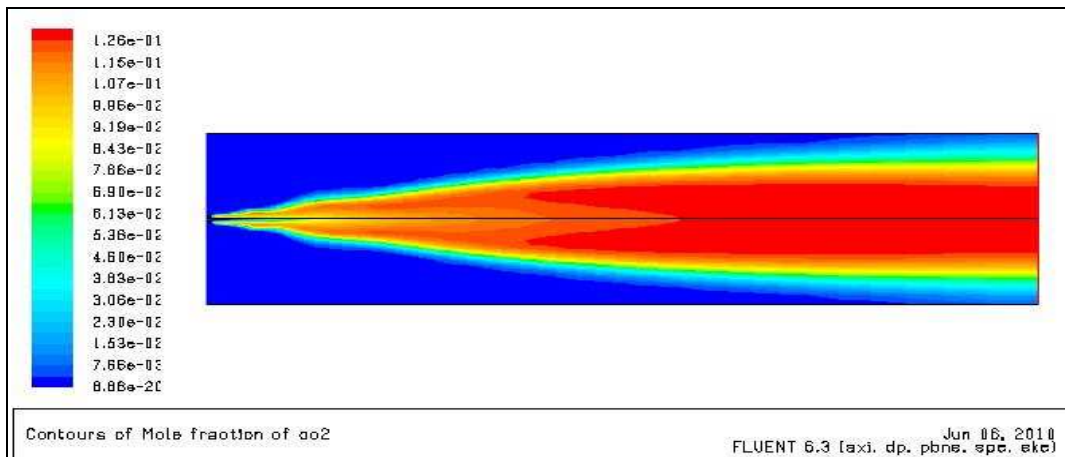


Figure 5.53 : fraction massique du dioxyde de carbone.

Contours de la fraction massique du monoxyde de nitrogène:

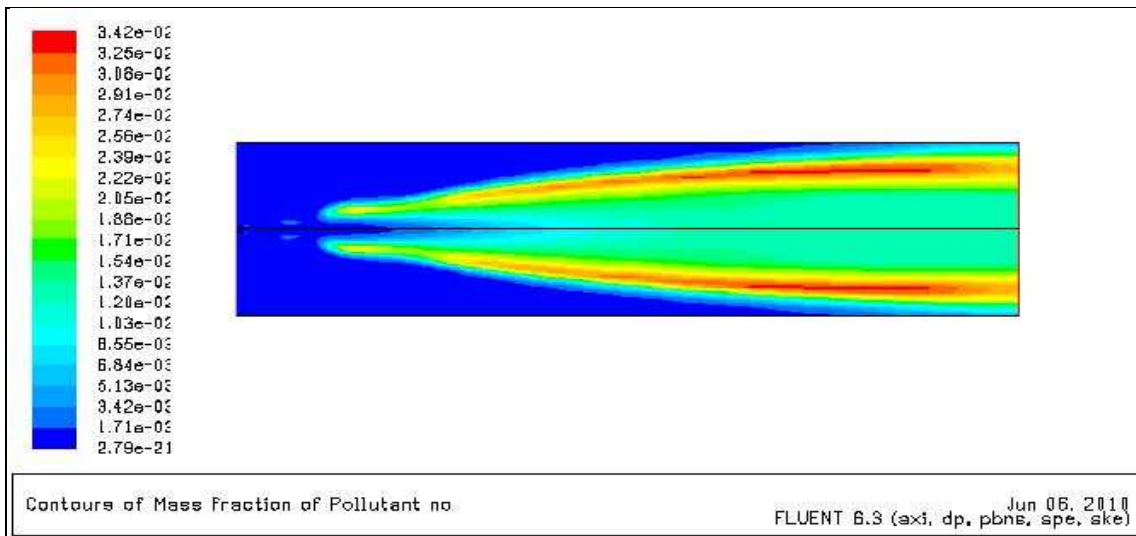


Figure 5.54 : fraction massique du monoxyde de nitrogène.

