

Habilitation à Diriger des Recherches

présentée par

Benoît FIORINA

Partie 2: rapport scientifique

Date et lieu de la soutenance : 21 septembre 2012 à l'Ecole Centrale Paris

Tabulation de la cinétique chimique pour la modélisation de la combustion turbulente

Exemplaire provisoire

Jury :	MM.	Amsini	Sadiki	Rapporteur
		Michel	Champion	Rapporteur
		Epaminondas	Mastorakos	Rapporteur
		Luc	Vervisch	
		Denis	Veynante	
		Nasser	Darabiha	
		Heinz	Pitsch	
		Thierry	Poinsot	Correspondant

Résumé

De nombreux phénomènes physiques caractéristiques des écoulements réactifs sont pilotés par le détail de la cinétique chimique de la combustion. Il s'agit par exemple de l'allumage et de l'extinction d'une flamme, de la formation des espèces polluantes ou encore de la propagation d'un front dans un milieu réactif. Une simplification des schémas cinétiques à une ou quelques étapes est souvent insuffisante pour prédire ces phénomènes. Ce manuscrit propose des modèles pour tenir compte de la complexité de la cinétique chimique de la combustion qui s'articulent autour des méthodes de tabulation de la cinétique chimique. Peu pénalisantes en temps de calcul, elles permettent la réalisation de simulations numériques représentatives de la combustion dans des systèmes industriels où la géométrie des chambres de combustion est généralement complexe.

La première partie de ce document traite de la technique de tabulation de la cinétique chimique. Les coordonnées principalement utilisées pour capturer la structure chimique des flammes sont définies. Nous proposerons ensuite différentes stratégies de construction des tables thermochimiques en fonction des régimes de combustion étudiés. La deuxième partie de ce manuscrit se concentre sur l'implantation d'une base de chimie tabulée dans un code de simulation numérique de la dynamique des fluides. Deux formulations sont proposées en fonction des hypothèses faites sur la compressibilité de l'écoulement. Des exemples d'applications sont proposés dans des situations d'écoulements à faible nombre de Mach ou, à l'inverse, dans des situations d'écoulements compressibles. La dernière partie de ce manuscrit aborde la question de la modélisation de la combustion turbulente. Des stratégies de modélisations sont proposées et illustrées par les simulations numériques d'une grande variété de systèmes de combustion.

Table des matières

1	Introduction	9
2	Tabulation de la cinétique chimique	13
2.1	Introduction	13
2.2	Coordonnées principales	15
2.2.1	La fraction de mélange	15
2.2.2	Variables d'avancement de réaction	17
	Variable d'avancement de réaction pour capturer la zone de gradients thermiques	17
	Variable d'avancement de réaction pour des temps très rapides : exemple de l'auto-allumage	18
	Variable d'avancement de réaction pour les échelles de temps lentes : exemple de la formation des oxydes d'azote	20
2.2.3	Capture des échanges thermiques par l'enthalpie ou l'éner- gie interne	21
2.3	Génération des tables	22
2.3.1	Modélisation des flammes prémélangées et partiellement prémélangées par la méthode FPI	23
	Flame Prolongation of ILDM	23
	Domaine de validité de la méthode FPI	25
	Prise en compte des pertes thermiques	29
2.3.2	Tables thermochimiques pour la modélisation des chambres de combustion interne	35
	Méthodologie	35
	Prédiction de l'auto-allumage par une méthode de tabu- lation de la cinétique chimique	36
	Validations 0-D	38
2.3.3	Tables thermochimiques pour la combustion non prémé- langée diluée	40
	Enjeux de la combustion diluée	40

Etude d'une configuration simplifiée	43
Equation des flammelettes instationnaires non prémélangées	44
Effets de la diffusion différentielle	47
Limites de l'approche et perspectives	48
3 Couplage des méthodes de chimie tabulée avec un écoulement	51
3.1 Ecoulements à faible nombre de Mach	52
3.1.1 Formalisation	52
3.1.2 Exemples	54
Flammes laminaires	54
Flammes turbulentes	56
3.2 Ecoulements compressibles	57
3.2.1 Problématique	57
3.2.2 Formulation TTC pour une table non-adiabatique qui tient compte des variations de pression	60
3.2.3 Formulation TTC pour une table non-adiabatique isobare	61
3.2.4 Formulation TTC pour une table adiabatique isobare	62
LES d'un jet 3-D non réactif	64
Flamme 1-D prémélangée	66
3.2.5 Traitement des conditions aux limites	67
3.3 Conclusion	68
4 Chimie tabulée et turbulence	69
4.1 Définition des outils	70
4.1.1 Variables thermochimiques moyennées et filtrées	70
4.1.2 Fonction de densité de probabilité (PDF) et fonction de densité de filtre (FDF)	71
4.1.3 Formes présumées des PDF/FDF	73
4.2 Modèles RANS	76
4.2.1 Equations des valeurs moyennes des coordonnées de la table chimique	76
Formulation générale	76
Application aux coordonnées les plus couramment utilisées	78
4.2.2 Exemples de modélisation RANS de la chimie tabulée	81
Formalisation turbulente de la méthode FPI adiabatique (combustion partiellement prémélangée)	81
Formalisation turbulente de la méthode FPI non adiabatique (combustion partiellement prémélangée avec prise en compte des pertes thermiques)	82
Formalisation turbulente de la méthode UTAC (Unsteady flamelet Tabulated Chemistry) pour la combustion non prémélangée en régime instationnaire	83

4.2.3	Exemples de fermeture des PDF	83
	Fonctions de densité de probabilité $\tilde{P}(z^*)$ et $\bar{P}(c)$: . . .	83
	Fonction de densité de probabilité $\bar{P}(\chi_{st}^*)$:	85
	Fonction de densité de probabilité $\bar{P}(h_n^*)$:	85
4.2.4	Implantation dans un code de CFD	86
	Pré-calcul des PDF	86
	Schéma du modèle	86
4.2.5	Exemples d'applications	88
	Flamme D (SANDIA national lab)	88
	Simulation d'une flamme stratifiée non-adiabatique . . .	89
	Flamme jet dans un écoulement d'air vicié	92
4.2.6	Réduction de la taille des bases thermochimiques en exploitant les propriétés auto-similaires des flammes turbulentes	96
4.3	Modèles LES	101
4.3.1	Modélisation de la propagation d'une flamme prémélangée	101
	Description du contexte	101
	Stratégies possibles	104
	F-TACLES (Filtered TABulated Chemistry for LES) . .	108
4.3.2	Modélisation de la propagation d'une flamme dans un milieu stratifié en richesse	112
	Effet de la stratification sur la propagation d'un front .	112
	Formalisation du modèle F-TACLES pour la combustion stratifiée	113
4.3.3	Exemples d'applications du modèle F-TACLES	114
	Combustion turbulente prémélangée	114
	Combustion turbulente partiellement prémélangée . . .	117
5	Conclusions et perspectives	121
5.1	Conclusions	121
5.2	Les enjeux de la modélisation	123
	Au delà du régime de flammelette	123
	Au delà des espaces chimiques actuellement couverts . .	124
	Au delà des gaz parfaits	125
5.3	Stratégies possibles	126
5.3.1	Poursuite de la tabulation de la cinétique chimique . .	126
	Tabulation de l'effet de la dilution pour la modélisation de la combustion sans flamme	126
	Tabulation de la structure chimique des flammes complexes	127
	Combustion des gaz à faible PCI	128
	Oxy-combustion	129
5.3.2	Fin de la tabulation de la cinétique chimique	130

Références

130

Chapitre 1

Introduction

La combustion intervient dans 90% environ de la consommation de l'énergie primaire mondiale. Malgré un impact environnemental grandissant lié à la combustion d'hydrocarbures de plus en plus lourds, cette part ne devrait pas baisser dans les vingt prochaines années pour deux raisons principales. La première est liée aux propriétés physico-chimiques des hydrocarbures liquides qui sont extrêmement bien adaptées aux transports. Aucun autre vecteur de l'énergie ne présente des densités énergétiques volumiques et massiques aussi favorables. C'est le seul moyen actuel pour les véhicules terrestres et aériens d'embarquer suffisamment d'énergie pour être autonomes sur des longues distances. La seconde raison est liée à la production d'énergie électrique. Même si la part des énergies renouvelables croît, elle n'assurera pas à moyen terme, la totalité de la production électrique mondiale. Face à la diminution des réserves conventionnelles d'hydrocarbures, les ressources mondiales de charbon restent importantes. Dans la mesure où les états diminueraient voir supprimeraient la part du nucléaire dans la production d'électricité, celle de la combustion devrait rester importante sinon augmenter dans les années à venir.

En plus d'être un mode de transformation de l'énergie générateur de CO_2 , la combustion génère également des espèces chimiques polluantes qui ont un effet néfaste sur la santé et l'environnement : nous pouvons mentionner par exemple le monoxyde de carbone (CO), les oxydes d'azote (NO_x), les hydrocarbures imbrûlés (HC), les suies, etc Que ce soit pour les transports aériens, routiers et navals ou pour le secteur de l'énergie, le développement d'une chambre de combustion doit intégrer ces contraintes environnementales. Comme les coûts de développements et d'expérimentation de prototypes sont très importants, la simulation numérique est un outil d'aide à la conception très répandu dans l'ingénierie des systèmes de combustion. Naturellement, le degré de précision du modèle physique développé pour simuler un écoulement réactif turbulent

dépend des informations recherchées. En effet, la combustion d'un hydrocarbure fait intervenir des centaines d'espèces chimiques qui vont réagir au travers de milliers de réactions élémentaires. Cependant, la prédiction approximative de la longueur d'une flamme dans un four verrier ne nécessite pas une prise en compte détaillée de la cinétique chimique de la combustion. De la même manière une chimie simplifiée à une étape permet de prédire suffisamment précisément la vitesse de propagation d'une flamme turbulente dans une chambre de combustion aéronautique (Roux *et al.* 2005). Mais cette extrême simplification de la cinétique chimique n'est plus satisfaisante lorsque des phénomènes plus sensibles aux mécanismes chimiques sont étudiés comme par exemple la formation des oxydes d'azotes dans un four ou l'allumage d'un moteur. La réponse à la plupart de ces questions ne peut être obtenue qu'en considérant la complexité de la cinétique chimique de la combustion. Par exemple, l'ensemble des espèces chimiques et des réactions élémentaires influence la propagation d'une flamme dans un foyer aéronautique où combustible et comburant ne sont que partiellement mélangés. Dans une chambre de combustion interne, le délai d'auto-allumage d'un mélange de gasoil et d'air dilué par des gaz en provenance d'une boucle EGR (Exhasut Gaz Recirculation) est extrêmement sensible aux infimes concentrations d'espèces radicalaires produites lors des phases d'initiation de la combustion. Les défis sont d'autant plus grands que les polluants sont produits en quantités beaucoup plus faibles que les espèces majoritaires. Les simulations doivent donc être très précises.

De nombreux mécanismes chimiques détaillés ont été développés aux cours des dernières années. Il s'agit de modèles dont le degré de complexité varie en fonction du nombre d'espèces et de réactions élémentaires considérées. Les schémas cinétiques prédisent très bien la vitesse des flammes issues de la combustion des hydrocarbures légers tels le méthane (Smith *et al.* 1999) ou encore, depuis peu, des chaînes carbonées plus lourdes comme le n-décane (Luche 2003), principal constituant du kérosène. Même si la prédiction de certaines espèces polluantes, dont les suies, n'est pas encore pleinement aboutie, la précision des schémas cinétiques actuels est suffisante pour que leur intégration dans des simulations numériques d'écoulements soit profitable.

L'introduction de la cinétique chimique détaillée dans des simulations numériques de chambres de combustion pose cependant un problème de coût informatique (ou temps CPU). En effet les centaines d'espèces qui interviennent lors de la combustion d'un hydrocarbure nécessitent chacune la résolution d'une équation de transport. Ce problème s'accroît dans le cas d'écoulements turbulents qui ne peuvent pas être résolus par simulation numérique directe (DNS, Direct Numerical Simulation). En effet, une simulation RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes) ou LES (Large Eddy Simulation) nécessite l'établissement de lois de fermeture pour chaque taux de production chimique.

C'est dans ce contexte que les méthodes de tabulation de la cinétique chimique ont été développées. L'objectif est d'inclure des effets chimiques complexes dans des simulations numériques d'écoulements réactifs. Les premiers développements de la chimie tabulée sont entièrement empiriques. Dans le modèle de flammelettes, Peters (1984) assimile une flamme non prémélangée turbulente à un ensemble de flammes de diffusion mono-dimensionnelles. Une série de flammelettes est alors calculée sous des hypothèses de chimie détaillée puis stockée dans une base de données. Celle-ci contient les grandeurs thermodynamiques et chimiques nécessaires pour réaliser des simulations RANS de flammes turbulentes (Peters 1984). Une approche similaire, où les flammelettes de diffusion sont remplacées par des flammes prémélangées mono-dimensionnelles a été suivie par Bradley *et al.* (1988). Les interactions entre la flamme et l'écoulement turbulent sont modélisées par des fonctions de densité de probabilité présumées, très peu coûteuses en terme de ressources CPU. Les premières démonstrations mathématiques qui justifient la tabulation de la cinétique chimique en fonction d'un nombre réduit d'espèces sont proposées par Maas et Pope (1992) au travers de la méthode ILDM (Intrinsic Low Dimensional Manifold). Cette approche consiste à limiter le nombre de degrés de liberté du système réactif en ne conservant que ses évolutions les plus lentes dans la base des vecteurs propres. Dans les zones à température élevée, l'espace chimique est effectivement réduit efficacement. Malheureusement, ce n'est pas le cas des zones à basse température, où la diffusion moléculaire des espèces est importante. Ainsi l'application de l'approche ILDM pour simuler des configurations industrielles est délicate. Ce constat a encouragé Gicquel *et al.* (2000) et van Oijen *et al.* (2001) à identifier directement les sous espaces chimiques par des configurations élémentaires d'écoulement réactif, rejoignant ainsi les stratégies de modélisation proposée empiriquement par Peters (1984) puis Bradley *et al.* (1988). Cette approche a été utilisée avec succès pour simuler des configurations 1-D de flammes à contre-courant (Gicquel *et al.* 2000). Des défis demeurent cependant pour permettre la simulation de la combustion turbulente dans des géométries complexes. Les principales difficultés résident dans la construction de la base de données thermo-chimique puis dans son exploitation pour modéliser les interactions entre la chimie et la turbulence. Enfin son implantation dans un code de calcul de la mécanique des fluides doit être réalisée avec soin pour ne pas introduire d'erreurs numériques.

Mes travaux de recherche sont majoritairement inscrits dans ce contexte et sont résumés dans ce manuscrit. Celui-ci est rédigé en trois parties. La première traite de la technique de tabulation de la cinétique chimique. Les coordonnées principalement utilisées pour capturer la structure chimique des flammes sont définies. Nous proposerons ensuite différentes stratégies de construction des tables thermo-chimiques en fonction des régimes de combustion étudiés. La deuxième partie de ce manuscrit se concentre sur l'implantation d'une base

de chimie tabulée dans un code de simulation numérique de la dynamique des fluides. Deux formulations sont proposées en fonction des hypothèses faites sur la compressibilité de l'écoulement. Des exemples d'applications sont proposés dans des situations d'écoulements à faible nombre de Mach ou, à l'inverse, dans des situations d'écoulements compressibles. La dernière partie de ce manuscrit aborde la question de la modélisation de la combustion turbulente. Des stratégies de modélisations sont proposées et illustrées par des calculs dans des contextes RANS et LES.

Chapitre 2

Tabulation de la cinétique chimique

2.1 Introduction

Un écoulement réactif est caractérisé par sa dynamique, c'est-à-dire sa vitesse, et par son état thermodynamique et chimique. Notons φ une variable thermo-chimique caractérisée par cet état. φ , qui est par exemple, la température, la fraction massique d'une espèce chimique ou son taux de réaction, est identifié à partir de deux variables d'état et de la composition du système (Maas et Pope 1992). Si le couple de variables d'état (P, T) est retenu, où P est la pression et T la température, alors il existe une fonction d'état \mathcal{F} telle que :

$$\varphi = \mathcal{F}(P, T, Y_1, Y_2, \dots, Y_{n_{sp}}) \quad (2.1)$$

où Y_k est la fraction massique de l'espèce chimique k et n_{sp} est le nombre total d'espèces chimiques.

Introduisons les contributions sensible et chimique de l'enthalpie h et de l'énergie interne e définies par :

$$h = h^0 + \int_{T^0}^T C_p dT \quad (2.2)$$

$$e = e^0 + \int_{T^0}^T C_v dT \quad (2.3)$$

où C_p et C_v sont les capacités calorifiques massiques moyennes du mélange à pression et à volume constants, respectivement. L'exposant 0 indique l'état de référence. Sous une hypothèse de gaz parfait, la masse volumique du mélange ρ est reliée à la pression, à la température et à la composition du mélange par

la relation :

$$\rho = \frac{P}{rT} \quad (2.4)$$

où $r = R/M$ avec R la constante des gaz parfaits et M la masse molaire moyenne du mélange. L'utilisation des équations 2.2, 2.3 et 2.4 permet de substituer, par exemple, les couples (P, h) ou (ρ, e) au couple de variable d'état (P, T) . Il existe dans ce cas des fonctions \mathcal{G} et \mathcal{H} telles que :

$$\varphi = \mathcal{G}(P, h, Y_1, Y_2, \dots, Y_{n_{sp}}) \quad (2.5)$$

$$\varphi = \mathcal{H}(\rho, e, Y_1, Y_2, \dots, Y_{n_{sp}}) \quad (2.6)$$

La détermination de la composition du mélange dans un écoulement nécessite la résolution d'une équation de transport pour chaque espèce chimique présente dans le schéma cinétique. Comme l'identification de l'état thermo-chimique d'un mélange entre un oxydant et un hydrocarbure est rapidement très complexe¹, il est intéressant de réduire son nombre de degrés de libertés. Sous certaines hypothèses que nous détaillerons ultérieurement, les espèces chimique peuvent être remplacées par un vecteur réduit de coordonnées $(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n)$ où $n + 2$ est alors le nombre de dimensions de la base de données thermo-chimique. Dans cette nouvelle base, les grandeurs thermo-chimiques φ s'expriment par exemple :

$$\varphi = \mathcal{F}'(P, T, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (2.7)$$

$$\varphi = \mathcal{G}'(P, h, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (2.8)$$

$$\varphi = \mathcal{H}'(\rho, e, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (2.9)$$

Comme les taux de réaction chimiques sont fortement non-linéaires, il n'est en pratique pas possible de déterminer analytiquement les fonctions \mathcal{F}' , \mathcal{G}' , \mathcal{H}' , etc ... Celles-ci sont généralement définies de façon discrètes dans des bases de données, d'où l'utilisation de la terminologie *chimie tabulée*.

Ce chapitre explique comment construire en pratique une base de chimie tabulée. Les coordonnées les plus couramment utilisées sont définies dans un premier temps. Plusieurs techniques de construction des bases de chimie tabulée, chacune adaptée à une situation particulière, sont ensuite détaillées. La liste des méthodologies abordées dans ce manuscrit n'est pas exhaustive car l'auteur a fait le choix de ne mentionner que celles qu'il a contribué à développer. Par exemple le modèle de flammelles de diffusion stationnaires développé par Peters (1984) ne sera pas détaillé malgré son utilisation importante par la communauté académique et industrielle. Pour faciliter la lecture de la suite du manuscrit, les différentes fonctions \mathcal{F} , \mathcal{G} ou \mathcal{H} ne se distinguent plus par leurs notations. Leur différence s'exprimera tacitement en fonction du choix des arguments. Nous

1. Plus de 50 espèces chimiques sont impliquées dans le schéma GRI 3.0 (Smith *et al.* 1999) qui décrit la combustion du méthane avec de l'air

écrivons par exemple :

$$\varphi = \mathcal{F}(P, T, Y_1, Y_2, \dots, Y_{n_{sp}}) = \varphi(P, T, Y_1, Y_2, \dots, Y_{n_{sp}}) \quad (2.10)$$

ou encore

$$\varphi = \mathcal{G}(P, h, Y_1, Y_2, \dots, Y_{n_{sp}}) = \varphi(P, h, Y_1, Y_2, \dots, Y_{n_{sp}}) \quad (2.11)$$

2.2 Coordonnées principalement utilisées

Les coordonnées des bases de chimie tabulée sont choisies pour reproduire la structure chimique des flammes étudiées. Elles doivent rendre compte par exemple des zones de réaction, du mélange entre le combustible et le comburant ou encore des pertes thermiques. Ces variables, qui constituent les coordonnées de la table thermochimique, devront être identifiées en chaque point de l'écoulement réactif simulé. Cette détermination se fait généralement par la résolution numérique d'équations de transport. Des variables qui décrivent le mélange, la zone de réaction et les pertes thermiques sont introduites ci-dessous.

2.2.1 La fraction de mélange

La fraction de mélange z est un scalaire passif qui permet de quantifier le mélange entre le combustible et le comburant. Sa définition dépend de la complexité du problème étudié (Poinsot et Veynante 2005), principalement en fonction des hypothèses de modélisation de la diffusion des espèces chimiques et de la représentation de la cinétique chimique complexe.