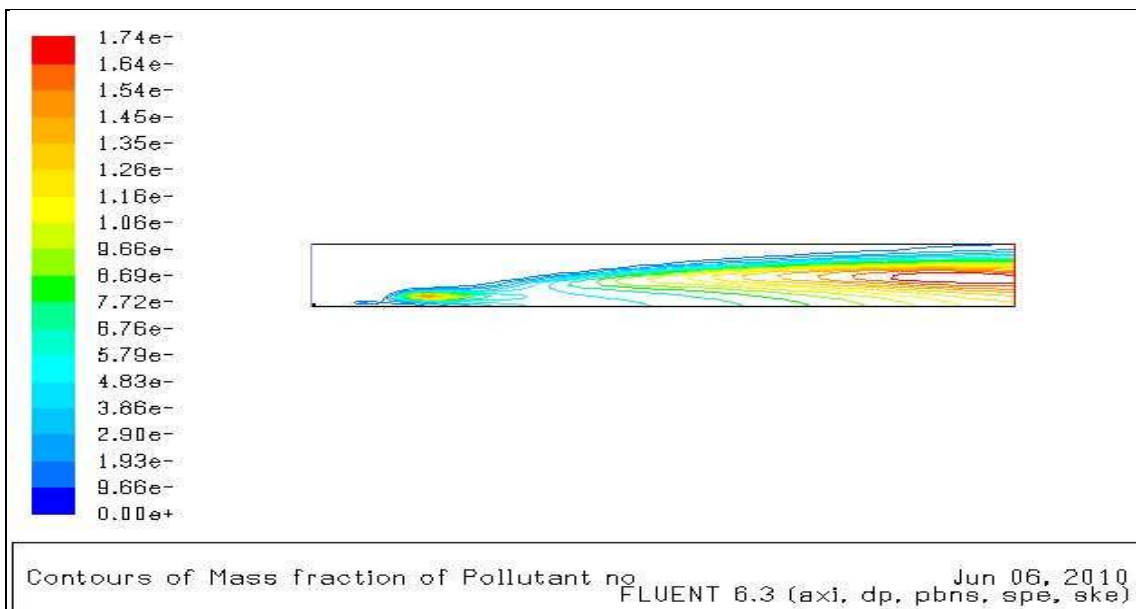


Figure 5.55 : fraction massique du monoxyde de nitrogène précoce.

Comparaison des résultats :

Nous effectuons une comparaison entre les résultats obtenu dans la référence [12], et les résultats de la simulation, elle est donnée par la figure suivante :