Les définitions les plus simples de la fraction de mélange sont dérivées d'une chimie à une étape de type : $F + SO \rightarrow P$ où F , O et P symbolisent respectivement le combustible, l'oxydant et les produits de la combustion. S est le coefficient stoechiométrique molaire de la réaction. Supposons que les coefficients de diffusion moléculaire des espèces chimiques sont les mêmes. Dans ce cas, à partir de l'équation globale une définition possible de la fraction de mélange z est par exemple :

$$z = \frac{sY_F^o - Y_O + Y_O^o}{sY_F^f + Y_O^o} \quad (2.12)$$

où les exposants o et f réfèrent aux propriétés du fluide côté comburant et combustible, respectivement. $s = SM_O/M_F$ est le coefficient stoechiométrique massique. Ainsi définie, la fraction de mélange z prend respectivement les valeurs de 0 et 1 dans l'oxydant et dans le combustible.

La définition 2.12 n'est plus valable si des modèles de cinétique chimique plus complexes sont considérés. En effet, à cause de l'existence d'espèces intermédiaires comme les radicaux, la définition 2.12 n'assure plus que z soit un scalaire passif. Ainsi, pour les méthodes de chimie tabulée, il est préférable d'utiliser des définitions de la fraction de mélange basées sur les fractions massiques des éléments Y_e , qui sont adaptées à la cinétique chimique complexe (Masri *et al.* 1988). Pour chaque élément de symbole e , une fraction de mélange z_e est définie en normalisant Y_e entre sa valeur côté combustible (Y_{ef}) comburant (Y_{eo}) :

$$z_e = \frac{Y_e - Y_e^o}{Y_e^f - Y_e^o} \quad (2.13)$$

Avec un nombre de Lewis unitaire ($L_e = \lambda/(\rho C_p D) = 1$), toutes les définitions de la fraction de mélange sont équivalentes quel que soit l'élément e considéré. $z = z_e$ est alors un scalaire passif solution de l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i z}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_z \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \quad (2.14)$$

où la diffusion moléculaire de la fraction de mélange est modélisée par la loi de Fick. $D_z = \lambda/\rho C_p$ est le coefficient de diffusion moléculaire de la fraction de mélange.

Quand la diffusion différentielle des espèces est considérée ($Le_k \neq 1$), la fraction de mélange définie par l'Eq. 2.13 n'est plus représentative de la proportion entre le combustible et le comburant. Dans ce cas, pour faciliter l'analyse des résultats, il peut être utile d'employer une définition de la fraction de mélange qui combine les fractions massiques des éléments. Ainsi pour la combustion d'un hydrocarbure, Bilger *et al.* (1990) ont proposé la définition suivante :

$$z_{Bilger} = \frac{Z - Z_{ox}}{Z_f - Z_{ox}} \quad \text{avec} \quad Z = 2 \frac{Y_C}{W_C} + \frac{Y_H}{2W_H} - \frac{Y_O}{W_O} \quad (2.15)$$

où Y_C , Y_H et Y_O sont respectivement les fractions massiques des éléments carbone, hydrogène et oxygène.

Cette définition est cependant difficilement applicable, car l'équation de transport de la fraction massique élémentaire fait apparaître un terme qui n'est pas fermé. Une alternative, utilisée dans le modèle de flammelettes de diffusion proposé par Pitsch et Peters (1998) est de définir directement z comme solution de l'équation 2.14 dès la construction de la base de chimie tabulée.

2.2.2 Variables d'avancement de réaction

Variable d'avancement de réaction pour capturer la zone de gradients thermiques

La variable d'avancement de réaction Y_c est introduite pour capturer la transition entre les gaz frais et les gaz brûlés. Elle est définie en général par une combinaison d'espèces chimiques ou bien par la température de sorte qu'elle évolue de façon continue et monotone entre un état initial ($Y_c = Y_c^f$) et un état final ($Y_c = Y_c^b$). Si cette condition est respectée, alors $\varphi(Y_c)$ est une application de Y_c et donc les variables thermochimiques sont tabulables en fonction de Y_c .

L'importance de la combinaison d'espèces retenue pour tabuler les variables thermochimiques est illustrée sur la figure 2.1(a) où des flammes prémélangées adiabatiques à propagation libre sont projetées dans l'espace (Y_{CO_2}, T) pour différentes valeurs de richesse ϕ du mélange de gaz frais. Il est observé que de $\phi = 0.4$ à $\phi = 1.2$, la température exprimée en fonction de la fraction massique de CO_2 est bien une application. Une seule et unique valeur de température existe pour une valeur donnée de Y_c . Par contre, ce comportement n'est plus vérifié dans les régions riches où des points de rebroussement apparaissent. Ce phénomène s'explique par la cinétique de combustion du méthane : à des niveaux de température élevés et pour un mélange riche en combustible, le CO_2 se décompose en CO . La température décroît quand l'avancement de réaction augmente. En effet, lors des dernières étapes cinétiques où les espèces se dirigent vers leur état d'équilibre, les réactions endothermiques sont plus importantes que les réactions exothermiques. Le taux de dégagement de chaleur devient alors négatif et la température décroît. Pour éviter que la fonction $\phi(Y_c)$ ne présente un point de rebroussement, une combinaison linéaire des fractions massiques de CO_2 et de CO est généralement choisie pour définir la variable d'avancement des réactions d'hydrocarbures (Fiorina *et al.* 2003) :

$$Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO} \quad (2.16)$$

Dans ce cas, comme le montre la figure 2.1(b), l'évolution de la température est bien tabulable en fonction de Y_c .

La variable Y_c peut également s'exprimer sous la forme d'une variable normalisée c , qui prend respectivement les valeurs de 0 et 1 dans les gaz frais et brûlés (Moss et Bray 1977). La variable c est définie par :

$$c = \frac{Y_c - Y_c^{eq}}{Y_c^{fr} - Y_c^{eq}} \quad (2.17)$$

où Y_c^{eq} et Y_c^{fr} représentent Y_c dans les gaz frais et brûlés, respectivement. En pratique, Y_c^{eq} correspond à la valeur prise par la variable d'avancement de ré-

action à l'équilibre thermodynamique. Elle dépend fortement de la composition initiale du mélange et donc de la fraction de mélange z . Ainsi, la définition 2.17 a l'inconvénient de coupler indirectement c et z ce qui complique l'équation de transport de c car des termes de dérivées croisées apparaissent. Il est généralement préférable de résoudre une équation de transport pour Y_c puis au besoin d'estimer c via la définition 2.17.

Le choix des espèces chimiques qui interviennent dans la définition de Y_c va déterminer les échelles de temps et d'espace considérées. La définition 2.16 est adaptée à la description de la position de la flamme dans des situations prémélangées (Gicquel *et al.* 2000), partiellement-prémélangées (Fiorina *et al.* 2003) ou non prémélangées (Fiorina *et al.* 2005a). Mais toutes les évolutions chimiques des système réactifs ne peuvent pas être déduites. Si les temps des phénomènes physiques étudiés sont petits ou grands devant les temps caractéristiques de la formation du monoxyde et du dioxyde de carbone, alors l'équation 2.16 n'est plus suffisante. C'est le cas de l'auto-allumage et de la formation des oxydes d'azote qui sont présentés ci-dessous.

Variable d'avancement de réaction pour des temps très rapides : exemple de l'auto-allumage

Dans de nombreuses configurations industrielles, comme les moteurs à combustion interne de type Diesel, les chambres de combustion de superstatoréacteur ou encore certains fours industriels, des phénomènes d'auto-allumage initient la combustion. Les phases d'initiation de l'auto-allumage font intervenir des réactions de craquage du combustible qui se décompose alors en chaînes hydrocarbonées plus légères. Comme les produits principaux de la combustion dont CO et CO₂ ne sont pas créés lors de cette phase, la définition 2.16 ne permet pas de suivre l'amorçage de l'auto-allumage. Pour remédier à ce problème, la fraction massique du combustible est généralement ajoutée dans la définition de Y_c (Embouazza 2005; Galpin *et al.* 2008; Vicquelin 2010; Tudorache *et al.* 2011) :

$$Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO} - Y_{fuel} + Y_{fuel}^0 \quad (2.18)$$

où Y_{fuel} est la fraction massique du combustible et l'exposant ⁰ signifie que l'état est celui des gaz frais. Cette définition permet de capturer précisément le délai d'auto-allumage d'un mélange réactif à condition que la discrétisation de la table chimique soit optimisée (cf. section 2.3.2)

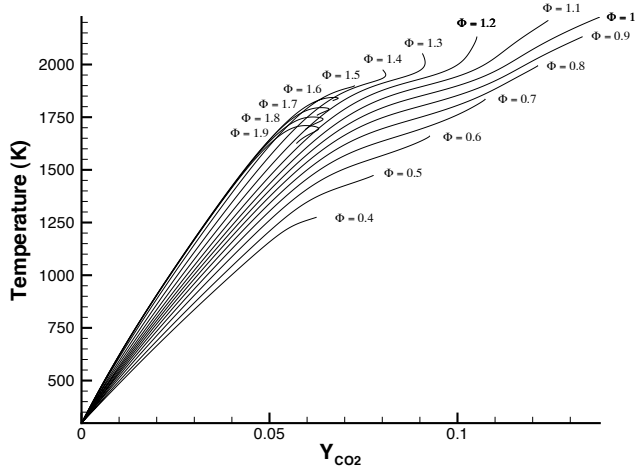
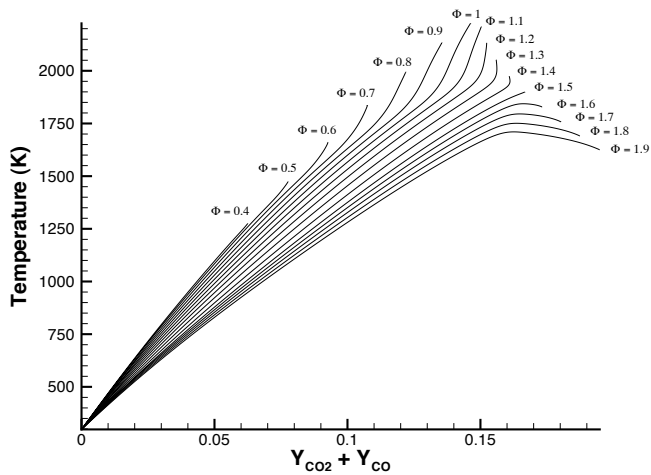
(a) $Y_c = Y_{CO_2}$ (b) $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO}$

FIGURE 2.1 – Projections de flammes prémélangées adiabatiques dans le plan (Y_c, T) pour deux définitions de la variable Y_c . Les trajectoires qui correspondent à plusieurs valeurs de richesse ϕ d'un mélange méthane/air sont tracées (Fiorina et al. 2003).

Variable d'avancement de réaction pour les échelles de temps lentes : exemple de la formation des oxydes d'azote

Comme le temps de formation du monoxyde d'azote par voie thermique est beaucoup plus long que celui du dioxyde de carbone, la définition 2.16 n'est pas adaptée à la prédiction des oxydes d'azote. Ce problème est illustré sur la figure 2.2 où sont projetées, dans l'espace (Y_{NO}, Y_c) les trajectoires suivies par des flammes 1-D prémélangées résolues pour différentes richesses. Si la variable Y_c est définie par l'Eq. 2.16, alors d'importantes variations de NO ne sont pas capturées par la variable d'avancement Y_c . Ceci se traduit visuellement par le fait que les trajectoires des flammes sont perpendiculaires à la direction Y_c . Pour remédier à ce problème, une première possibilité est d'introduire directement NO dans la définition de Y_c (van Oijen et de Goey 2009) :

$$Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2} + \alpha Y_{NO} \quad (2.19)$$

où α agit comme un coefficient de "dilatation" des profils. Cette définition permet d'élargir l'espace temporel couvert par Y_c en y ajoutant une contribution liée à une espèce chimique à formation lente. Une approche semblable a été développée par Godel *et al.* (2009) en définissant la variable d'avancement au moyen d'une combinaison d'espèces carbonées et de NOx :

$$Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O} + Y_{NO} + Y_{NO_2} + Y_{N_2O} + \Delta Y_{N_2} \quad (2.20)$$

L'ajout de $Y_{NO} + Y_{NO_2} + Y_{N_2O}$ permet d'assurer le suivi de la formation et de la destruction de NO_x en assurant une correspondance bijective avec Y_c . Le terme $\Delta Y_{N_2} = Y_{N_2} - Y_{N_2}^0$, permet d'assurer la croissance de Y_c malgré la consommation de NO en N_2 qui arrive dans certains gaz brûlés issus de combustions riches. Cette nouvelle définition de la variable d'avancement de réaction permet de capturer la formation des oxydes d'azote comme le montre la figure 2.2.

Une autre approche est de combiner deux variables comme l'ont proposé Ihme et Pitsch (2008). La première, définie par une relation du type Eq. 2.16 permet de capturer la zone de réaction principale. La seconde variable Y_c^* est définie pour être bijective dans l'espace temporel relatifs aux temps chimiques longs. Pour cela elle peut s'exprimer simplement en fonction de la fraction massique de NO (Ihme et Pitsch 2008) :

$$Y_c^* = Y_{NO} \quad (2.21)$$

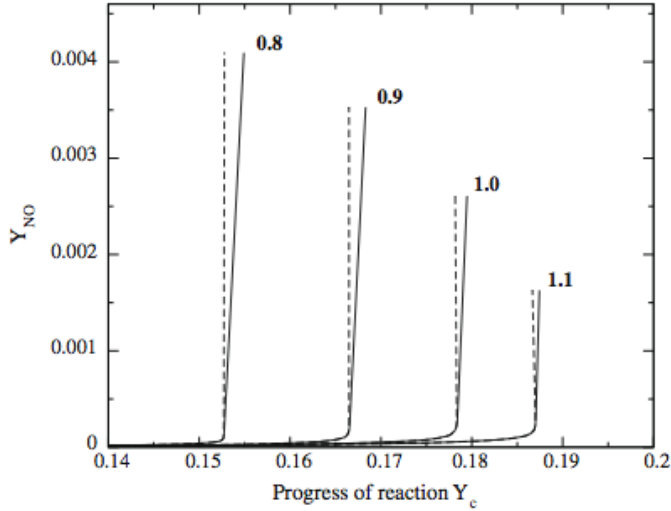


FIGURE 2.2 – *Projection dans l'espace (Y_{NO}, Y_c) des trajectoires suivies par des flammes 1-D prémélangées de richesses différentes. Pointillés : Y_c est défini par $Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2}$. Traits pleins : Y_c est défini par $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O} + Y_{NO} + Y_{NO_2} + Y_{N_2O} + \Delta Y_{N_2}$. Courbe extraite de Godel et al. (2009)*

2.2.3 Capture des échanges thermiques par l'enthalpie ou l'énergie interne

La prise en compte des pertes thermiques dans les méthodes de chimie tabulée nécessite l'ajout d'une dimension. Il s'agit en général de l'enthalpie h ou de l'énergie interne e définies respectivement par les équations 2.2 et 2.3 dans leurs formulations sensibles et chimiques. L'intérêt d'inclure les composantes chimiques et sensibles dans les définitions de h et e est que ces dernières se conservent lors de la combustion lorsque la composition atomique est constante.² L'enthalpie est généralement retenue pour simuler des flammes à pression constante alors que l'énergie est préférée dans des chambres de combustion à pression variable comme les moteurs à combustion interne (Tudorache *et al.* 2011).

L'utilisation de la variable h est très efficace car elle permet à elle seule de capturer toutes les natures de pertes thermiques, qu'elles soient radiatives, convectives ou conductives. En effet la trajectoire suivie pour atteindre un certain degré de pertes thermiques n'a pas d'importance sur la structure chimique de

². Pour une composition élémentaire fixée, l'enthalpie se conserve dans les systèmes ouverts et fermés adiabatiques isobares. L'énergie se conserve dans un système adiabatique fermé isochoire.

la flamme. Fiorina *et al.* (2003) ont ainsi montré que les structures chimiques de flammes "refroidies" par rayonnement ou par conduction sont identiques.

Pour faciliter la gestion des bases de données, il est commode de normaliser l'enthalpie :

$$h_n = \frac{h - h_{min}(z)}{h_{ad}(z) - h_{min}(z)} \quad (2.22)$$

où h_{ad} et h_{min} sont respectivement les enthalpies adiabatique et minimale du mélange pour une fraction de mélange (ou richesse locale) donnée. L'enthalpie minimale correspond à l'enthalpie du mélange à l'équilibre thermodynamique refroidi à la température T_{min} la plus faible qui puisse être rencontrée dans le système réactif étudié.³

2.3 Génération des tables thermochimiques

Au travers de la méthode ILDM (Intrinsic Low Dimensional Manifold), Maas et Pope (1992) ont montré qu'une base de chimie tabulée peut être construite à partir d'une analyse purement mathématique du système réactif. Si cette approche est formellement très rigoureuse, les dimensions du système sont généralement réduites seulement sous des conditions de température élevées (Gicquel *et al.* 2000). Une autre stratégie, plus appropriée à des systèmes réactifs réels, est de supposer que la structure chimique des flammes peut être modélisée par des configurations élémentaires simples qui dépendent des caractéristiques globales de l'écoulement réactif. Ainsi des flammes prémélangées laminares sont adaptées dans des régimes prémélangés ou partiellement prémélangés. Cette hypothèse est vérifiée lorsque la combustion turbulente se situe dans le régime de flammelette, c'est à dire lorsqu'aucune structure tourbillonnaire ne pénètre dans le front de flamme. La structure laminaire de la flammelette est alors conservée.

Différentes situations représentatives des systèmes réactifs réels sont discutées dans cette partie. La construction de tables thermo-cinétiques FPI (Gicquel *et al.* 2000) ou FGM (van Oijen *et al.* 2001) adaptées aux flammes partiellement prémélangées rencontrées dans les foyers aéronautiques est tout d'abord présentée. La question de la modélisation des pertes thermiques est ensuite abordée, puis la modélisation de l'auto-allumage, caractéristique des moteurs à combustion interne est traitée. Enfin la modélisation de la cinétique chimique dans les fours industriels où combustible et comburant sont injectés séparément dans

3. En pratique l'enthalpie minimale h_{min} est calculée en faisant un calcul à l'équilibre thermodynamique à (P, T_{min}) constants.

la chambre de combustion sera finalement étudiée. Dans cette dernière configuration, nous nous intéresserons à la situation fréquemment rencontrée où le comburant est dilué avec des gaz brûlés avant de pénétrer la zone de réaction.

2.3.1 Modélisation des flammes prémélangées et partiellement prémélangées par la méthode FPI

Flame Prolongation of ILDM

La méthode Flame Prolongation of Intrinsic Low Dimensional Manifold proposée par Gicquel *et al.* (2000) repose sur l'hypothèse que la structure chimique des flammes turbulentes partiellement prémélangées peut se modéliser par une collection de flammes mono-dimensionnelles prémélangées se propageant librement. Sous l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire, ces "flammelettes" sont décrites par le système d'équations :

$$\begin{cases} \rho u = \dot{m} \\ \rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho u \frac{dY_k}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\rho D \frac{dY_k}{dx} \right) + W_k \dot{\omega}_k & k = 1, \dots, n_{sp} \\ \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho u C_p \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \sum_{k=1}^k h_k W_k \dot{\omega}_k \end{cases} \quad (2.23)$$

avec comme conditions aux limites :

$$\begin{cases} T(x = -\infty) = T^f & \frac{dT}{dx}(x = +\infty) = 0 \\ Y_k(x = -\infty) = Y_k^f & \frac{dY_k}{dx}(x = +\infty) = 0 \end{cases} \quad (2.24)$$

où x est la coordonnée spatiale dans la direction normale au front de flammes, T la température, u la vitesse de l'écoulement, ρ la masse volumique, λ la conductivité thermique du mélange et C_p la capacité calorifique du mélange. Y_k est la fraction massique de l'espèce chimique k , h_k son enthalpie massique et W_k sa masse molaire. $\dot{\omega}_k$ est le taux de réaction chimique de l'espèce k exprimé en $mole.m^{-3}.s^{-1}$. Les inconnues du système sont la température T , les fractions massiques des espèces Y_k et le débit massique \dot{m} . L'identification du débit massique permet de déterminer la vitesse de propagation d'une flamme plane laminaire S_l :

$$\rho_0 S_l = \dot{m} \quad (2.25)$$

où ρ_0 est la masse volumique des gaz frais.