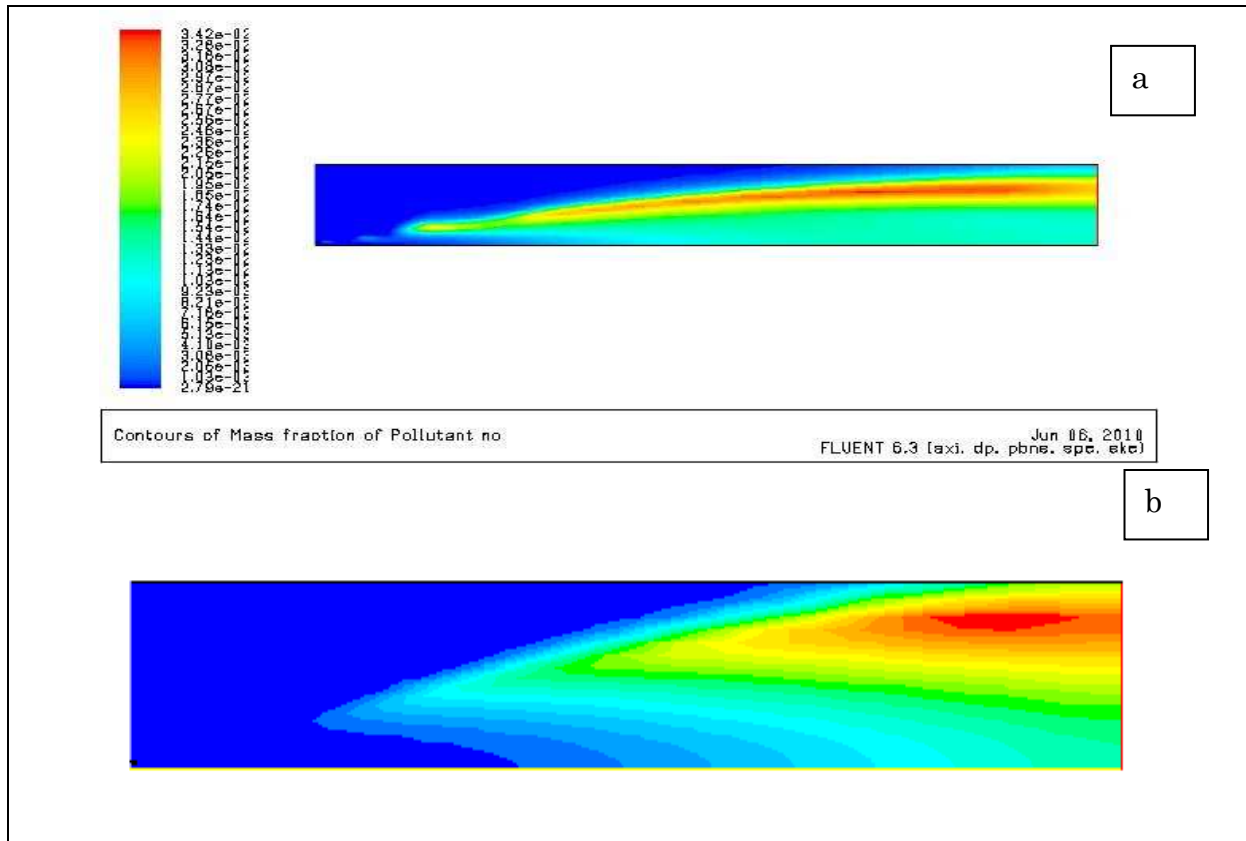


Figure 5.56 : contours du monoxyde de nitrogène, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

La concentration maximale du dioxyde d'azote est située dans une zone de température où l'oxygène et l'azote sont à forte concentration.

Effet de la température sur la production du monoxyde de nitrogène :

Température 583.99°k :

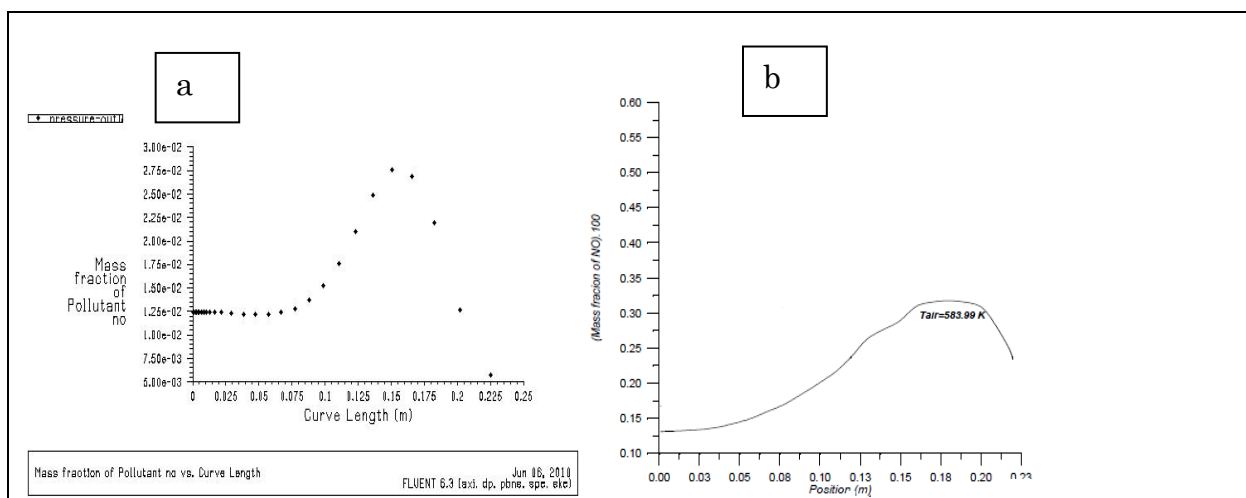


Figure 5.57 : contours du monoxyde de nitrogène, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental

Température 620.40°k :

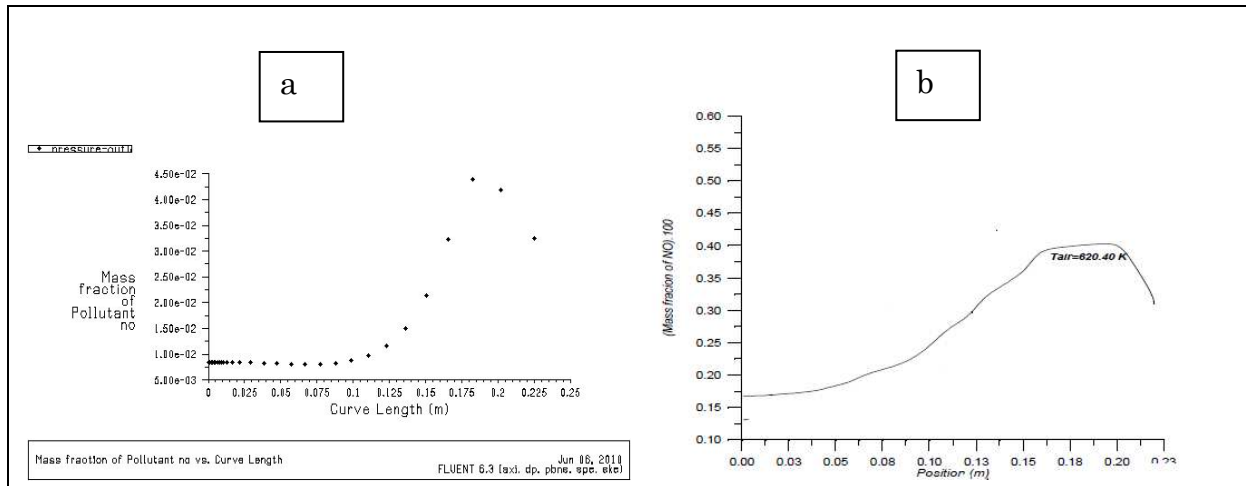


Figure 5.58 : contours du monoxyde de nitrogène, (figure a) résultat de la simulation, (figure b) résultat expérimental.

Le mécanisme de formation du monoxyde d'azote précoce est d'une grande importance dans une flamme riche, mais dans ce cas de figure il n'a pas d'effet car c'est combustion pauvre.

Nous constatons depuis les graphes que la formation des polluant est proportionnelle à la température de l'air admis dans la chambre de combustion. Le monoxyde d'azote thermique est plus important dans les flammes à richesses pauvres car la température du début de combustion est faible contrairement à une flamme riche ou la formation précoce du NO vu l'augmentation important de la température.

Conclusion

Ce travail a été consacré à la simulation numérique des flammes de prémélange et de diffusion à richesse pauvre, nous avons effectué une comparaison entre les résultats expérimentaux et les résultats obtenus par la simulation qui s'avèrent proches de la réalité, la marge d'erreur est due aux problèmes de conditions aux limites qui diffèrent.

Les cas test appliqués dans ce mémoire nous ont permis de visualiser l'évolution des paramètres de combustion tels que température, vitesse, polluants.

Nous avons pu démontrer par la simulation l'effet de la chaleur spécifique sur la précision de la solution en faisant appel au polynôme de MACK BRID, qui a donné des résultats proches de la réalité.

D'après les différents cas simulés nous avons noté l'existence d'une relation entre la richesse et le taux de production de monoxyde d'azote et le monoxyde de carbone ainsi que la vitesse et la température de la flamme.

Nous avons aussi lié la température de l'air aux taux de production des polluants NO_x et CO .

Notre volonté était aussi de simuler les instabilités acoustiques des flammes et de comprendre ce phénomène complexe, mais vu le manque de logiciel de simulation aux grandes échelles notre travail s'est limité en ce qu'il est.

Cette simulation peut être réalisée en trois dimensions en association avec les instabilités acoustiques telles sont nos perspectives d'avenir.