Le modèle FPI suppose que la structure chimique des flammes partiellement prémélangées peut être reproduite par une collection de flammes 1-D prémélangées calculées chacune pour des conditions de richesse de gaz frais différentes. La table thermochimique est construite en résolvant le système d'équations 2.23 dont le système de conditions aux limites 2.24 est exprimé en fonction de la richesse ϕ_0 du mélange de gaz frais :

$$T^f = T^f(\phi_0), \quad Y_k^f = Y_k^f(\phi_0) \quad \text{pour} \quad \phi_l < \phi_0 < \phi_r \quad (2.26)$$

où ϕ_l et ϕ_r sont respectivement les limites d'inflammabilité pauvre et riche du mélange réactif. Ainsi, les variables thermochimiques φ solutions du problème s'expriment de la façon suivante :

$$\varphi = \varphi(\phi_0, x) \quad (2.27)$$

La richesse du mélange de gaz frais est reliée à la fraction de mélange par la relation :

$$\phi_0 = \frac{z(1 - z_{st})}{z_{st}(1 - z)} \quad (2.28)$$

avec z_{st} la valeur prise par la fraction de mélange dans des conditions stœchiométriques. Sous l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire, la fraction de mélange est constante dans une flamme prémélangée. Ainsi les variables thermochimiques s'expriment également en fonction de z :

$$\varphi(\phi_0, x) = \varphi(z, x) \quad (2.29)$$

Comme la variable d'avancement de réaction Y_c évolue de façon continue et monotone entre les gaz frais (état initial) et les gaz brûlés (état final), le changement de variable $Y_c = f(x)$ est également possible. Les grandeurs thermochimiques sont donc fonctions des coordonnées z et Y_c :

$$\varphi = \varphi(Y_c, z) \quad \text{pour} \quad z_l < z < z_r \quad (2.30)$$

où z_l et z_r sont respectivement les valeurs de fraction de mélange correspondant aux limites d'inflammabilité pauvre et riche. Pour faciliter l'interpolation dans la table, la variable c , c'est à dire la forme normalisée de l'avancement de la réaction Y_c (cf. Eq. 2.17), est généralement introduite :

$$\varphi = \varphi(c, z) \quad \text{pour} \quad z_l < z < z_r \quad (2.31)$$

En dehors des limites d'inflammabilité, les taux de réactions chimiques sont supposés nuls. Les variables thermodynamiques et la composition du mélange

sont interpolées linéairement en fonction de z :

$$\text{si } z_r < z < 1 : \quad (2.32)$$

$$\varphi(c, z) = \frac{z - z_r}{1 - z_r} (\varphi_{fuel} - \varphi(c, z_r)) + \varphi(c, z_r) \quad (2.33)$$

$$\text{si } 0 < z < z_l : \quad (2.34)$$

$$\varphi(c, z) = \frac{z}{z_l} (\varphi(c, z_l) - \varphi_{oxy}) + \varphi_{oxy} \quad (2.35)$$

$$(2.36)$$

φ_{fuel} et φ_{oxy} représentent respectivement l'ensemble des variables thermo-chimiques qui caractérisent le combustible et le comburant. Comme il n'y a pas de réaction chimique en dehors des limites d'inflammabilité du mélange, φ_{fuel} et φ_{oxy} ne dépendent pas de la variable d'avancement de réaction, c .

Domaine de validité de la méthode FPI

La plupart des travaux de modélisation dédiés à la combustion distinguent les flammes "prémélangées", où le combustible et le comburant sont parfaitement mélangés avant la réaction chimique, des flammes "non prémélangées" appelées également "flammes de diffusion", où le combustible et le comburant sont injectés séparément. Dans ce second cas, la zone de réaction se situe dans la couche de mélange proche des conditions stoechiométriques. En combinant la variable d'avancement de réaction Y_c à la fraction de mélange z , la méthode FPI est capable de suivre à la fois les trajectoires chimiques des flammes prémélangées et celles des flammes de diffusion. Cette technique de tabulation a été en réalité anticipée par Bradley *et al.* (1988) puis par al Maseeh *et al.* (1990) dans le cadre de la modélisation de la combustion turbulente partiellement prémélangée.

Le fait que la trajectoire dans l'espace (Y_c, z) d'une flamme partiellement prémélangée ou non prémélangée soit capturée par le modèle FPI ne signifie pas que l'ensemble des espèces chimiques est correctement modélisé par la base de chimie tabulée. Pour étudier ce point, le modèle FPI est testé sur des flammes 1-D à contre-courant (Fiorina *et al.* 2005a), partiellement-prémélangées et non prémélangées étirées. Le paramètre d'étirement a est défini par le gradient de vitesse rencontré du côté du combustible : $a = du/dx|_{fuel}$, où u est la vitesse dans la direction x , perpendiculaire aux jets injectés à contre-courant. Les trajectoires suivies par le système réactif dans l'espace (Y_c, z) sont tracées sur la figure 2.3. Les lignes en pointillé représentent les trajectoires suivies dans des flammes prémélangées. Sous l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire, la fraction de mélange z reste constante dans chaque flammelette prémélangée, ainsi les trajectoires obtenues sont des droites verticales localisées dans l'intervalle $[z_l, z_r]$ où z_l et z_r sont les limites d'inflammabilité pauvre et riche du

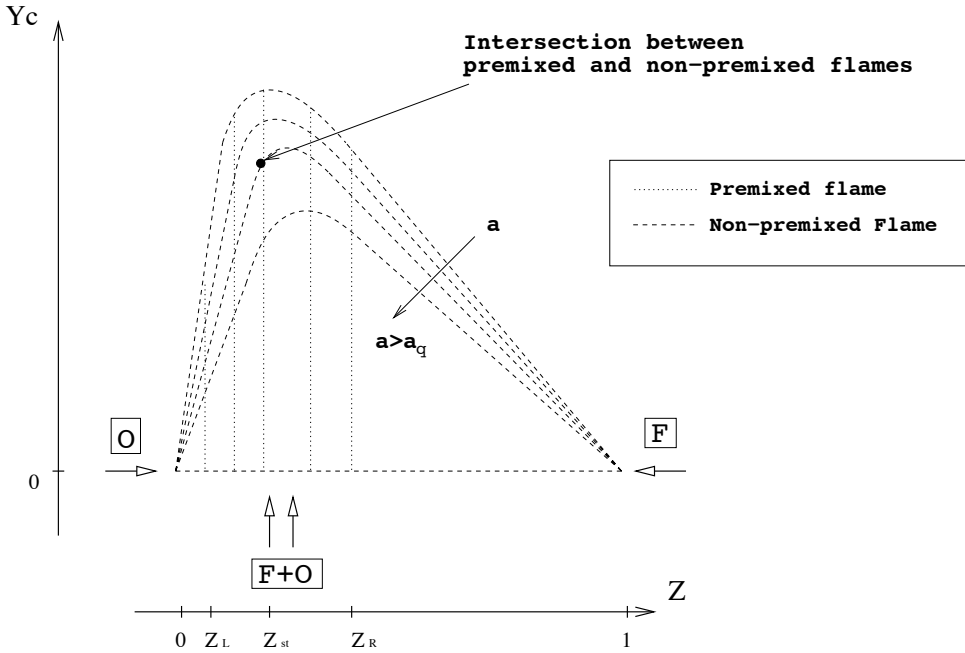


FIGURE 2.3 – Trajectoires suivies par des flammes prémélangées libres et par des flammes à contre-courant dans l'espace (z, Y_c) (Fiorina et al. 2005a).

mélange. Les lignes en tirets représentent les trajectoires suivies par un ensemble de flammes non prémélangées résolues pour différentes valeurs d'étirement. Le modèle FPI suppose que les propriétés thermodynamiques et chimiques d'une flamme dans l'espace (Y_c, z) sont toujours identiques à celles de flammes 1-D prémélangées. Sur la figure 2.3, cela signifie qu'aux intersections entre les trajectoires des flammes prémélangées et non prémélangées dans le sous espace (Y_c, z) , la relation suivante est supposée :

$$\varphi_{FPI}(Y_c, z) \approx \varphi_{CC}(Y_c, z) \quad (2.37)$$

où φ_{FPI} et φ_{CC} sont les variables thermochimiques issues respectivement de la base FPI et de la flamme à contre-courant. Une série de flammes 1-D à contre-courant résolues en utilisant le schéma cinétique détaillé de Lindstedt (1997) est post-traitée pour vérifier cette approximation. La fraction de mélange z et la variable d'avancement de réaction Y_c sont extraites du calcul de la flamme en chimie détaillée et utilisées pour entrer dans la base thermochimique FPI. Les grandeurs thermochimiques issues de la base de données sont comparées sur les figures 2.4 et 2.5 à la solution de référence obtenue sous l'hypothèse d'une chimie complexe.

La figure 2.4 présente une configuration partiellement prémélangée où un mélange méthane/air caractérisé par une richesse $\phi_F = 1.8$ est injecté à contre-courant d'une injection d'air. Un accord parfait est observé entre la solution de référence sur la température, les espèces majoritaires comme le CO_2 , les espèces minoritaires comme OH ou le taux de réaction chimique de la variable d'avancement de réaction. De plus l'effet de l'étirement sur la structure de la flamme est bien capturé par la base de chimie tabulée. La figure 2.5 montre toujours des résultats obtenus sur une configuration à contre-courant partiellement prémélangée mais avec une richesse d'injection plus importante du côté du combustible ($\phi_F = 5$). Ces résultats montrent qu'il existe toujours une zone de réaction mince, située aux environs de la stœchiométrie, dans laquelle l'hypothèse du modèle FPI est vérifiée. En dehors de ces zones, la cinétique chimique est moins intense devant la diffusion des espèces. Les flux diffusifs au travers des surfaces iso-Z deviennent plus importants et affectent la structure chimique de la flamme. Une analyse plus complète est proposée dans Fiorina *et al.* (2005a). Il est montré que pour des flammes entièrement non prémélangées, c'est à dire sans air injecté avec le combustible, les erreurs induites par le modèle FPI s'accroissent davantage.

Les conclusions des études publiées par Fiorina *et al.* (2005a) sont que le modèle FPI est valide lorsque le front de flamme, qui inclut la zone thermique et réactive, est localisé dans son intégralité dans des régions où la richesse du mélange est dans les limites d'inflammabilité du combustible. Dans ces conditions, la structure de flamme sera proche de celle d'une flammelette laminaire prémélangée. Dans le cas de flammes laminaires à contre-courant, ce régime est naturellement rencontré lorsque la richesse du mélange combustible/comburant est inférieure à la limite d'inflammabilité riche (dans les flammes méthane/air étudiées précédemment, $\phi_r \approx 2$). A l'inverse, si la richesse d'injection est plus grande que la limite d'inflammabilité riche, la structure sera caractéristique d'une flamme de diffusion, ce qui n'est pas favorable au modèle FPI.

Dans le cas de flammes turbulentes, il est plus difficile d'identifier *a priori* la nature de la flamme simplement à partir des conditions d'injection des réactifs dans la chambre. Le régime de combustion peut être complexe, en présentant simultanément des branches de diffusion et des noyaux prémélangés. Dans ce cas, des bases de chimie construites à partir de flammelettes soit prémélangées, soit non prémélangées ne permettent pas de prédire l'intégralité de la structure chimique de la flamme. Pour cela la diffusion au travers des surfaces iso-z (caractéristiques des flammes de diffusion) et des surfaces iso-c (caractéristiques des flammes de prémélange) doit être considérée dès la génération de la table. Nguyen *et al.* (2010) proposent pour cela de résoudre les équations bilans des espèces chimiques de flammes multi-dimensionnelles dans l'espace (Y_c, z) . L'opération qui permet de transposer les équations de l'espace physique à la

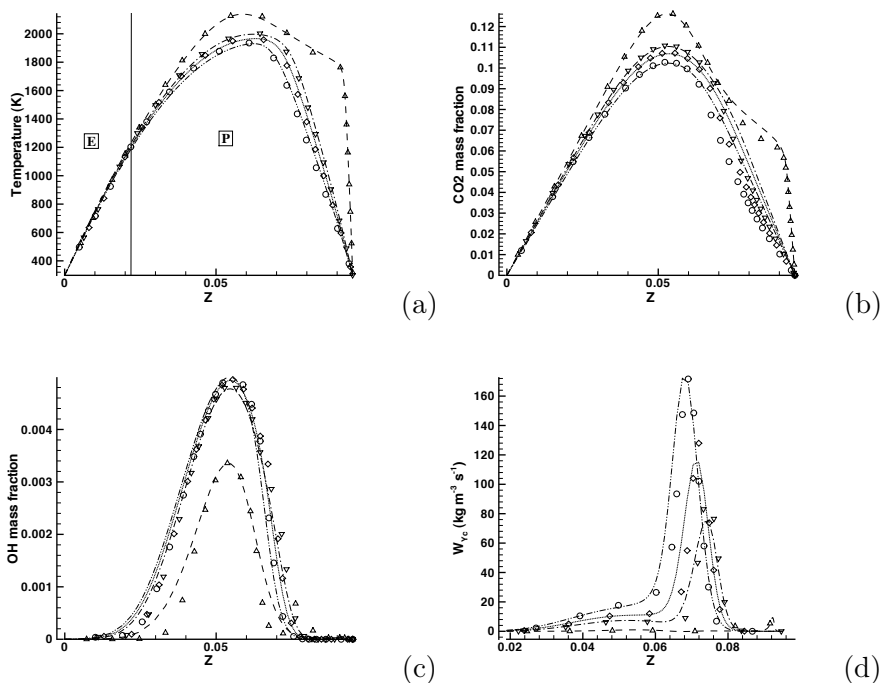


FIGURE 2.4 – Comparaison entre le modèle FPI et la solution chimie détaillée d'une flamme méthane-air partiellement prémélangée riche ($\phi_F = 1.8$) pour différents étirements a. (a) : Température, (b) : Y_{CO_2} , (c) : Y_{OH} , (d) : ω_{Y_c} . Traits pleins : flamme de référence chimie détaillée. Symboles : FPI. Traits pointillés et triangles hauts : $a = 10s^{-1}$. Traits mixtes et triangles bas : $a = 158s^{-1}$. Points et diamants : $a = 252s^{-1}$. Traits point-point et cercles : $a = 398s^{-1}$. P et E : à l'intérieur et hors des limites d'inflammabilité. (Fiorina et al. 2005a).

base (Y_c, z) introduit des nouveaux paramètres. Il s'agit des taux de dissipation scalaires $\chi_z = \rho|\nabla z|^2$, $\chi_{Y_c} = \rho|\nabla Y_c|^2$ et $\chi_{Y_c, z} = \nabla Y_c \cdot \nabla z$. L'ajout de ces paramètres introduit de nouveaux degrés de libertés qui capturent, avec la même table chimique, des flammes aux structures complexes. Cette approche est très similaire au modèle REDIM (Bykov et Maas 2007; Bykov et Maas 2009). Ces méthodes de tabulation sont plus précises que des bases de données thermo-chimiques construites avec une seule configuration de flammelette. En contrepartie, la table est plus difficile à construire et possède plus de dimensions.

Bien que le modèle FPI ne soit pas bien adapté aux flammes de diffusion, il a été de nombreuses fois utilisé pour simuler des flammes non prémélangées (Vervisch et al. 2004; Fiorina et al. 2009; Vreman et al. 2009). Comme la position de la

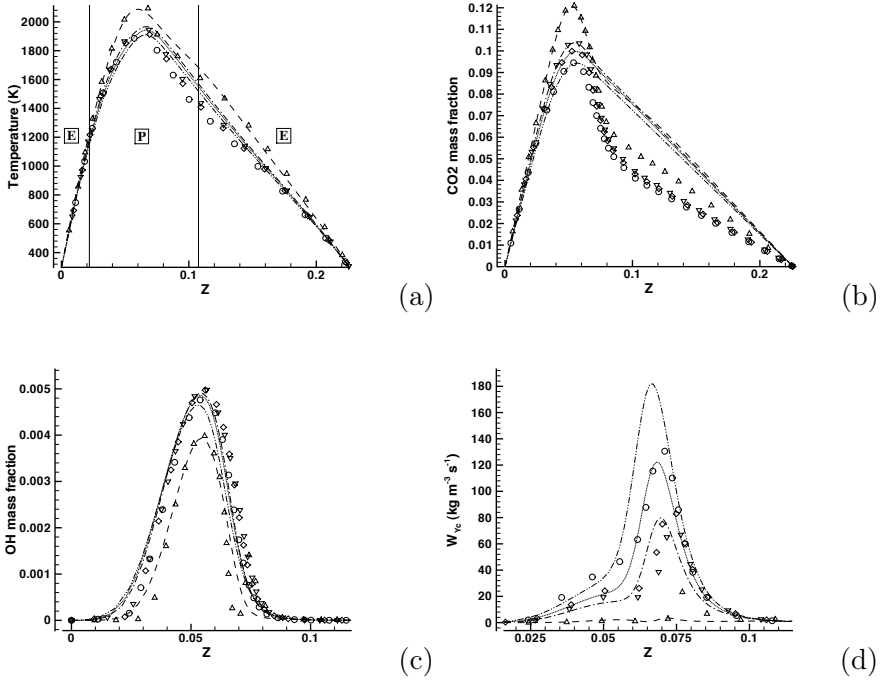


FIGURE 2.5 – Comparaison entre le modèle FPI et la solution chimie détaillée d'une flamme méthane-air partiellement prémélangée riche ($\phi_F = 5$) pour différents étirements a . (a) : Température, (b) : Y_{CO_2} , (c) : Y_{OH} , (d) : $\dot{\omega}_{Y_C}$. Traits pleins : flamme de référence chimie détaillée. Symboles : FPI. Traits pointillés et triangles hauts : $a = 10s^{-1}$. Traits mixtes et triangles bas : $a = 158s^{-1}$. Points et diamants : $a = 252s^{-1}$. Traits point-point et cercles : $a = 398s^{-1}$. P et E : à l'intérieur et hors des limites d'inflammabilité (Fiorina et al. 2005a).

flamme est principalement gouvernée par le mélange entre le combustible et le comburant, et non par la cinétique chimique de la combustion, des accords corrects avec les mesures expérimentales ont été généralement observés. Les erreurs liées à la tabulation risquent cependant d'être davantage préjudiciables pour la prédiction des polluants. Elles pourraient être corrigées par les méthodes hybrides mentionnée précédemment (Bykov et Maas 2007; Bykov et Maas 2009; Nguyen et al. 2010).

Prise en compte des pertes thermiques

La prise en compte de l'effet des échanges thermiques sur la chimie de la com-

bustion implique de faire varier la coordonnée enthalpie lors de la génération des bases thermo-chimiques. Une solution est de calculer des flammelettes laminaires 1-D prémélangées, non seulement pour différentes richesses mais aussi pour différentes températures des gaz frais. Cependant, pour obtenir des niveaux de pertes thermiques similaires à ceux rencontrés dans des applications réelles (par exemple lors du refroidissement des fumées qui longent une paroi froide), des températures peu réalistes de gaz frais doivent être imposées (en-dessous de 270 K). Non seulement la combustion d'un gaz a rarement lieu à très basse température, mais de plus il est difficile de trouver des données thermodynamiques valides sous ces conditions. Au lieu de baisser la température des gaz frais dans une configuration de flamme se propageant librement, van Oijen *et al.* (2001) ont proposé de simuler des flammelettes accrochées sur un brûleur poreux isotherme. Dans ces flammes, la totalité des échanges thermiques a lieu par conduction thermique à l'extrémité du brûleur. Comme il n'y a plus de pertes thermiques au delà du milieu poreux, l'enthalpie reste constante dans la flamme sous l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire.

La différence principale entre les flammes accrochées sur brûleur et les flammes se propageant librement est que le débit massique \dot{m} n'est plus une inconnue du système mais un paramètre (Kee *et al.* 1985). La diminution de \dot{m} entraîne une augmentation des flux conductifs entre la flamme et la paroi du brûleur et donc une diminution de l'enthalpie h (Fiorina *et al.* 2003). Il existe un débit minimal pour lequel la flamme s'éteint. D'un autre côté, la plus grande valeur de débit massique correspond aux flammes adiabatiques. Ainsi, en faisant simplement varier le débit massique \dot{m} , il est possible d'atteindre tous les niveaux d'enthalpie pour lesquels une flamme stable existe. La figure 2.6 montre la température exprimée en fonction de la fraction massique de CO_2 pour différentes flammes prémélangées stœchiométriques méthane/air, du niveau adiabatique jusqu'à l'extinction. La température initiale des gaz frais est égale à 298K. Le code PREMIX de l'ensemble CHEMKIN (Kee *et al.* 1989) est utilisé avec le mécanisme cinétique développé par Lindstedt (1997). En faisant l'hypothèse d'un nombre de Lewis constant et unitaire, l'enthalpie se conserve dans chaque flamme, ce qui rend la tabulation dans une base de données plus simple.

A ce stade, il est légitime de s'interroger sur la validité de la méthode employée pour faire varier l'enthalpie. Pour cela nous allons voir si deux flammes qui ont subi le même niveau d'enthalpie mais via des pertes thermiques de natures différentes ont la même structure dans l'espace des compositions chimiques. Deux flammes laminaires prémélangées stœchiométriques méthane/air sont calculées. La première se propage librement tandis que la seconde est accrochée au nez du brûleur pour un débit massique donné. La température des gaz frais est choisie de sorte que l'enthalpie des deux flammes soit la même. Les résultats sont tracés sur la figure 2.7. La température initiale des gaz frais de la flamme prémélangée

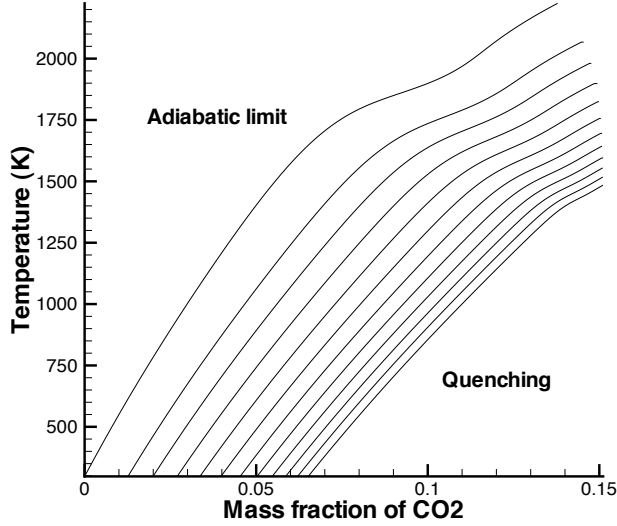


FIGURE 2.6 – *Température en fonction de la fraction massique de CO_2 pour une série de flammes stœchiométriques méthane/air accrochées sur brûleur. Chaque trajectoire correspond à une valeur de l'enthalpie. Celle-ci évolue entre les conditions adiabatiques ($h = -0.26 \cdot 10^6 \text{ J kg}^{-1}$) et la limite d'extinction $h = -1.5 \cdot 10^6 \text{ J kg}^{-1}$ (Fiorina et al. 2003).*

libre est 600 K, ce qui correspond à une enthalpie égale à $h = 8,2 \cdot 10^4 \text{ J/kg}$. La température des gaz frais de la flamme accrochée sur brûleur est de 1000 K, soit une enthalpie du mélange $h_f = 5,8 \cdot 10^5 \text{ J/kg}$. Le débit massique est choisi de façon à ce que l'enthalpie des gaz brûlés soit égale à $8,2 \cdot 10^4 \text{ J/kg}$ afin d'atteindre le même niveau d'enthalpie que la flamme prémélangée se propageant librement.

Les deux profils de température tracés sur la figure 2.7a (ligne en trait plein pour la flamme prémélangée libre et cercles pour la flamme accrochée sur brûleur) montrent que les flammes sont effectivement différentes dans l'espace spatial $x(\text{cm})$. Traçons alors ces résultats dans l'espace des phases réduit à la dimension Y_c avec $Y_c = Y_{CO_2}$. La figure 2.7b montre que la température et les espèces chimiques (ici OH, choisi arbitrairement) sont identiques dans ce repère. La manière choisie pour changer l'enthalpie n'affectera donc pas la structure de la flamme exprimée en fonction de la variable d'avancement de réaction. Cela signifie qu'à la fois des flammes accrochées sur brûleur et des flammes se propageant librement peuvent être utilisées pour générer la même base FPI.

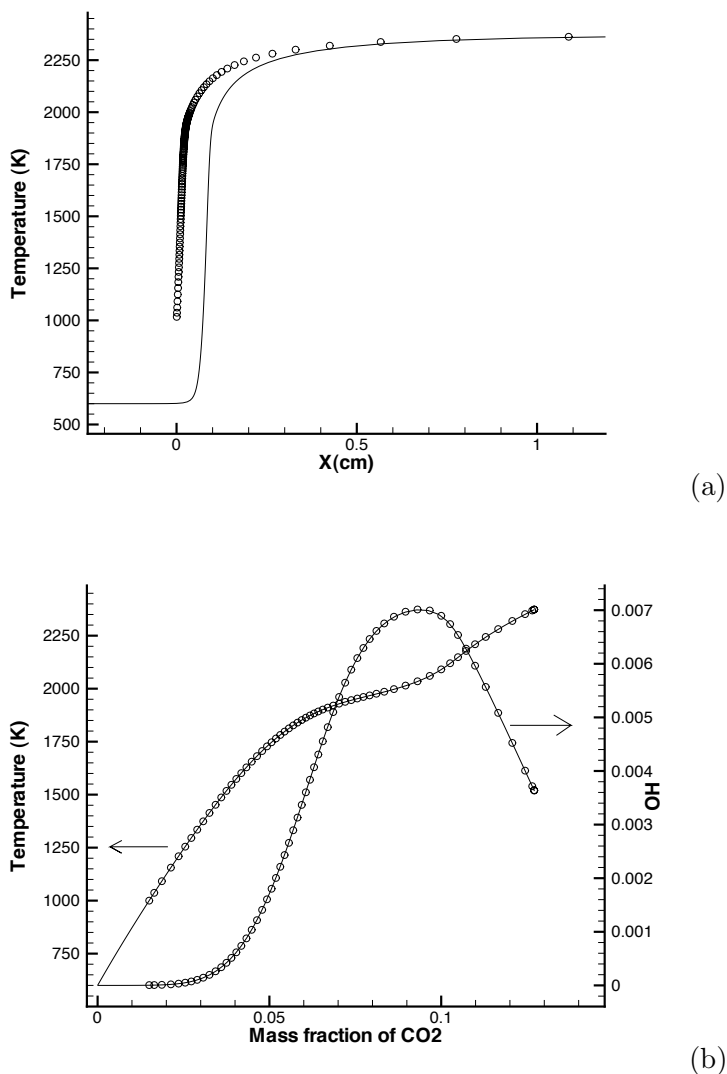


FIGURE 2.7 – *Comparaison entre deux flammes prémélangées respectivement libre et accrochée qui ont la même enthalpie. Traits pleins : flamme prémélangée se propageant librement à une température initiale de 600 K. Cercles : flamme prémélangée accrochée sur brûleur dont la température initiale est de 1000 K. Les résultats sont exprimés dans l'espace physique (a) et dans l'espace des phases (b) (Fiorina et al. 2003).*

La table non adiabatique est maintenant testée dans des situations où les transferts radiatifs sont importants. Un modèle très simple est choisi en in-

troduisant dans l'équation de l'énergie le terme puits $\gamma_{rad} = \epsilon\sigma(T^4 - T_0^4)$ où $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ et ϵ est l'émissivité radiative du gaz. Des flammes 1-D prémélangées sont résolues en faisant varier ϵ de 0 à 0,8 afin de couvrir une gamme étendue d'échanges radiatifs.

La figure 2.8 montre, pour différentes intensités du rayonnement, la température et quelques fractions massiques d'espèces. Les résultats issus du modèle FPI non adiabatique (symboles) sont comparés à ceux obtenus sous l'hypothèse d'une chimie détaillée (traits pleins). La température (figures 2.8(a) et 2.8(b)) est bien prédite et seules de petites différences (inférieures à 50 K) sont observées pour les flux thermiques les plus importants ($\epsilon = 0,8$). Les points qui sont concernés par ces écarts sont rencontrés dans les gaz brûlés refroidis aux environs de 1000K. Ceux-ci sont situés au delà des limites d'extinction engendrées par les pertes thermiques, et les erreurs sont dues à l'interpolation en dehors de la base FPI. Les espèces majoritaires telles que le CO_2 (figure 2.8(c)) sont également bien prédites. Enfin, peu d'écarts sont observés pour les espèces minoritaires (Figures 2.8(d) à 2.8(f)).

Le modèle FPI reproduit donc la plupart des trajectoires suivies par les espèces chimiques dans l'espace des phases. De plus, l'hypothèse que les pertes thermiques par rayonnement ou par conduction agissent de la même façon sur la cinétique chimique est vérifiée. La trajectoire suivie pour atteindre un certain degré de pertes thermiques n'a donc pas d'importance sur la structure chimique de la flamme dans des conditions stationnaires.

En ce qui concerne la coordonnée z , un ensemble de flammes laminaires prémélangées 1-D est calculé pour des richesses évoluant entre les limites d'inflammabilité riche et pauvre du mélange. Pour chaque richesse, les flammes sont résolues de l'état adiabatique (atteint par la flamme prémélangée libre) à la limite d'extinction due aux pertes thermiques (débit massique minimal). Chacune de ces flammes couvre la dimension d'avancement de réaction, de $Y_c = Y_c^f$ à Y_c^b . Elles sont ensuite tabulées par :

$$\varphi = \varphi(h, Y_c, z) \quad (2.38)$$

La figure 2.9 représente une projection d'une base FPI 3-D dans le sous-espace (Y_{N_2}, h) . Cette base de chimie tabulée est obtenue pour un mélange de méthane et d'air initialement à $T = 298 \text{ K}$ en utilisant un schéma réactionnel proposé par Lindstedt (1997). Les limites d'inflammabilité riche et pauvre correspondent respectivement à $Y_{N_2} = 0,69$ (richesse $\phi_R = 2$) et $Y_{N_2} = 0,75$ (richesse $\phi_L = 0,4$). Toutes les fractions massiques présentes dans le schéma cinétique détaillé, les taux de réactions chimiques, ainsi que la température et les données thermodynamiques ($\rho, \lambda, C_p, \dots$) requises sont enregistrées dans la base de données.

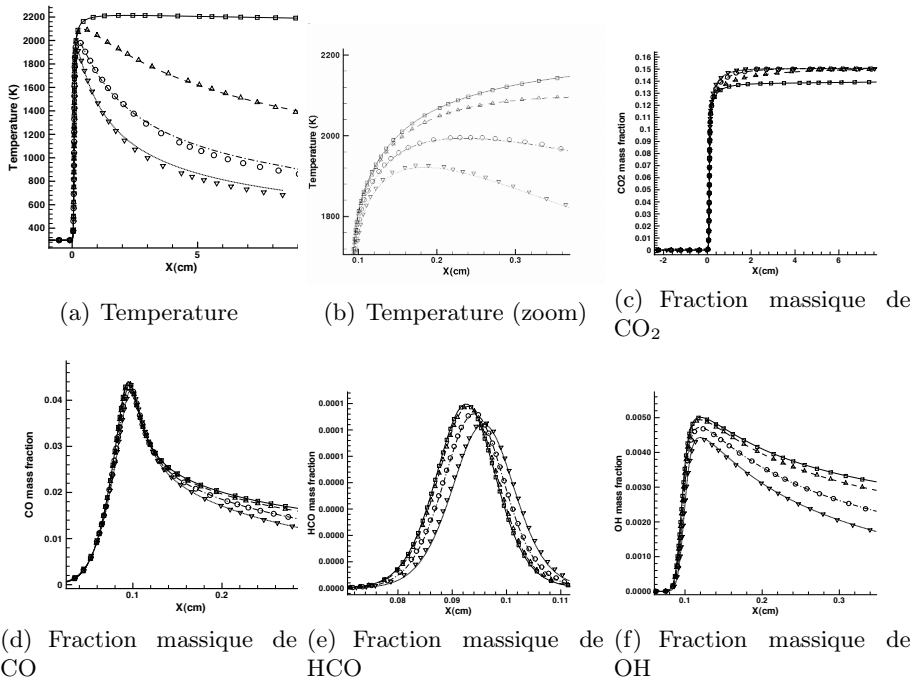


FIGURE 2.8 — Evolution, au travers d'une flamme prémélangée radiative, de la température et des fractions massiques d'espèces pour quatre valeurs de l'émissivité radiative $\epsilon = 2.10^{-3}$ (traits pleins et carrés), $\epsilon = 0.1$ (Traits tiretés et triangles orientés vers le haut), $\epsilon = 0.4$ (Traits mixtes et cercles) and $\epsilon = 0.8$ (Traits pointillés et triangles orientés vers le bas). Les lignes représentent le calcul en chimie complexe et les symboles sont associés aux résultats du modèle FPI (Fiorina et al. 2003).

La limite supérieure du domaine tracé sur la figure 2.9 correspond aux flammes adiabatiques se propageant librement. La limite inférieure correspond à l'extinction due aux pertes thermiques. En dessous de cette frontière, aucune flamme ne peut exister. Cependant, à cause de l'éventuel refroidissement des produits de combustion, des points appartenant à la région située entre cette limite et l'enthalpie minimale peuvent être rencontrés dans un écoulement réactif. L'enthalpie minimale rencontrée dans une chambre s'identifie à partir d'un calcul à l'équilibre thermodynamique pour une température constante $T = T_{min}$ où T_{min} est la température la plus faible rencontrée dans la chambre. Cette région de la base FPI est construite par interpolation linéaire entre les valeurs de la limite minimale d'enthalpie et celles de l'extinction due aux pertes thermiques.

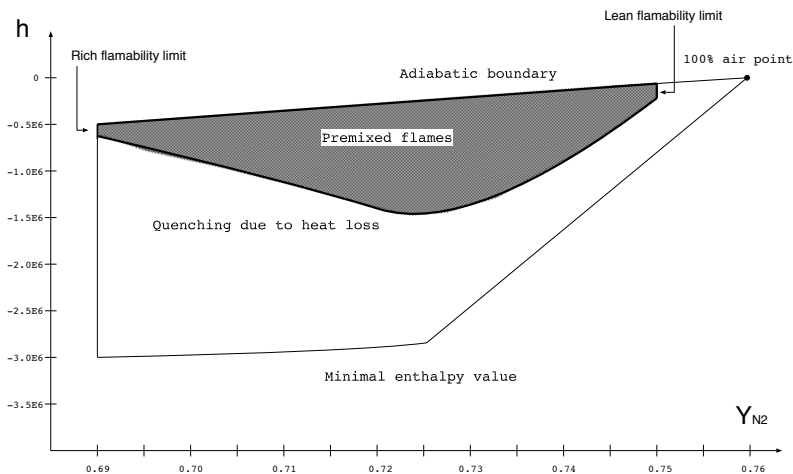


FIGURE 2.9 – Projection d'une base FPI 3-D dans le sous-espace (Y_{N_2}, h) . Les extinctions d'origine thermique (trop d'échanges de chaleur avec l'extérieur) ou cinétique (mélange en dehors des limites d'inflammabilité) sont déterminées lorsque la vitesse de flamme laminaire est inférieure à 1 cm/s. L'enthalpie minimale est celle obtenue à l'équilibre chimique pour $T = T_{min}$ (Fiorina et al. 2003).

2.3.2 Tables thermochimiques pour la modélisation des chambres de combustion interne

Méthodologie

La chambre d'un moteur à explosion est soumise à des variations importantes de température, pression et de volume qui vont influencer la cinétique chimique de la combustion. La base de chimie tabulée doit prendre en compte ces dépendances pour modéliser l'allumage du mélange et la formation des polluants.

A cause des échanges de travail durant le mouvement du piston et des pertes thermiques en paroi, l'énergie sensible et chimique e du mélange change lors des phases de compression et de détente du moteur. De plus, les phases de compression et de détente introduisent des variations de la masse volumique ρ du mélange. Pour capturer l'impact de ces variations sur la cinétique chimique de la combustion, les variables ρ et e sont considérées comme des coordonnées de la base thermochimique. L'avancement de la réaction est toujours capturé par la variable Y_c . La prise en compte des hétérogénéités de mélange n'est pas considérée ici mais est possible au travers de l'ajout d'une dimension liée à la fraction de mélange z .

Dans un moteur Diesel, comme la combustion est rapide devant la vitesse de rotation du moteur, la transition des gaz frais vers les gaz brûlés se fait à volume quasi-constant. Ainsi, une première solution relativement simple à mettre en œuvre pour tabuler la cinétique chimique consiste à enregistrer les solutions de réacteurs homogènes 0-D à volume constant (Embouazza *et al.* 2003; Embouazza 2005; Jay et Colin 2011; Tudorache *et al.* 2011). Contrairement aux modèles FPI ou de flammelettes de diffusion décrits précédemment, les flux diffusifs sont totalement négligés lors de la construction des tables. Cette hypothèse est correcte pour modéliser des phénomènes d'auto-inflammation mais sera beaucoup plus grossière pour décrire la propagation de la flamme. Le système d'équations résolu pour construire la base de données thermochimique est donc :

$$\rho \frac{dY_k}{dt} = W_k \dot{\omega}_k \quad k = 1, \dots, N_s \quad (2.39)$$

$$\frac{de}{dt} = 0 \quad (2.40)$$

avec comme conditions initiales :

$$\rho(t=0) = \rho_0 \quad (2.41)$$

$$e(t=0) = e_0 \quad (2.42)$$

$$Y_k(t=0) = Y_{k0} \quad k = 1, \dots, N_s \quad (2.43)$$

Pour une composition initiale fixée, les variables thermochimiques φ solutions des ces équations s'expriment en fonction du temps, de l'énergie interne et de la masse volumique :

$$\varphi = \varphi(t, e, \rho) \quad (2.44)$$

La variable d'avancement de la réaction Y_c est définie à partir de l'équation 2.18, qui est adaptée à l'auto-allumage d'un mélange, et évolue de façon monotone en fonction du temps. Ainsi le changement de variable $Y_c = f(t)$ est possible et conduit à l'expression des variables thermochimiques φ en fonction de Y_c , e et ρ :

$$\varphi = \varphi(e, \rho, Y_c) \quad (2.45)$$

Prédiction de l'auto-allumage par une méthode de tabulation de la cinétique chimique

L'auto-allumage est très sensible à la période d'induction qui précède l'augmentation brutale de la température. Prenons l'exemple d'un réacteur homogène 0-D. Le problème de combustion en chimie tabulée se réduit à une équation

différentielle :

$$\rho \frac{dY_c}{dt} = W_{Y_c} \dot{\omega}_{Y_c}^{tab}(e, \rho, Y_c) \quad (2.46)$$

où $\dot{\omega}_{Y_c}^{tab}(e, \rho, Y_c)$ est le taux de réaction de la variable d'avancement Y_c . Pour que le modèle numérique puisse capturer le phénomène d'auto-allumage, il faut au moins que la cinétique chimique soit active dans les gaz frais, c'est à dire : $\dot{\omega}_{Y_c}^{tab} > 0$. Cette condition est vérifiée si le combustible est introduit dans la définition de la variable d'avancement comme nous l'avons suggéré au travers de l'Eq. 2.18. Le choix de la définition de Y_c n'est cependant pas suffisant pour assurer la prédiction de l'auto-allumage. En effet, si la table n'est pas raffinée suffisamment dans l'espace Y_c , en particulier pour les valeurs de Y_c faibles, alors les délais d'auto-allumage ne seront pas correctement prédits. Il a été montré dans les travaux de thèse de Vicquelin (2010) que les délais d'auto-allumage prédits par les méthodes de chimie tabulée sont extrêmement sensibles à la discrétisation de la base de données. Un cas pratique d'auto-allumage d'un mélange d'air vicié et de méthane est mentionné à titre d'exemple. Vicquelin (2010) montre que avec une discrétisation uniforme du terme source $\dot{\omega}_{Y_c}$ de 201 points dans la dimension Y_c , le délai d'auto-allumage prédit en résolvant l'Eq. 2.46 est très éloigné de la valeur prédite par une chimie complexe. Une très haute résolution du maillage dans la direction Y_c corrige cet écart mais demande des besoins en mémoire vive considérables.

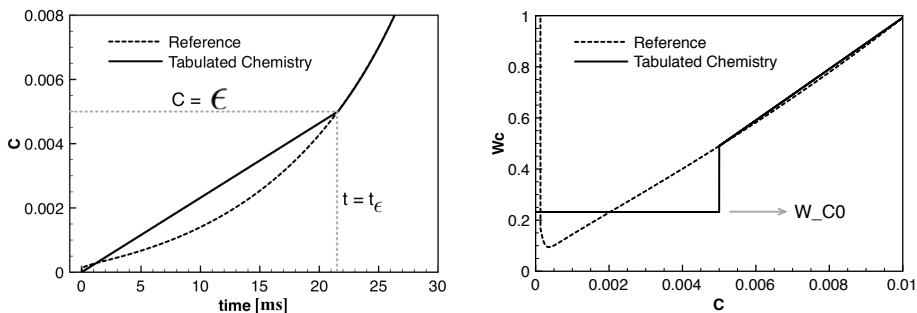
Une alternative est d'imposer $\dot{\omega}_{Y_c}$ constant entre les deux premiers points de la base de données, i.e entre $Y_c = 0$ and $Y_c = \epsilon$ (Embouazza 2005; Vicquelin 2010) :

$$\dot{\omega}_{Y_c} = \begin{cases} \dot{\omega}_{Y_{c_0}}(e, \rho) & \text{if } 0 \leq Y_c \leq \epsilon \\ \dot{\omega}_{Y_c}^{tab}(e, \rho, Y_c) & \text{if } \epsilon \leq Y_c \leq 1 \end{cases} \quad (2.47)$$

où

$$\dot{\omega}_{Y_{c_0}}(e, \rho) = \frac{\epsilon}{t_\epsilon(e, \rho)} \quad (2.48)$$

Considérons à titre d'exemple la combustion d'un mélange de méthane et d'air dilué avec de l'air vicié afin d'être porté à une température initiale d'environ 2000 K. L'effet d'un terme source constant $\dot{\omega}_{Y_{c_0}}$ sur l'évolution temporelle du système réactif est montré dans les premiers instants de l'allumage sur la Fig. 2.10. A la fois les évolutions temporelles du terme source de Y_c (Fig. 2.10(a)) et de la variable d'avancement de réaction (Fig. 2.10(b)) ne suivent pas la solution chimie détaillée pour $Y_c < \epsilon$. Cependant un accord parfait est observé ensuite pour $Y_c \geq \epsilon$. Cette formulation assure que Y_c atteint ϵ au même temps t_ϵ que la solution chimie détaillée. Ainsi cette approche permet de calculer correctement la température comme le montre la Fig. 2.11 où la solution chimie



(a) Fraction massique de la variable d'avancement de réaction normalisée c (b) Taux de réaction chimique de la variable d'avancement de réaction normalisée

FIGURE 2.10 – Comparaison de la simulation chimie tabulée avec la solution de référence pour $z = 0.1$ et pour des faibles valeurs d'avancement de réaction $\epsilon = 0.005$ (Vicquelin 2010).

tabulée (cercles) est comparée à la solution chimie détaillée de référence (ligne en traits pleins). Cette méthodologie est valable quelque soit la richesse du mélange comme le montre la figure Fig. 2.12 qui compare les délais d'auto-allumage de référence (chimie complexe, trait pleins) à ceux prédits par la chimie tabulée (symboles).

Validations 0-D

En supposant que l'enceinte de la chambre de combustion est adiabatique et que le mélange entre le combustible et le comburant est parfaitement homogène, la combustion dans un moteur Diesel est décrite par le système d'équations suivant :

$$\begin{aligned}
 \rho &= \frac{m}{V(t)} \\
 \rho \frac{dY_k}{dt} &= W_k \dot{\omega}_k \quad k = 1, \dots, N_s \\
 \frac{de}{dt} &= \frac{P}{\rho} \frac{d\rho}{dt}
 \end{aligned} \tag{2.49}$$

où la loi de volume $V(t)$ dépend du régime et des caractéristiques géométriques du moteur. Des calculs sont réalisés pour un mélange de n-heptane (n-C₇H₁₆) et d'air dans des proportions stœchiométriques en utilisant le mécanisme détaillé proposé par Rente *et al.* (2001) qui comprend 53 espèces et 281 réactions. La loi de volume est définie pour les spécificités moteur suivantes : vitesse de rotation = 1500 $tr.min^{-1}$, diamètre de cylindre = 85 mm , course du piston = 88 mm . Les solutions de la température, de la pression et des fractions massiques de

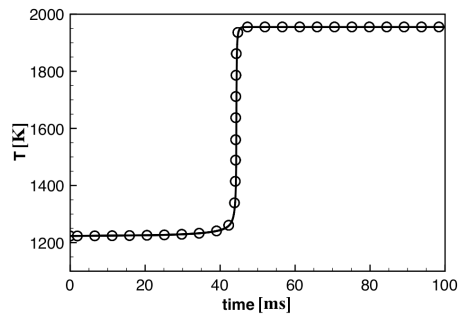


FIGURE 2.11 – *Calcul de l'auto-allumage d'un mélange méthane/air dilué avec des gaz brûlés dans un réacteur homogène pour $z = 0.1$. Symboles : solution chimie détaillée de référence. ligne : solution chimie tabulée (Vicquelin 2010). Le schéma cinétique GRI3.0 a été utilisé (Smith et al. 1999)*

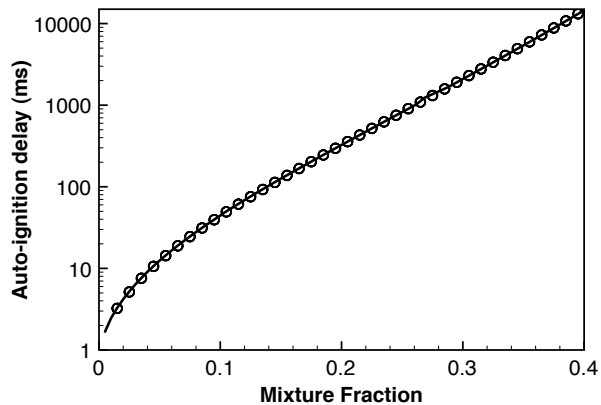


FIGURE 2.12 – *Simulations numériques des délais d'auto-allumage dans des réacteurs 0-D pour différentes valeurs de fraction de mélange (ou de richesse). Symboles : chimie détaillée. Ligne : chimie tabulée (Vicquelin 2010).*

CO₂ et CO sont tracées sur la figure 2.13 pour des conditions de température initiales différentes.

Dans un formalisme de cinétique chimique tabulée, le système d'équations qui décrit l'évolution instationnaire du réacteur se réduit aux trois équations :

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{m}{V(t)} \\ \rho \frac{\partial Y_c}{\partial t} &= W_{Y_c} \dot{\omega}_{Y_c}(\rho, e, Y_c) \\ \frac{\partial e}{\partial t} &= \frac{P}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.50)$$

où la variable d'avancement de réaction Y_c représente l'évolution des espèces chimique. Elle est définie par :

$$Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO} - Y_{C_7H_{16}} + Y_{C_7H_{16}}^0 \quad (2.51)$$

$Y_{C_7H_{16}}^0$ est la fraction massique de n-heptane dans les gaz frais. Le taux de réaction de la variable d'avancement de réaction $\dot{\omega}_{Y_c}(\rho, e, Y_c)$ est issu de la base de données chimique, construite à partir de calculs de réacteurs homogènes 0-D à volume constant en suivant la méthodologie indiquée dans le paragraphe 2.3.2.

La composition détaillée ainsi que la température sont obtenues par post-traitement de la solution du système 2.50 à l'aide de la base chimique. Les prédictions du calcul chimie tabulée, ajoutées sur la Fig. 2.13 en traits plein, sont en très bon accord avec les solutions de référence.

2.3.3 Tables thermochimiques pour la combustion non prémélangée diluée

Enjeux de la combustion diluée

Dans de nombreux systèmes de combustion, les gaz frais sont dilués avec des gaz brûlés refroidis avant de pénétrer dans la flamme. Cette technique permet de diminuer les niveaux de température atteints et donc la formation des oxydes d'azote tout en conservant un dégagement de chaleur suffisant. Les régimes où la combustion est très diluée entraînent des modes de combustion particuliers nommés "combustion sans flamme" ou encore MILD (Moderate or Intense Low Oxygen Dilution) combustion. Plusieurs auteurs ont proposé des descriptions différentes de ce mode de combustion (Wunning et Wunning 1997; Cavaliere et de Joannon 2004; Oberlack et Peters 2000). Selon l'analyse de Cavaliere et de Joannon (2004) ce mode de combustion est caractérisé par des faibles gradients de température dans la chambre. La combustion y est plus homogène

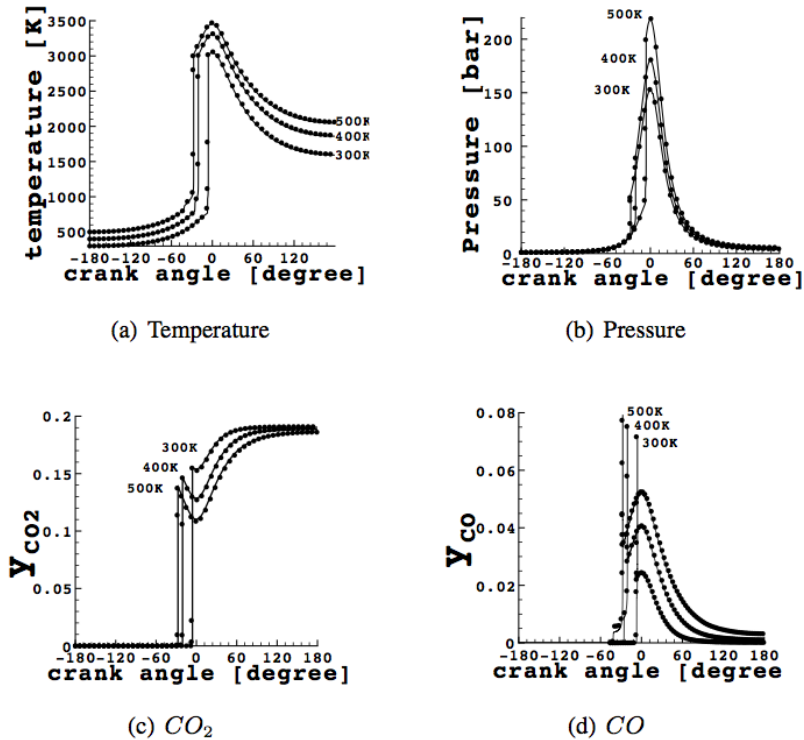


FIGURE 2.13 – *Calculs moteur 0-D de la combustion d'un mélange de n-heptane et d'air dans des proportions stœchiométriques en utilisant le mécanisme détaillé proposé par Rente et al. (2001). Symboles : chimie détaillée. Ligne : chimie tabulée (Tudorache et al. 2011).*

que dans un système conventionnel. Souvent la flamme n'est plus visible, ou du moins, son émission radiative ne se distingue plus de celle des parois de la chambre, d'où la terminologie "combustion sans flamme". Un schéma de principe représentant un exemple de "combustion sans flamme" dans un four est proposé 2.14.

Dans ces conditions, le mécanisme de stabilisation diffère en fonction de la composition, de l'enthalpie et de la quantité de gaz brûlés qui sont dilués avec le mélange de combustible et comburant. Dans les fours à combustion sans flamme, cette dilution entraîne des températures de gaz frais très élevées, ce qui favorise l'auto-allumage du mélange (Cavaliere et de Joannon 2004; Rottier 2010; Cabra *et al.* 2002; Cabra *et al.* 2005; Gordon *et al.* 2007). Comme la maturité technologique de ce procédé n'est pas encore atteinte, la simulation numérique a un rôle important à jouer pour aider son développement.

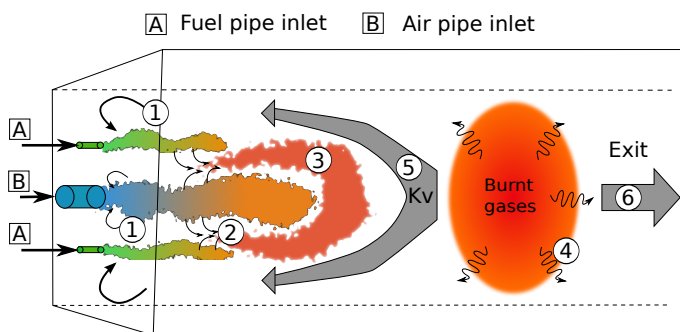


FIGURE 2.14 – Schéma de principe représentant un exemple de combustion sans flamme dans un four. A et B représentent respectivement les injections de combustible et de comburant. Les différentes étapes sont : ①, les gaz brûlés sont entraînés par les jets d'injection, ce qui dilue les réactifs. ② : l'air vicié et le combustible se mélangent. ③, la réaction a lieu entre les jets d'air et de combustible. ④, les gaz brûlés perdent de l'enthalpie par rayonnement et conduction. Cette énergie est transférée à la charge. ⑤, une partie des gaz brûlés re-circule vers l'entrée de la chambre. Ceci entraîne à nouveau l'étape ①. ⑥, l'autre partie des gaz brûlés s'échappe du domaine.) (Vicquelin 2010).

La prise en compte de la chimie détaillée dans la modélisation est inévitable étant donné la sensibilité de la flamme aux phénomènes d'auto-allumage. Le nombre de degrés de liberté du système est cependant si important qu'il rend la tabulation de la chimie extrêmement complexe. Tout d'abord on ne peut pas définir une unique composition des gaz brûlés car celle-ci dépend notamment

de la richesse locale. Ensuite, le modèle doit tenir compte de l'ensemble des possibilités de mélange entre les gaz brûlés, l'oxydant et le combustible. Enfin comme les enceintes des chambres ne sont pas adiabatiques, l'enthalpie des mélanges considérés évolue également. A priori, les effets de ces variables sur l'état chimique du système sont importants et devront probablement être pris en compte.

Etant donné la complexité du problème, une stratégie progressive de modélisation de la combustion très diluée est suivie. Nous modéliserons dans un premier temps seulement l'effet de la dilution d'un seul constituant par une composition donnée de gaz brûlés et dans une proportion constante. La configuration étudiée est adiabatique.

Etude d'une configuration simplifiée

Pour comprendre les mécanismes de stabilisation des flammes diluées par des gaz brûlés, des équipes de recherche ont étudié expérimentalement en laboratoire des configurations simplifiées où un jet de combustible est injecté dans un écoulement co-courant constitué de gaz brûlés issus eux même d'une première combustion pauvre (Cabra *et al.* 2002; Dally *et al.* 2002; Medwell *et al.* 2007). La configuration expérimentale méthane/air est schématisée sur la Fig.2.15.

Le jet central de combustible est entouré par un écoulement co-courant composé majoritairement d'air et de vapeur d'eau. Ainsi la combustion se déroule entre le combustible et l'oxydant dilué avec des gaz brûlés. En visualisant des plans de scalaires réactifs (Gordon *et al.* 2008), différents mécanismes successifs qui influencent la stabilisation de la flamme ont été identifiées. La synthèse des résultats expérimentaux conduit à une représentation schématique du processus de combustion indiquée sur la Fig. 2.16. L'allumage et la stabilisation de la flamme ont lieu lors du mélange entre le combustible et le comburant. Des noyaux réactifs s'agrandissent et forment une flamme de diffusion en même temps qu'ils sont convectés par l'écoulement.

Selon l'analyse de Peters (2000), la structure d'une flamme turbulente non prémélangée peut se modéliser par un ensemble de flammes 1-D étirées dont les conditions aux limites sont représentatives du combustible et du comburant. Différentes structures de flammelettes qui correspondent à diverses positions dans la couche de mélange réactive sont schématisées sur la Fig. 2.16. Les études de Michel *et al.* (2009, Ihme et See (2010) soulignent l'importance de la prise en compte de l'effet de la diffusion entre les différentes couches de mélange sur l'initiation des réactions chimiques. Avant l'amorçage des réactions chimiques, le profil de température est quasi-linéaire en fonction de la fraction de mélange. L'allumage se déroule au niveau de la fraction de mélange la

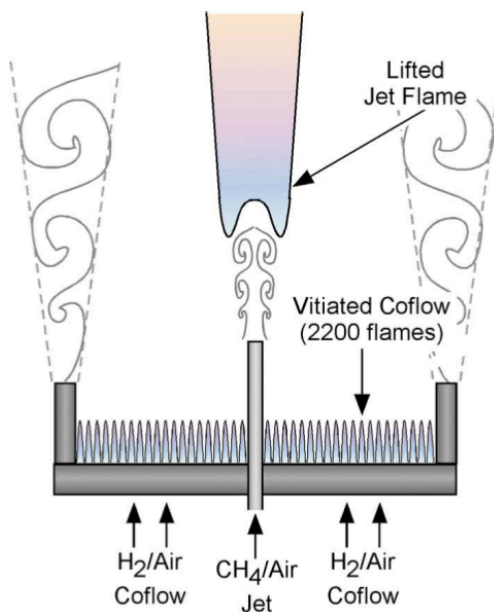


FIGURE 2.15 – *Flamme jet méthane / air injectée dans un écoulement consistés de produits issus de la combustion d'air et de dihydrogène (Cabra et al. 2002).*

plus réactive (Mastorakos *et al.* 1996; Hilbert et Thévenin 2002) et se propage aux travers de la couche de mélange. Finalement le régime d'une flamme de diffusion stationnaire s'établit en aval de l'écoulement. Des flammelettes 1-D instationnaires non prémélangées ont une structure chimique très proche de celles rencontrées dans la configuration expérimentale étudiée ici (Cabra *et al.* 2002; Cabra *et al.* 2005). Le paragraphe suivant décrit la mise en équation de ces flammelettes et indique comment utiliser leur solutions pour construire une table thermochimique adaptée à la combustion de réactifs dilués par des gaz brûlés.

Equation des flammelettes instationnaires non prémélangées

Nous supposons que le nombre de Lewis de chaque espèce, Le_k , est constant. Sous ces hypothèses, les équations de conservation des fractions massiques d'espèces Y_k , de la température T peuvent s'écrire dans l'espace de la fraction de mélange sous la forme :

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = \frac{\rho \chi}{2} \frac{1}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2} + \rho \dot{\omega}_k \quad (2.52)$$

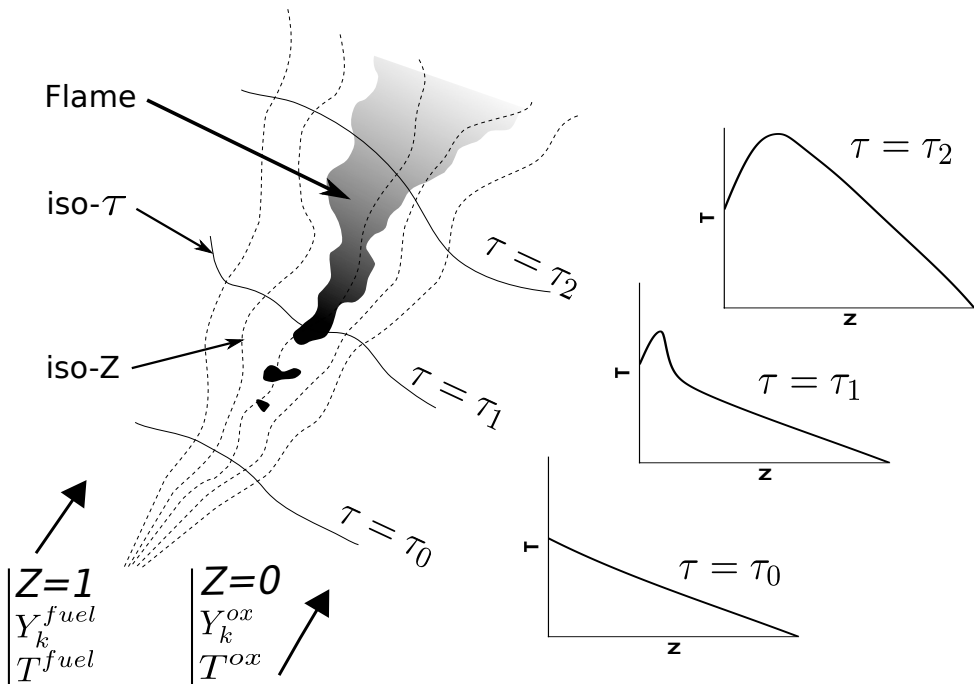


FIGURE 2.16 – Vues schématiques de l’auto-allumage d’une flamme non pré-mélangée turbulente diluée par des gaz brûlés (gauche) et des flammelettes retenues pour la modélisation (droite). Gauche : la flamme (en gris) est stabilisée entre le combustible ($z = 1$) et le comburant ($z = 0$); les iso-surfes du temps lagrangien (traits pleins) et de la fraction de mélange (traits pointillés) sont également tracées. Droite : température en fonction de la fraction de mélange dans une flamme laminaire non prémélangée à trois différents instants qui correspondent au mélange qui précède l’allumage (τ_0), à l’auto-inflammation (τ_1) et au régime de flamme de diffusion établie (τ_2) (Vicquelin 2010).

ρ , $\dot{\omega}_k$, h_k et c_{p_k} sont respectivement la masse volumique, le taux de réaction massique, l'enthalpie et la capacité calorifique massique de l'espèce k . $\chi = 2D_z(\partial z/\partial x_i)(\partial z/\partial x_i)$ est le taux de dissipation scalaire de la fraction de mélange avec $D_z = \lambda/\rho C_p$. C_p et λ sont la capacité calorifique et la conductivité thermique du mélange. La variable χ , qui dépend des conditions aérodynamiques de l'écoulement, doit être modélisée.

Dans un écoulement à contre-courant stationnaire, le taux de dissipation scalaire s'exprime en fonction de la fraction de mélange et de l'étirement a au travers de la relation analytique suivante (Peters 2000) :

$$\chi(z) = \frac{a}{\pi} \exp(-2[\operatorname{erf}^{-1}(2z-1)]^2) = aF(z) \quad (2.53)$$

En introduisant le taux de dissipation scalaire à la stoechiométrie, $\chi_{st} = \chi(z = z_{st})$, l'Eq. 2.53 devient :

$$\chi(z) = \chi_{st} \frac{F(z)}{F(z_{st})} \quad (2.54)$$

La résolution des équations instationnaires 2.52 nécessite une solution initiale dans l'espace de la fraction de mélange. L'instant $t = 0$ correspond à l'état du mélange entre le combustible et le comburant qui précède l'inflammation. Les fractions massiques d'espèces, $Y_k(t = 0)$, et l'enthalpie $h(t = 0)$ sont donc des fonctions linéaires de z :

$$Y_k(z, t = 0) = zY_k^{fuel} + (1-z)Y_k^{ox} \quad (2.55)$$

$$h(z, t = 0) = zh^{fuel} + (1-z)h^{ox} \quad (2.56)$$

où les exposants *fuel* et *ox* font référence au combustible et au comburant, respectivement. Le profil de température initial, $T(z, t = 0)$, est déduit à partir de la composition locale, $Y_k(z, t = 0)$ et de l'enthalpie $h(z, t = 0)$. Les équations des flammelettes instationnaires sont résolues avec le code *FLAMEMASTER* (Pitsch 1998). La pression et le taux de dissipation scalaire χ_{st} sont supposés indépendants du temps. A titre d'exemple, la figure 2.17 montre à différents instants la solution de la température en fonction de z pour une flammelette représentative de la configuration méthane/air de la flamme de Cabra (Cabra *et al.* 2002; Cabra *et al.* 2005). Le schéma cinétique GRI 3. (Smith *et al.* 1999) qui implique 53 espèces au travers de 341 réactions a été utilisé.

Les variables thermochimiques φ solutions de ces équations instationnaires sont fonctions de la fraction de la mélange, du taux de dissipation scalaire à la stoechiométrie et du temps :

$$\varphi = \varphi(t, z, \chi_{st}) \quad (2.57)$$

Comme proposé précédemment dans le paragraphe 2.3.2 la variable d'avancement de réaction Y_c est substituée au temps t afin de capturer l'auto-allumage.

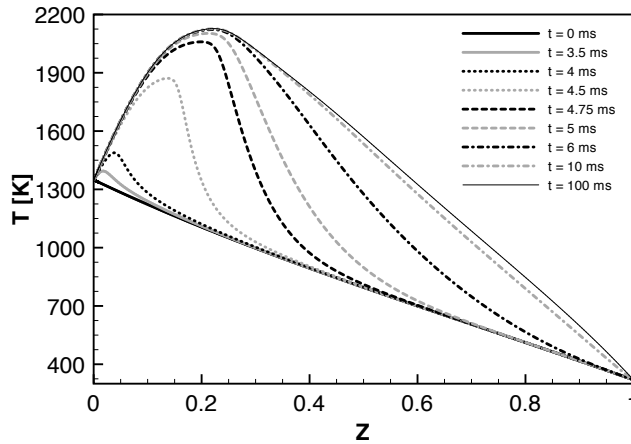


FIGURE 2.17 – Solutions temporelles de la température dans une flammelette représentative de la flamme méthane/air étudiée expérimentalement par Cabra *et al.* (2005). T est tracée en fonction de la fraction de mélange pour une valeur de χ_{st} égale à 30 s^{-1} (Vicquelin 2010).

Les variables thermochimiques s'expriment donc en fonction de la Y_c , z et χ_{st} :

$$\varphi = \varphi(Y_c, z, \chi_{st}) \quad (2.58)$$

La technique de tabulation du terme source $\dot{\omega}_{Y_c}$ décrite dans le paragraphe 2.3.2 est suivie pour éviter les erreurs numériques liées à une mauvaise résolution de la table dans la dimension Y_c . La méthode de tabulation proposée ici pour capturer l'auto-allumage dans des flammes non-prémalangée est nommée "Unsteady flamelet Tabulated Chemistry" (UTaC) (Vicquelin 2010).

Effets de la diffusion différentielle

La structure chimique des flammelettes est influencée par la diffusion différentielle des espèces comme le témoigne la figure 2.18. La température de deux flammelettes stationnaires méthane/air (a) et hydrogène/air (b) est tracée en fonction de z . La fraction de mélange est définie par l'équation 2.15 selon le formalisme proposé par Bilger. Le choix de cette définition qui conserve le lien entre fraction de mélange et rapport combustible/comburant facilite l'analyse des résultats. La projection des points de mesures expérimentales (Cabra *et al.* 2002; Cabra *et al.* 2005) dans le plan (T, z) est ajoutée sur les Figs. 2.18 (a) et 2.18 (b). Etant donné l'effet modéré de la diffusion différentielle sur la structure de la flamme, il est difficile de tirer une conclusion en observant le cas méthane/air. Pour la configuration hydrogène, nous constatons que les données

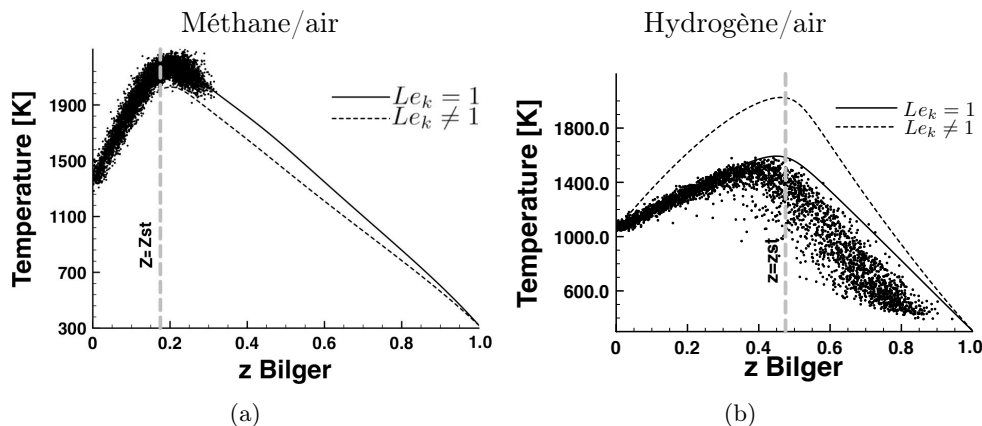


FIGURE 2.18 – Température en fonction de la fraction de mélange définie au sens de Bilger selon l'Eq. 2.15 pour les configurations méthane/air (a) (Cabra et al. 2005) et hydrogène/air (b) (Cabra et al. 2002). Deux flammelettes laminaires stationnaires sont tracées pour $\chi_{st} = 20 \text{ s}^{-1}$. Traits pleins : $Le_k \neq 1$. Traits pointillés : $Le_k = 1$. Les données expérimentales, issues de flammes turbulentes, sont extraites à $x/d = 70d$ pour le cas CH_4/air et à $x/d = 14d$ pour le cas H_2/N_2 , sont représentées par les nuages de points. La position de z_{st} est indiquée par un trait vertical (Vicquelin 2010).

expérimentales coïncident davantage avec les résultats issus de la flammelette calculée avec un nombre de Lewis unitaire que ceux issus d'une simulation qui intègre la diffusion différentielle. Lorsque l'écoulement est turbulent, la modélisation de la zone réactive par un écoulement laminaire où combustible et comburant sont injectés séparément à contre courant est trop simplifiée. En réalité des structures tourbillonnaires pénètrent la couche de mélange et affectent la diffusion des espèces. La présence d'un flux turbulent rapproche la structure de la flamme de celle d'une flammelette résolue sous des hypothèses de Lewis unitaire. Ainsi, il est préférable de négliger la diffusion différentielle des espèces lors de la génération de bases de chimie tabulée destinées à la simulation d'écoulements réactifs turbulents.

Limites de l'approche et perspectives

La méthode présentée ici est une étape intermédiaire vers une modélisation de la cinétique chimique rencontrée dans des régimes de combustion fortement dilués rencontrés réellement, par exemple lors de la combustion sans flamme. La stratégie de tabulation proposée pour modéliser la flamme de Cabra est

adiabatique et ne prend en compte ni la variation du taux de dilution avec le mélange de gaz frais, ni le changement de composition et de température du diluant (Wang *et al.* 2010). Dans les fours industriels, la situation est plus complexe car le nombre de degrés de libertés des états thermochimiques est plus élevé. Les pertes thermiques jouent un rôle prépondérant dans la combustion sans flamme car elles permettent la diminution de la formation des oxydes d'azotes. Plusieurs coordonnées devront alors être ajoutées à la table.

Des études sont actuellement en cours dans ce sens (Lamouroux 2012). Des premiers résultats sont encourageants mais la génération et la gestion des bases de données chimiques deviennent extrêmement complexes. Comme le besoin associé en mémoire vive sera très important, il sera alors probablement nécessaire de réduire la taille des bases de données thermochimiques. Des solutions ont déjà été proposées sur ce point en utilisant des réseaux de neurones (Flemming *et al.* 2005; Ihme *et al.* 2007) ou les propriétés auto-similaires des flammes prémélangées (Ribert *et al.* 2006; Fiorina *et al.* 2009).

La méthodologie présentée ici pour la combustion sans flamme est également adaptée à la combustion dans les moteurs. En effet, la tabulation de la cinétique chimique par des flammelette instationnaires prend en compte les effets diffusifs négligés dans la solution proposée dans le paragraphe 2.3.2. Les dimensions e et ρ doivent alors être ajoutées à la génération de la table en calculant des flammelettes dans des volumes constants (et non à pression constante).

Chapitre 3

Couplage des méthodes de chimie tabulée avec un écoulement

Dans le chapitre précédent, nous avons proposé plusieurs méthodologies pour construire des bases de données thermo-chimiques. Nous abordons maintenant la question du couplage entre ces tables et les équations qui régissent l'écoulement. Le contexte diffère en fonction du système d'équations choisi pour décrire l'écoulement. Deux cas de figures se distinguent. Sous une hypothèse de faible nombre de Mach, les perturbations de nature acoustique sont négligées. La température et la masse volumique peuvent donc être directement extraites d'une table thermo-chimique même si celle-ci ne tient pas compte des variations de pression et d'énergie interne. A l'inverse cette méthodologie ne peut pas être suivie dans une formulation complètement compressible.

Le couplage entre la chimie tabulée et un solveur qui suit une formulation à faible nombre de Mach est tout d'abord abordé dans ce chapitre. A titre d'exemple la simulation d'une flamme laminaire partiellement prémélangée non adiabatique, réalisée en utilisant le modèle FPI implantée dans le code CFX (ANSYS 2010) commercialisé par ANSYS, est présentée. Nous ferons également référence à une flamme turbulente stratifiée résolue dans un contexte de simulation aux grandes échelles par le code instationnaire YALES2 (Moureau *et al.* 2011).

La deuxième partie de ce chapitre aborde la question plus délicate du couplage de la chimie tabulée dans une formulation complètement compressible. Nous proposons la méthodologie TTC (Tabulated Thermo-chemistry for Compressible flows) qui nécessite seulement d'ajouter aux équations de Navier Stokes

une équation par coordonnée de la table thermochimique. La méthode de calcul de la température est décrite dans différentes situations qui dépendent de la dimension des tables. Nous évoquerons sommairement les problématiques des conditions aux limites. Pour plus de détail le lecteur se référera aux travaux de Vicquelin *et al.* (2011). Deux simulations avec des bases de chimie tabulées seront présentées, celle d'un jet turbulent non réactif réalisé avec une table adiabatique et celle d'une machine à compression rapide avec une base non adiabatique.

3.1 Solveur à faible nombre de Mach

3.1.1 Formalisation

Dans de nombreuses configurations, les effets de compressibilité ont peu d'impact sur l'écoulement. Si les phénomènes acoustiques ne font pas l'objet de l'étude, alors l'effet des fluctuations de pression sur la masse volumique et la température du fluide peut être négligé. Cette hypothèse est valide dans le cas d'écoulements à faible nombre de Mach. Plusieurs simplifications peuvent être introduites dans les équations de Navier-Stokes qui permettent entre autres de formuler une équation de Poisson pour la pression sous la forme :

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x_j \partial x_j} = \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial^2 \tau_{ij}}{\partial x_i \partial x_j} \quad (3.1)$$

La résolution de cette équation remplace celle de l'équation de continuité. Comme les ondes acoustiques ne sont pas traitées, l'Eq. 3.1 est résolue à chaque itération afin de propager instantanément les fluctuations de pression dans le domaine de calcul.

Dans cette formulation, les variations de pression n'engendrent pas de fluctuations de la masse volumique. Celle-ci peut donc être directement extraite à partir d'une base thermochimique construite dans des situations isobares. Les hypothèses de faibles nombres de Mach introduisent également des simplifications importantes dans le traitement de l'équation de la chaleur : la dissipation visqueuse et les dérivées spatiales de la pression peuvent être négligés. Ainsi, en définissant l'enthalpie totale (sensible, chimique et cinétique) h_t par :

$$h_t = h + \int_{T_0}^T C_p(T') dT' + \sum_{k=1}^N \Delta h_k^0 Y_k + 1/2 u_i u_i, \quad (3.2)$$

l'équation de conservation de l'enthalpie s'écrit dans une formulation à faible

nombre de Mach :

$$\frac{\partial \rho h_t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_t) = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + \dot{Q} \quad (3.3)$$

où l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire est faite. \dot{Q} est un terme de pertes thermiques volumiques. Dans une formulation à faible nombre de Mach, la résolution de l'équation de l'enthalpie 3.3 n'est nécessaire que si des échanges thermiques sont considérés. Dans le cas d'un écoulement adiabatique, la résolution de cette équation est superflue car les variables thermochimiques φ ne dépendent pas de l'énergie.

Les hypothèses d'écoulements à faible nombre de Mach sont également généralement retenues lors de la génération de la base de données thermochimiques. Ainsi la chimie tabulée est cohérente avec la formulation faiblement compressible retenue pour résoudre l'écoulement réactif. Toutes les grandeurs caractéristiques de la composition du mélange et de son état thermodynamique sont donc estimées à chaque itération par des interpolations linéaires dans la base de chimie tabulée. Dans une situation d'écoulement adiabatique, masse volumique et température sont directement calculées par :

$$\rho = \rho^{tab}(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (3.4)$$

$$T = T^{tab}(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (3.5)$$

Si l'effet des pertes thermiques est considéré, alors la dimension enthalpie h , adaptée aux écoulements à pression constante, est introduite (voir paragraphe 2.3.1). Dans ce cas, la dépendance de la température et de la masse volumique vis à vis de l'enthalpie est incluse dans la table :

$$\rho = \rho^{tab}(h, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (3.6)$$

$$T = T^{tab}(h, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (3.7)$$

L'enthalpie, une entrée de la table, est solution de l'équation de transport 3.3. Les coefficients de transport et les taux de réaction chimiques sont également stockés dans la base. Par exemple, dans des situations non-adiabatiques :

$$\mu = \mu^{tab}(h, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n)$$

$$\lambda = \lambda^{tab}(h, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (3.8)$$

$$c_p = c_p^{tab}(h, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n)$$

$$\dot{\omega}_{\psi_i} = \dot{\omega}_{\psi_i}^{tab}(h, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n)$$

3.1.2 Exemples de calculs chimie tabulée dans des codes à faible nombre de Mach

Flammes laminaires

La formulation à faible nombre de Mach est particulièrement bien adaptée aux flammes laminaires où les vitesses de l'écoulement sont très faibles devant la vitesse du son. Par exemple, les réactifs sont injectés dans un brûleur de gazière ou dans une rampe de chaudière à une vitesse de l'ordre du $m.s^{-1}$ alors que le son sous ces conditions standards se propage à une vitesse de l'ordre de quelques centaines de $m.s^{-1}$. La diversité des échelles de temps associées à ces vitesses caractéristiques pénalise la résolution numérique du problème. En négligeant les propriétés compressibles du fluide, les temps liés à la propagation des ondes acoustiques ne sont plus considérés. Ainsi l'efficacité du calcul est largement augmentée.

la méthodologie FPI décrite dans le paragraphe 2.3.1, est utilisée pour tabuler la chimie à partir d'un ensemble de flammelettes laminaires prémélangées. La table thermochimique est couplée avec le solveur à faible nombre de Mach du code de calcul CFX (ANSYS 2010) en respectant la démarche présentée dans le paragraphe 3.1.1.

La première simulation représente une flamme méthane/air prémélangée laminaire étudiée préalablement par Sommers et Goey (1995). Les parois du brûleur bi-dimensionnel et de la chambre de combustion sont maintenus à une température constante $T_{wall} = 298$ K. Les échanges thermiques entre la flamme et le mur du brûleur sont très importants car ils pilotent la stabilisation de la flamme et sont considérés dans les simulations. Les proportions d'air et de méthane sont stœchiométriques et le mélange frais est injecté à une température égale à 298 K. Le profil de vitesse des gaz frais est parabolique avec un maximum de $1.1 m.s^{-1}$. Cette configuration est particulièrement intéressante étant donné que des phénomènes physiques importants sont présents tels que les transferts de chaleur à la paroi ou encore des effets d'étirements et de courbure sur la structure de la flamme.

Le maillage du domaine, composé de 7000 cellules, est raffiné automatiquement dans le front de flamme. Le schéma cinétique utilisé dans ce calcul a été proposé par Coffee (1984) et inclut 14 espèces intervenant dans 38 réactions. Il a également été utilisé pour construire la base de données FPI non-adiabatique.

Une comparaison entre les résultats obtenus par le modèle FPI et la chimie complexe est présentée sur la figure 3.1. La moitié gauche (A) de chaque figure représente la solution du calcul en chimie détaillée tandis que le côté droit (B) montre le résultat du modèle FPI. Nous rappelons que, dans les calculs avec le

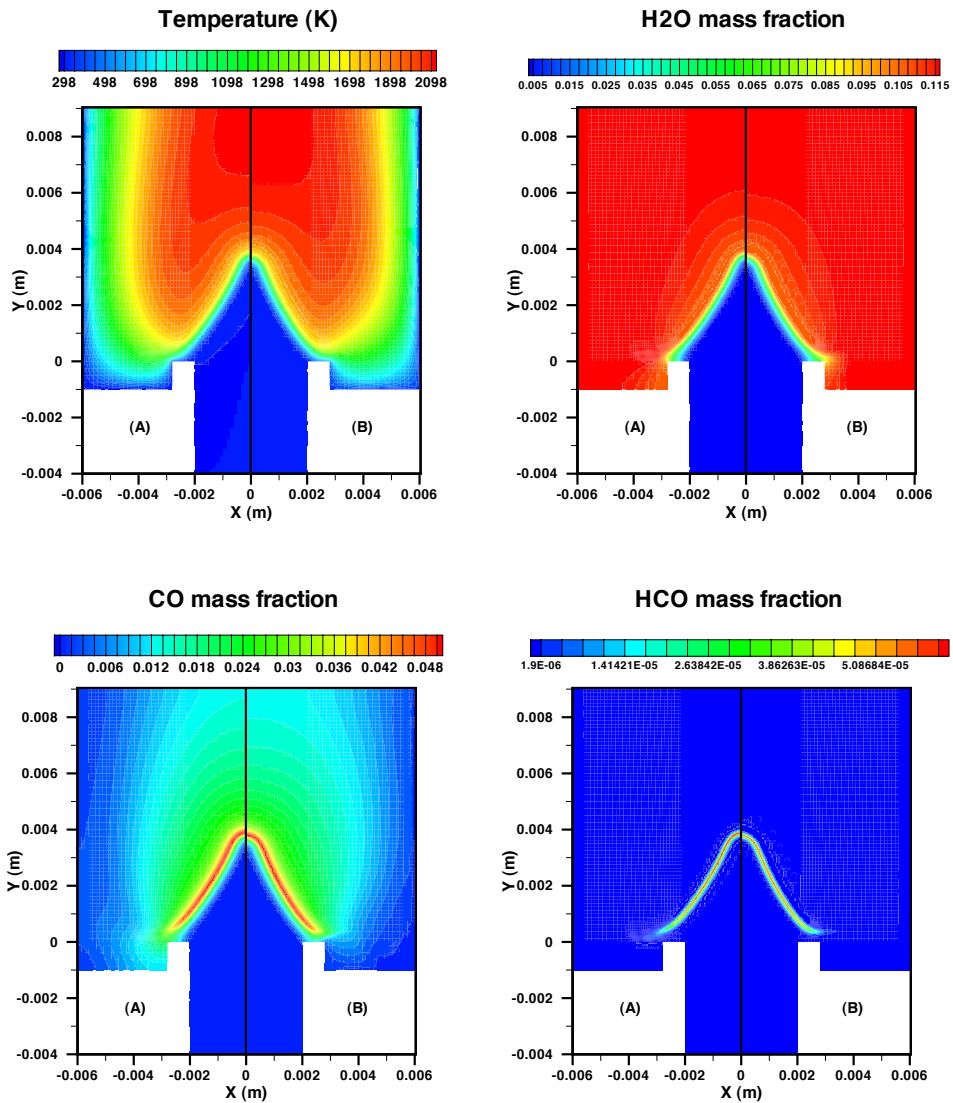


FIGURE 3.1 – Isocontours de la température et des fractions massiques des espèces H_2O , CO et HCO pour le cas prémélangé (configuration N°1) calculé sous l'hypothèse d'une chimie détaillée (A) et en utilisant le modèle FPI (B) (Fiorina et al. 2003)

modèle FPI, la température ainsi que les fractions massiques d'espèces (ici HCO et CO) ne sont pas directement résolues par le code de CFD mais obtenues par

un post-traitement qui nécessite seulement les valeurs des coordonnées, c'est à dire ici l'avancement de la réaction $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO}$, la fraction de mélange z (constante dans ce cas particulier) et l'enthalpie sensible et chimique h . Cette comparaison montre que les caractéristiques principales de la flamme telles que la position axiale du front de flamme ($H \simeq 4 \text{ mm}$), l'épaisseur de la zone de réaction ($\delta \simeq 0.2 \text{ mm}$) ou le niveau maximal de température ($T_{max} \simeq 2100 \text{ K}$) sont bien reproduites. Les espèces minoritaires, comme par exemple le radical HCO visible sur la figure 3.1, sont également bien estimées. Enfin, comme la base thermochimique est non-adiabatique, l'influence de la paroi froide est capturée, ce qui permet de reproduire le mécanisme de stabilisation de la flamme au nez du brûleur prédit par la simulation chimie complexe.

Deux autres simulations de systèmes de combustion laminaires sont présentées sur la figure 3.2. Il s'agit de calculs d'un brûleur de cuisson et d'un calorimètre réalisés au Centre de Recherche et d'Innovations sur le Gaz et les Energies Nouvelles de GDF-SUEZ. Ces simulations numériques témoignent de l'utilité de ce modèle pour prédire la combustion de systèmes laminaires dans des géométries complexes en tenant compte de la chimie détaillée. Le détail de la modélisation et des simulations présentées dans ce paragraphe est disponible dans Fiorina *et al.* (2003) et Fiorina (2004).

Flammes turbulentes

Un deuxième exemple d'utilisation de la chimie tabulée pour la simulation d'écoulements réactifs à faibles nombres de Mach est présenté. La chimie tabulée est introduite dans le code de simulation aux grandes échelles YALES2 (Moureau *et al.* 2011) en suivant le formalisme F-TACLES (Filtered Tabulated Chemistry for LES) qui sera décrit ultérieurement dans le chapitre 4.

Cette méthodologie a été suivie pour simuler la flamme turbulente stratifiée TSF-A (Turbulent Stratified Flame, case A) étudiée expérimentalement à l'Université de Darmstadt (TUD) (Seffrin, Fuest, Geyer, et Dreizler 2010). Une visualisation instantanée du front de flamme est présentée sur la figure 3.3. La simulation numérique et les mesures expérimentales indiquent que la flamme turbulente est légèrement décollée des lèvres du brûleur. Ce phénomène, lié aux échanges thermiques entre l'écoulement et les parois du brûleur, est capturé par la dimension enthalpie de la base de données thermochimiques (Mercier *et al.* 2012).

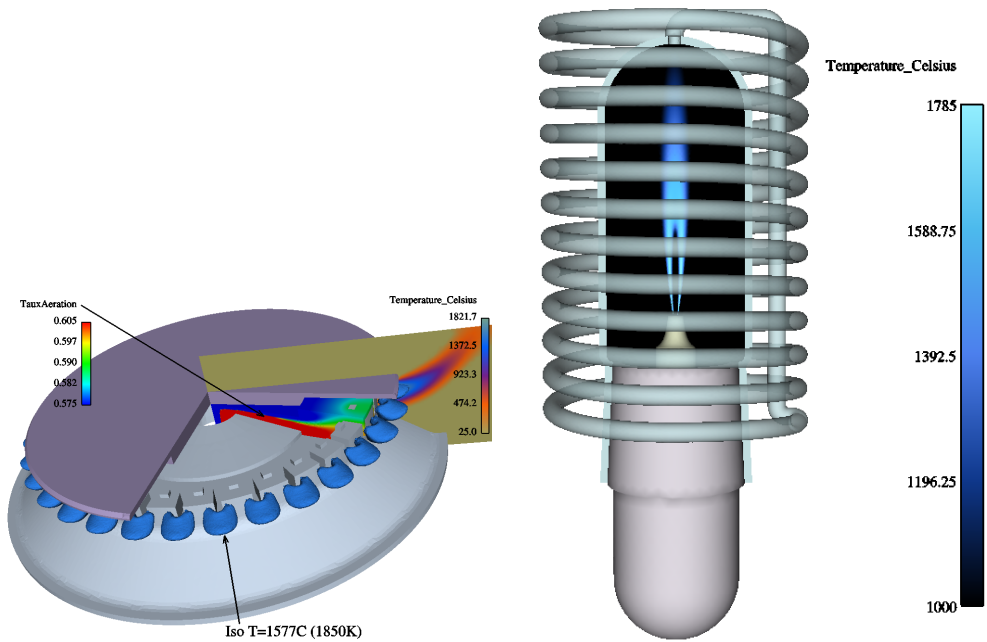


FIGURE 3.2 – Exemples d’application de la chimie tabulée pour la prédiction de flammes laminaires. La figure de gauche montre la simulation 3-D d’un secteur de brûleur de cuisson et celle de droite le calcul 2-D axisymétrique d’un calorimètre. Les champs de température sont présentés (Fiorina 2004) .

3.2 Mise en oeuvre de la chimie tabulée pour des codes compressible : méthode TTC (Tabulated Thermo-chemistry for Compressible flows)

3.2.1 Problématique

Pour comprendre les difficultés liées au couplage d’une base de chimie tabulée avec un code compressible, il est utile de considérer l’ensemble des équations résolues. Un solveur compressible résout les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l’énergie :

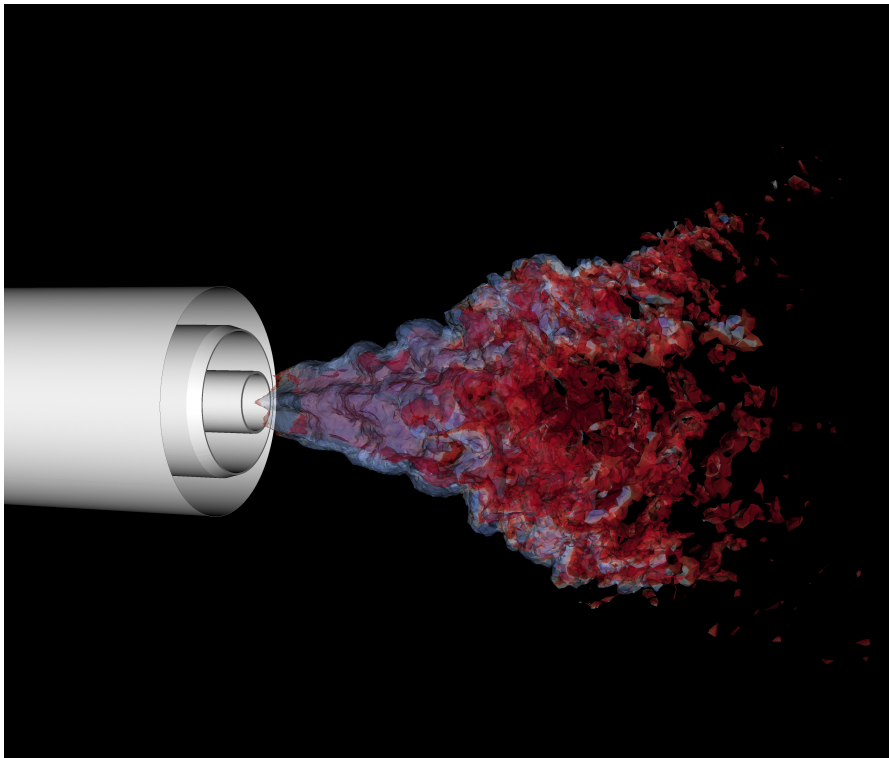


FIGURE 3.3 – *Flamme turbulente stratifiée résolue par le code à faible nombre de Mach YALES2 et une modélisation de la combustion turbulente basée sur la chimie tabulée. Deux isosurfaces du champ de température sont tracées (Mercier et al. 2012).*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j e_t) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + \\ &\frac{\partial}{\partial x_j} ((\tau_{ij} - P\delta_{ij}) u_i) + \dot{Q} \end{aligned} \quad (3.11)$$

où τ_{ij} est le tenseur des contraintes visqueuses. L'équation d'énergie totale (sensible, chimique et cinétique) du mélange $e_t = e + u_i u_i / 2$ est écrite ici en négligeant la diffusion différentielle des espèces chimiques. L'énergie e (sensible

et chimique) du mélange est définie par la relation :

$$e = \sum_{k=1}^N \int_{T_0}^T C_{vk}(T') Y_k dT' - \frac{RT_0}{W} + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 Y_k \quad (3.12)$$

La pression est calculée à la partir de la loi d'état écrite sous l'hypothèse d'un gaz parfait :

$$P = \rho r T \quad (3.13)$$

Dans une formulation chimie tabulée, les équations de transport des espèces chimiques ne sont pas résolues. Elles sont remplacées par des équations de conservation additionnelles qui permettent d'estimer les coordonnées ψ_l . Les équations de transport de ces coordonnées s'expriment sous la forme :

$$\frac{\partial \rho \psi_l}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \psi_l) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial \psi_l}{\partial x_j} \right) + \rho \dot{\omega}_{\psi_l} \quad (3.14)$$

La diffusion des espèce est ici décrite par la loi de Fick sous l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire ($\rho D = \lambda / C_p$).

Penchons nous sur les dépendances entre les variables d'état et la base thermo-chimique. La pression est estimée à partir de la loi d'état du gaz (Eq. 3.13) qui fait intervenir ρ , r et T . ρ est solution de l'équation de continuité (Eq. 3.9). La variable $r = R/M$ qui dépend uniquement de la composition du mélange peut être estimée directement à partir de la base de chimie tabulée par la relation :

$$r = r(e, \rho, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (3.15)$$

Dans des situations où la chimie est peu affectée par les échanges thermiques et par les variations de pression, les dépendances de r vis à vis de e et ρ peuvent être négligées. Dans ces situations r peut être estimée à partir d'une table adiabatique isobare par :

$$r \approx r^{tab}(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (3.16)$$

Les mêmes hypothèses ne pourront cependant pas être émises pour estimer la température. En effet, dans une formulation compressible, les ondes de pressions d'origines acoustiques vont, en se propageant, entraîner des variations d'énergie interne et donc de température (même si la cinétique chimique n'est pas affectée par les variations de pression et d'énergie). La température s'exprime donc dans tout système compressible :

$$T = T(e, \rho, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (3.17)$$

La prise en compte des effets compressibles ajoute donc des degrés de liberté au système thermodynamique et complique donc sa tabulation. Si on compare avec

une formulation à faible nombre de Mach adiabatique isobare, la formulation compressible introduit deux nouveaux degrés de liberté au système thermodynamique qui sont par exemple les couples (e, p) ou (e, ρ) . Même si l'écoulement ne rayonne pas et n'échange pas de chaleur avec l'extérieur, son énergie interne changera localement à composition constante à cause de la présence d'ondes de pression dans le domaine.

Des méthodes ont été présentées dans le chapitre précédent pour construire des tables thermochimiques qui peuvent soit tenir compte des variations d'énergie et de pression (par exemple par les coordonnées e et ρ comme indiqué dans le paragraphe 2.3.2), soit seulement des variations d'énergie (via e ou h comme pour la méthode FPI non-adiabatique présentée dans le paragraphe 2.3.1) ou bien ni de l'une, ni de l'autre (comme pour la méthode FPI adiabatique présentée dans paragraphe 2.3.1). La stratégie de couplage de la base avec l'écoulement dépendra donc des hypothèses émises lors de la construction de la table thermochimique.

La méthode TTC (Tabulated Thermochemistry for Compressible flows) est proposée pour introduire la chimie tabulée dans les écoulements compressibles. Trois configurations qui diffèrent par la prise en compte ou non des variations d'énergie et de pression lors de la génération de la base chimique sont étudiées.

3.2.2 Formulation TTC pour une table non-adiabatique qui tient compte des variations de pression

L'effet des variations de pressions sur la cinétique chimique est particulièrement important dans la simulation d'écoulements fortement compressibles. Ces régimes sont rencontrés par exemple dans une chambre à volume variable ou dans un moteur hypersonique (Superstatoréacteur). Un exemple de tabulation de ce type de système thermochimique a été proposé dans le paragraphe 2.3.2 où la base thermochimique capture à l'aide des dimensions ρ et e les effets compressibles. Dans ce cas, comme tous les degrés de liberté sont couverts par les dimensions de la table, l'évaluation de la température est directe :

$$T = T^{tab}(e, \rho, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (3.18)$$

Grâce aux dimensions ρ et e , le nombre de degrés de libertés couverts par la table thermochimique est suffisamment grand pour capturer les variations de température induites par des variations de pression (par exemple dans des ondes acoustiques ou lors de la compression d'une chambre de moteur à combustion interne). Les autres grandeurs thermochimiques φ , dont notamment les taux de réaction $\dot{\omega}_{\psi_l}$ sont également extraites par des interpolations linéaires dans

la base :

$$\varphi = \varphi^{tab}(e, \rho, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (3.19)$$

Pour illustrer cette situation, une table thermochimique non-isobare est construite pour décrire l'auto-allumage à volume constant d'un mélange stoechiométrique n - C₇H₁₆ / air en utilisant la méthodologie décrite dans le paragraphe 2.3.2. La base de données chimique qui tient compte des importantes variations de pression qui influencent la cinétique chimique de la combustion est couplée au code compressible AVBP. La température ainsi que les variables thermochimiques φ sont estimées en utilisant les relations 3.18 et 3.19 à chaque itération. Les résultats de la simulation AVBP-TTC sont tracés en traits pleins sur la figure 3.4 et comparés avec une solution de référence obtenue sous des hypothèses de chimie complexe (symboles) pour deux conditions initiales de température différentes. Dans les deux situations, un bon accord est observé entre la solution chimie complexe et la solution chimie tabulée.

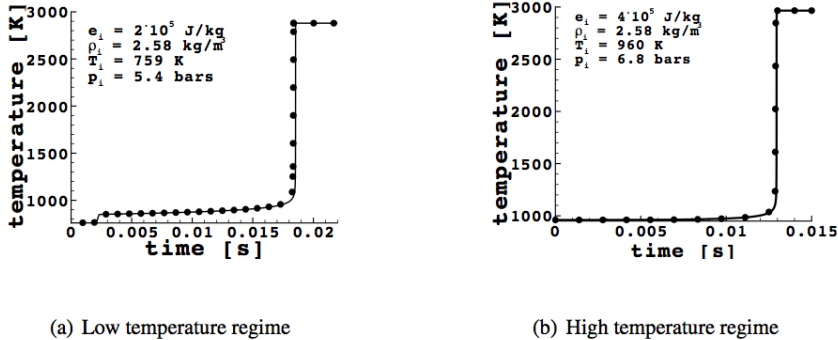


FIGURE 3.4 – *Simulation du phénomène d'allumage dans un réacteur homogène à basse (gauche) et haute (droite) températures. La solution chimie tabulée (symboles) est comparée à une solution de référence (traits pleins) obtenue avec un schéma cinétique détaillé (Tudorache et al. 2011).*

3.2.3 Formulation TTC pour une table non-adiabatique isobare

Dans certaines configurations les pertes thermiques peuvent être conséquentes mais les variations de pression faibles. Si ces dernière restent de l'ordre de grandeur des variations de pression observées dans une onde acoustique, alors les taux de réactions des espèces chimiques se sont pas affectés. Les fractions massiques des espèces peuvent être extraites d'une table construite sous des

hypothèses isobares :

$$Y_k = Y_k(e, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad \text{avec} \quad P = cst \quad (3.20)$$

L'introduction des dépendances aux coordonnées de la table dans l'équation 3.12 qui définit e , permet de réduire les degrés de liberté de la température : $T = T(e, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n)$. L'évaluation de la température peut dans ces conditions se faire directement en interpolant dans une base de chimie tabulée isobare mais non-adiabatique :

$$T = T^{tab}(e, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (3.21)$$

3.2.4 Formulation TTC pour une table adiabatique isobare

Intéressons-nous aux situations où les pertes thermiques sont modérées et où les variations de pression sont principalement d'origine acoustique et n'influencent pas la cinétique chimique. Dans ces situations, une table adiabatique générée à pression constante capture bien l'évolution chimique de la chambre de combustion. Les taux de réaction ne sont pas influencés significativement par des variations de pression et d'énergie d'amplitudes faibles. Cependant la température ne peut pas être directement interpolée dans la base de données. Cela impliquerait de la supposer indépendante de la pression et de l'énergie, ce qui est incompatible avec la formulation compressible. Le mécanisme de propagation des ondes acoustiques serait faussé. Ainsi :

$$T \neq T^{tab}(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \quad (3.22)$$

Il est possible d'ajouter une dimension énergie à la base de données afin de construire une table non-adiabatique isobare (cette solution est décrite dans le paragraphe 3.2.3). Mais l'effort et les coûts informatiques supplémentaires à apporter pour ajouter une dimension se sont pas justifiés si les échanges thermiques restent limités dans la configuration étudiée.

Une solution pour calculer la température est d'approcher la composition du mélange par un nombre réduit d'espèces (Galpin *et al.* 2008). Une équation de transport pour chaque espèces chimique sélectionnée est résolue en plus des équations de Navier-Stokes et des variables ψ_i . Cette solution demande peu d'efforts dans un code de CFD et se greffe facilement à une implantation multi-espèce existante. Cependant pour la combustion du méthane et de l'air, au moins huit espèces chimiques (CH_4 , O_2 , CO_2 , H_2O , CO , H_2 , H , N_2) sont nécessaires pour estimer correctement la température. Le coût supplémentaire engendré est donc très important. Comme certaines espèces sont transportées et d'autres tabulées, la conservation de la masse et de la composition atomique n'est alors pas assurée. Des traitements spécifiques des taux de réaction sont nécessaires pour assurer la réalisabilité du modèle. Une solution différente pour

estimer la température est proposée par Vicquelin *et al.* (2011) afin d'éviter le transport d'espèces chimiques supplémentaires.

La difficulté du couplage est liée à la différence entre les valeurs transportées de l'énergie e et de la température T de leurs valeurs tabulées : e^{tab} and T^{tab} . Cette différence $\Delta e = e - e^{tab}(\psi_1, \dots, \psi_n)$ entre les énergies transportées et tabulées s'écrit :

$$\begin{aligned} \Delta e = & \left(\int_{T_0}^T C_v(T') dT' - \frac{RT_0}{W} + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 Y_k \right) \\ & - \left(\int_{T_0}^{T^{tab}} C_v(T') dT' - \frac{RT_0}{W^{tab}} + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 Y_k^{tab} \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Si les échanges thermiques et les fluctuations de pression restent faibles,¹ la composition et la masse molaire sont correctement estimées à partir de la table adiabatique isobare :

$$\begin{aligned} Y_k &= Y_k^{tab}(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \\ W &= W^{tab}(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n) \end{aligned}$$

Ainsi la différence Δe est :

$$\begin{aligned} \Delta e &\approx \int_{T^{tab}(\psi_1, \dots, \psi_n)}^T C_v(T') dT' \\ &= \int_{T^{tab}(\psi_1, \dots, \psi_n)}^T \left(C_v(T^{tab}) + \frac{\partial C_v}{\partial T}(T^{tab})(T' - T^{tab}) + \dots \right) dT' \end{aligned}$$

où la fonction $C_v(T')$ est approchée par un développement limité autour de T^{tab} . En supposant que C_v est constant dans l'intervalle de température $[T^{tab}, T]^2$, seul le premier terme de la série de Taylor est conservé :

$$e - e^{tab}(\psi_1, \dots, \psi_n) \approx C_v^{tab}(\psi_1, \dots, \psi_n) (T - T^{tab}(\psi_1, \dots, \psi_n)) \quad (3.24)$$

La température "compressible" T peut donc être approchée à partir des valeurs tabulées de la température et de l'énergie, T^{tab} et e^{tab} , et de l'énergie transportée $e = e_t - u_i u_i / 2$:

$$T = T^{tab}(\psi_1, \dots, \psi_n) + \frac{e - e^{tab}(\psi_1, \dots, \psi_n)}{C_v^{tab}(\psi_1, \dots, \psi_n)} \quad (3.25)$$

Cette hypothèse est valide dans le cas de faibles perturbations acoustiques mais

1. Cette hypothèse est vraie seulement dans le cas d'écoulements faiblement compressibles et ne peut pas être appliquées à des écoulements avec chocs.

2. En pratique la variation de température due aux ondes acoustiques est limitée à un faible intervalle (de l'ordre de 10 K pour 160 dB!) où les propriétés thermodynamiques comme la capacité calorifique restent constantes.

n'est plus réaliste pour des écoulement fortement compressibles où des ordres d'approximation plus élevés devraient être retenus.

La formulation du calcul de la température (Eq. 3.25) pour des écoulements compressibles est validée tout d'abord dans un milieu non réactif et mono-espèce. Réalisons pour cela le calcul d'une onde acoustique se propageant dans un domaine périodique de longueur $L = 0.005$ m et dans de l'oxygène pur sous la pression atmosphérique. La solution initiale de l'onde est donnée par :

$$\begin{aligned} u &= \pm A \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{d^2}\right), P = P_0 + \rho_0 a_0 u \\ \rho &= \rho_0 + \frac{\rho_0}{a_0} u, \quad T = \frac{P}{\rho r} \end{aligned} \quad (3.26)$$

où $\rho_0 = 0.24$ kg/m³ et $a_0 = 734.6$ m/s sont la masse volumique et la vitesse du son de référence. Le signe de la vitesse est choisi afin que les ondes se propagent dans le sens positif de la direction spatiale x . L'évolution temporelle de la température à $x = 0$, située à l'extrémité gauche du domaine périodique, est tracée sur la Fig. 3.5(d).

Les mêmes évolutions de température, pression, vitesse et masse volumique sont observées pour les solutions chimie tabulée et la solution de référence obtenue par la version multi-espèces du code AVBP. Ce résultat montre que l'estimation de la température proposée par l'Eq. 3.25 n'affecte pas la prédiction de l'acoustique de l'écoulement.

LES d'un jet 3-D non réactif

La méthode TTC pour une table adiabatique isobare est utilisée pour simuler un jet non réactif introduit dans un écoulement d'air vicié (Cabra *et al.* 2005). Le jet, de vitesse moyenne 100 m/s, a un diamètre à sa base de 4.57 mm. La vitesse de l'écoulement d'air vicié est 5.4 m/s. Deux simulations aux grandes échelles de l'écoulement sont conduites. La première résout une formulation multi-composants où les espèces CH₄, O₂, H₂O, CO₂ et N₂ sont transportées sans considérer la cinétique chimique. Cette simulation fait office de référence. Une seconde simulation est conduite où les données thermochimiques sont tabulées en fonction d'une seule variable, la fraction de mélange définie par $z = 1$ dans l'écoulement du jet et $z = 0$ dans l'écoulement co-courant d'air vicié. Seul le calcul du mélange est donc étudié dans ce cas. L'objectif de cette étude est d'estimer la viabilité de la relation 3.25 pour estimer la température dans un contexte 3-D LES et de valider le traitement des conditions aux limites. Une visualisation instantanée de l'iso-surface de la fraction de mélange obtenue par la méthode de chimie tabulée est présentée sur la Fig. 3.6.

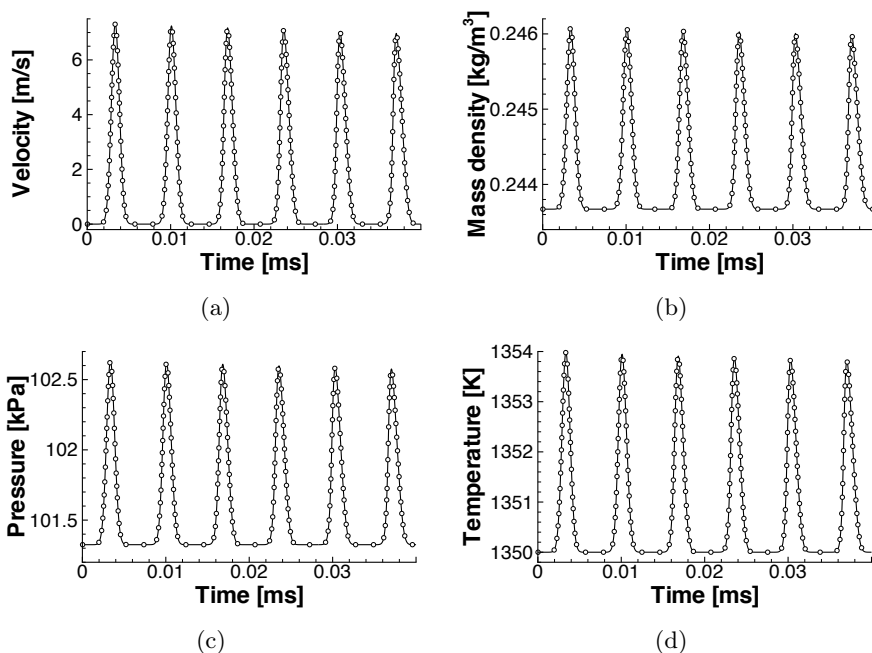


FIGURE 3.5 – Simulation de la propagation d’une onde acoustique. Variations temporelles à $x = 0$ de la vitesse (a), la masse volumique (b), la pression (c) et la température (d). La solution initiale est paramétrée par $A = 0.01a_0$, $d = 5 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ et $x_0 = 0.0025 \text{ m}$. Symboles : solution multi-espèces. Ligne : solution chimie tabulée (Vicquelin et al. 2011).

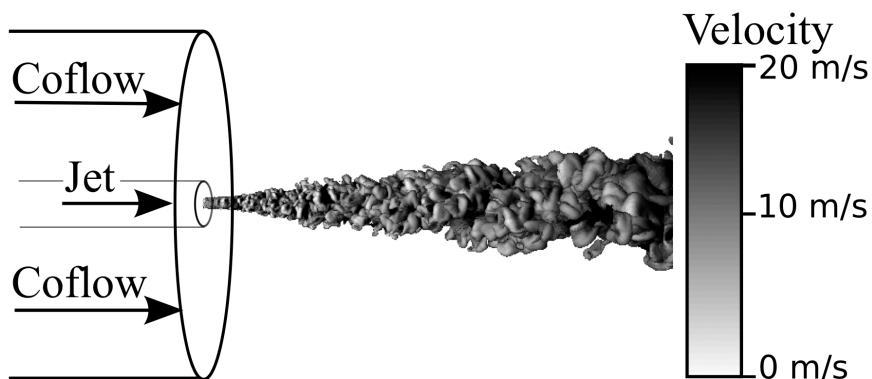


FIGURE 3.6 – Iso-surface de la fraction de mélange $z = 0.1$ dans un jet 3-D non réactif (Vicquelin et al. 2011).

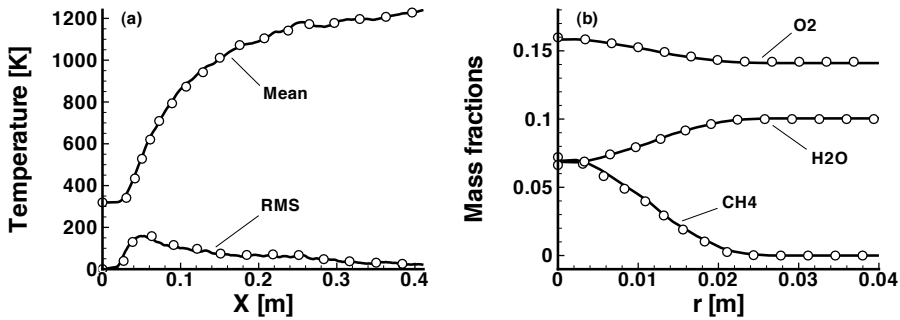


FIGURE 3.7 – Simulation LES avec une formulation multi-espèces (symboles) et chimie tabulée (ligne). (a) Moyenne axiale et écart type du profil de température. (b) Profils radiaux des fractions massiques moyennes des espèces extraits à la distance axiale $X = 30d$ (Vicquelin et al. 2011).

Les grandeurs moyennes et les écarts types de la température ainsi que les moyennes des fraction massiques d'espèces sont comparés sur la Fig. 3.7(a). Les solution multi-espèces sont identiques aux solutions obtenues par le formalisme TTC. Des grandes différences auraient été observées entre les deux simulations sans une évaluation de la température cohérente avec la formulation compressible. Des plus des artéfacts numériques dégradent la solution numérique si le formalisme NSBC n'est pas adapté à la chimie tabulée comme nous le précisons dans le paragraphe 3.2.5.

Flamme 1-D prémélangée

Une simulation avec combustion est maintenant proposée, également avec une table thermochimique adiabatique isobare. L'objectif est de simuler une flamme 1-D prémélangée laminaire avec une méthode de chimie tabulée en utilisant un solveur compressible. Une solution de référence avec chimie détaillée est calculée avec le code PREMIX (Kee et al. 1992) pour un mélange stoechiométrique de méthane et d'air. La même configuration est simulée avec le modèle FPI en utilisant le code AVBP. Les solutions numériques sont comparées sur la Fig. 3.8.

Les fractions massiques d'espèces et la température concordent parfaitement, ce qui démontre les performances de l'approche TTC. Notons que la simulation diverge rapidement d'une solution réaliste si la température était imposée directement par la table isobare adiabatique. Le profil de pression obtenu par la simulation AVBP / TTC n'est pas constant. En effet, la formulation compressible permet de tenir compte des pertes de pression dans la flamme laminaire.

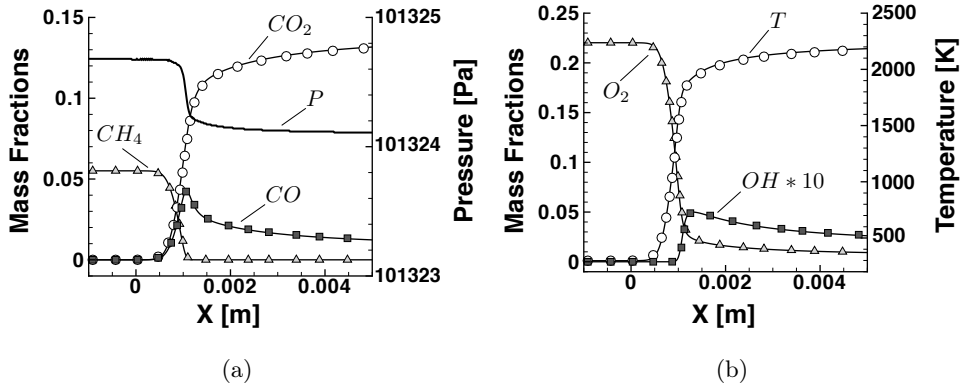


FIGURE 3.8 – Fractions massiques et température dans une flamme 1-D pré-mélangée stoechiométrique méthane / air. Symboles : solution chimie détaillée issue du code PREMIX (Kee et al. 1985). Ligne : solution chimie tabulée (TTC) (Vicquelin et al. 2011).

La simulation prédit $\Delta P = -0.59 Pa$ alors qu'un calcul analytique en négligeant les pertes visqueuses des variations de quantité de mouvement indique une variation très proche, égale à $\Delta(\rho u^2) \approx 0.58 Pa$.

3.2.5 Traitement des conditions aux limites

Le traitement des conditions aux limites dans un code de CFD est délicat en particulier lorsque l'écoulement est instationnaire et compressible. La méthode NSCBC (Navier Stokes Characteristic Boundary Conditions) a été proposée pour des écoulements mono-espèce (Poinsot et Lele 1992) puis multi-espèces (Baum et al. 1995). Dans la formulation multi-composants, les N_{sp} équations de transport des fractions massiques d'espèces qui caractérisent la composition du mélange sont décomposées en N_{sp} ondes caractéristiques. La valeur de ces ondes est prescrite en fonction des conditions aux frontières du domaine de calcul. Dans un contexte de chimie tabulée, les N_{sp} équations d'espèces ont été remplacées par n équations pour les variables ψ_l , coordonnées de la base de données thermo-chimique. Le formalisme TTC nécessite la décomposition en ondes caractéristiques des équations de Navier Stokes et des équations associées aux variables ψ_l . L'écriture des conditions NSCBC dans le formalisme TTC est détaillée dans Vicquelin et al. (2011). De nombreux cas de validations sont présentés qui démontrent l'efficacité de la méthode.

3.3 Conclusion

Des méthodes d'implantation ont été proposées dans ce chapitre afin de coupler une base thermochimique avec un code de CFD. Les approches diffèrent en fonction des hypothèses retenues lors du développement du code pour résoudre l'écoulement mais aussi en fonction des dimensions couvertes par la table. Elles sont suffisantes pour réaliser des simulation numériques directes (DNS) d'écoulements turbulents ou laminaires. Par contre dans le cas de simulations RANS ou LES, les modèles de combustion turbulente doivent être adaptés pour accueillir ce formalisme. Cette problématique est l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 4

Chimie tabulée et turbulence

Le formalisme proposé dans le chapitre précédent permet d'utiliser la chimie tabulée pour la simulation d'écoulements laminaires. Il peut être également appliqué aux écoulements turbulents mais seulement dans le cadre de Simulations Numériques Directes (ou DNS, Direct Numerical Simulation). En effet, son intégration aux méthodes RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) ou LES (Large Eddy Simulation) est plus complexe car la chimie tabulée intervient au cœur des modèles de combustion turbulente. Ces modèles doivent être adaptés pour accueillir la tabulation de la cinétique chimique.

Certaines stratégies de modélisation de la combustion turbulente sont basées sur la résolution numérique des évolutions statistiques de l'écoulement turbulent. Nous pouvons mentionner à titre d'exemple le transport de fonctions de densité de probabilité (Haworth 2010) ou la résolution d'équations pour les moyennes conditionnées (Bilger 1993). Ces techniques, bien que conceptuellement intéressantes, sont cependant très coûteuses et difficilement utilisables dans des géométries complexes. Une autre solution est de présumer *a priori* les propriétés statistiques de la turbulence. Cette approche, beaucoup moins coûteuse en temps de calcul et donc facilement transférable dans un contexte industriel, sera choisie pour développer des modèles de combustion turbulente basés sur une cinétique chimique tabulée.

Les outils mathématiques communs aux approches RANS et LES sont présentés dans la première partie de ce chapitre. Une stratégie de modélisation RANS illustrée par des exemples d'application et ensuite présentée. La troisième partie de ce chapitre aborde la question de l'introduction de la chimie tabulée dans la simulation aux grandes échelles. Une méthodologie appelée F-TACLES (Filtered Tabulated Chemistry for LES) est proposée pour la simulation de plusieurs configurations.

4.1 Définition des outils

4.1.1 Variables thermochimiques moyennées et filtrées

L'approche RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) consiste à résoudre les grandeurs moyennes de l'écoulement. Historiquement, pour des raisons de temps de calcul, cette approche a été utilisée pour réaliser les premières simulations d'écoulements réactifs turbulents (Veynante et Vervisch 2002; Poinso et Veynante 2005). Naturellement, les premiers modèles de combustion turbulente qui intègrent une chimie tabulée ont été proposées également dans un contexte RANS (Peters 1986; Bradley *et al.* 1988). Dans le formalisme RANS, les grandeurs thermochimiques φ caractéristiques de l'écoulement sont séparées en une quantité moyenne $\bar{\varphi}$ et une quantité fluctuante φ' selon la relation : $\varphi = \bar{\varphi} + \varphi'$ où la notation $\bar{\varphi}$, appelé moyenne de Reynolds, indique une moyenne d'ensemble.

Dans les approches LES, les grandes structures turbulentes sont résolues numériquement tandis que les plus petites échelles sont modélisées. En comparaison avec le RANS, la LES capture davantage d'informations sur la physique de l'écoulement, dont en particulier les phénomènes instationnaires. L'utilisation de la LES pour la simulation d'écoulements réactifs est apparue plus tard car elle a été nécessitée beaucoup plus de puissance informatique que les méthodes RANS.¹ Ainsi, les premières simulation LES de flamme turbulentes qui suivent un formalisme de chimie tabulée sont récentes (Pitsch et Steiner 2000; Pierce et Moin 2004). Dans le formalisme LES, les variables thermochimiques φ sont filtrées dans l'espace physique, ce qui correspond à une moyenne pondérée dans le volume du filtre. Les variables thermochimiques filtrées dans un volume V sont ainsi définies par :

$$\bar{\varphi}(\mathbf{x}) = \iiint_V F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \varphi(\mathbf{x}') d\mathbf{x}', \quad (4.1)$$

où F est une fonction filtre normalisée par la relation $\iiint_V F(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' = 1$. La même notation $\bar{\varphi}$ désignera par la suite une moyenne d'ensemble dans une formulation RANS et un filtrage spatial dans une formulation LES. Dans les écoulements à densité variable, il est commode de pondérer par la masse volumique les opérateurs moyenne et filtre. Nous définissons la valeur moyenne ou filtrée au sens de Favre de la variable φ :

$$\tilde{\varphi} = \frac{\overline{\rho\varphi}}{\bar{\rho}} \quad (4.2)$$

1. Le rapport de temps CPU entre les simulations 3-D LES et 2-D RANS de la flamme mesurée par Cabra *et al.* (2005) est d'environ 50000 (voir travaux de thèse de Vicquelin (2010)).

ainsi que les fluctuations φ'' :

$$\varphi = \tilde{\varphi} + \varphi'' \quad (4.3)$$

Que ce soit dans un contexte RANS ou LES, l'enjeu en terme de modélisation est d'estimer les variables moyennées ou filtrées qui caractérisent l'écoulement réactif. D'après Vervisch et Veynante (2000), trois voies peuvent être empruntées pour y parvenir : la limitation par le mélange turbulent, l'approche statistique ou l'analyse géométrique. Les modèles basés sur le mélange turbulent supposent que la cinétique chimique de la combustion est suffisamment rapide devant les échelles de temps caractéristiques de l'écoulement. Ils ne sont intrinsèquement pas adaptés à la prise en compte d'une chimie complexe. L'analyse géométrique consiste à identifier le front de flamme comme une surface géométrique qui peut représenter soit le front d'une flamme prémélangée (Peters 2000; Pitsch 2006) ou, pour les flammes non-prémélangées, une iso-surface caractéristique des conditions stœchiométriques (Van-Kalmthout et Veynante 1998). Finalement la dernière approche possible est de décrire les grandeurs thermo-chimiques par une formulation statistique en faisant intervenir des fonctions de densité de probabilité. Dans les approches géométriques, les informations sur la chimie sont généralement concentrées dans des quantités globales comme par exemple la vitesse de propagation d'une flamme laminaire. L'intégration d'une chimie complexe n'y est généralement pas simple. Selon Lecocq *et al.* (2011) l'introduction de la chimie tabulée dans une modélisation basée sur la résolution d'une équation pour la densité de surface de flamme est possible à condition qu'elle soit combinée avec une formulation statistique. En effet comme nous allons le montrer dans les paragraphes suivants, cette formulation fait apparaître explicitement la dépendance des variables thermo-chimique aux coordonnées de la base de chimie tabulée.

4.1.2 Fonction de densité de probabilité (PDF) et fonction de densité de filtre (FDF)

Dans le formalisme de la chimie tabulée, les variables thermo-chimiques φ s'expriment par exemple :

$$\varphi = \varphi(e, \rho, \psi_1, \dots, \psi_n) \quad (4.4)$$

La fonction de densité de probabilité jointe (PDF pour Probability Density Function) $\bar{P}(\psi_i^*)$ quantifie la probabilité de trouver à une position et à un instant donnés, la variable ψ_i^* dans l'intervalle $[\psi_i^* - \Delta\psi_i^*/2, \psi_i^* + \Delta\psi_i^*/2]$ (Peters 1984; Pope 1985; Veynante et Vervisch 2002; Haworth 2010). Dans le cadre de la chimie tabulée, lorsque plus d'une variable est utilisée pour caractériser les grandeurs thermo-chimiques, la PDF jointe $\bar{P}(e, \rho, \psi_1, \dots, \psi_n; \mathbf{x}, t)$ est introduite.

Les grandeurs moyennes ou filtrées s'expriment à partir de la PDF jointe par la relation :

$$\bar{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \int_e \int_\rho \int_{\psi_1} \dots \int_{\psi_n} \varphi(e, \rho, \psi_1, \dots, \psi_n) \bar{P}(e, \rho, \psi_1, \dots, \psi_n; \mathbf{x}, t) de, d\rho, d\psi_1, \dots, d\psi_n \quad (4.5)$$

Les fonctions de densité de probabilité sont des outils mathématiques qui sont utilisés à la fois dans les approches RANS et LES. Leurs significations physiques sont cependant sensiblement différentes dans les deux contextes. En RANS, elles représentent la distribution statistique au cours du temps en un point donné. En LES elles représentent la distribution instantannée (pondérée) dans le volume du filtre. Pour les différencier, nous utiliserons la terminologie PDF (Probability Density Function) pour les applications RANS et FDF (Filtered Density Function) pour les applications LES. En utilisant la définition 4.2, les variables moyennes ou filtrées au sens de Favre, s'expriment :

$$\bar{\rho}\tilde{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \int_e \int_\rho \int_{\psi_1} \dots \int_{\psi_n} \rho\varphi(e, \rho, \psi_1, \dots, \psi_n) \bar{P}(e, \rho, \psi_1, \dots, \psi_n; \mathbf{x}, t) de, d\rho, d\psi_1, \dots, d\psi_n \quad (4.6)$$

En introduisant la PDF (ou FDF) au sens de Favre, $\tilde{P} = \rho\bar{P}/\bar{\rho}$ dans l'Eq. 4.6, $\tilde{\varphi}$ s'exprime également par :

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{x}, t) = \int_e \int_\rho \int_{\psi_1} \dots \int_{\psi_n} \varphi(e, \rho, \psi_1, \dots, \psi_n) \tilde{P}(e, \rho, \psi_1, \dots, \psi_n; \mathbf{x}, t) de, d\rho, d\psi_1, \dots, d\psi_n \quad (4.7)$$

La détermination des fonctions de densité de probabilité est possible par la résolution numérique d'une équation de transport (Pope 1985). Cette approche est séduisante d'un point de vue théorique et permet de d'introduire une chimie complexe dans des approches RANS ou LES. Elle est néanmoins coûteuse en temps de calcul. Ainsi dans les faits, comme l'indique Haworth (2010) dans sa revue récente sur le sujet, la plupart des applications ont été faites sur des flammes de petites dimensions, mesurées en laboratoire. Etant plus difficiles à réaliser sur des géométries complexes, très peu de simulations de configurations industrielles sont recensées à ce jour. Nous mentionnerons cependant les calculs LES d'une turbine à gaz (James *et al.* 2006) avec 20 espèces chimiques et RANS d'une chambre de combustion interne (Drake et Haworth 2007) avec une centaine d'espèces chimiques.

Il est en théorie envisageable de transporter des PDF/FDF dans un contexte de chimie tabulée. Le choix de cette stratégie affectera beaucoup le coût du calcul CFD et fera perdre en partie le bénéfice de la chimie tabulée vis à vis d'une chimie complexe. Nous choisirons une seconde solution beaucoup moins

coûteuse qui permet la simulation de systèmes de combustion industriels. Elle consiste à présumer la forme de la fonction de densité de probabilité par des lois statistiques qui sont paramétrées par les moments des variables aléatoires. Comme les trajectoires chimiques suivies par le système réactif sont déjà fixées dans le cadre de la chimie tabulée, le fait de supposer la distribution statistique des variables thermo-chimiques le long de ces trajectoires est cohérent avec la philosophie générale de l'approche. A l'inverse, ce choix ne serait pas raisonnable dans le cadre d'une chimie complexe. Le nombre de variables statistiques qui définissent les PDF/FDF (qui correspond au nombre d'espèces chimiques impliquées dans le schéma cinétique) est trop important pour que l'on puisse les modéliser par des simples fonctions analytiques. Dans ce cas, le transport de PDF est probablement la stratégie la plus pertinente.

4.1.3 Formes présumées des PDF/FDF

Les fonctions mathématiques principales utilisées dans le cadre de la chimie tabulée sont présentées ci-dessous.

Fonction Dirac. La modélisation de la PDF/FDF $\overline{P}(\varphi^*)$ de la variable φ par une fonction Dirac δ s'écrit :

$$\overline{P}(\varphi^*) = \delta(\overline{\varphi} - \varphi^*) \quad (4.8)$$

où δ est défini par :

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \neq 0 \\ 1 & \text{si } x = 0 \end{cases} \quad (4.9)$$

Dans ce cas, la variable statistique φ^* est toujours égale à la valeur moyenne $\overline{\varphi}$. Il est donc supposé que la variable φ est constante, soit dans le temps à une localisation donnée pour une PDF, soit dans le volume V du filtre pour une FDF. De nombreuses formalisations nécessitent la modélisation de $\tilde{P}(\varphi^*)$, la PDF/FDF au sens de Favre. Son estimation par une fonction Dirac conduit naturellement à :

$$\tilde{P}(\varphi^*) = \delta(\tilde{\varphi} - \varphi^*) \quad (4.10)$$

Fonction β . Soit φ_n la forme normalisée de la variable φ définie par :

$$\varphi_n = \frac{\varphi - \varphi_{min}}{\varphi_{max} - \varphi_{min}} \quad (4.11)$$

où φ_{max} et φ_{min} sont les valeurs maximales et minimales prises respectivement par la fonction φ . Si $\overline{P}(\varphi_n)$ est modélisée par une fonction β , alors :

$$\bar{P}(\varphi_n^*) = \frac{(\varphi_n^*)^{a-1}(1-\varphi_n^*)^{b-1}}{\int_0^1 (\varphi_n^*)^{a-1}(1-\varphi_n^*)^{b-1} d\varphi_n^*} \quad (4.12)$$

où les deux paramètres a et b s'expriment :

$$a = \bar{\varphi}_n \left(\frac{\bar{\varphi}_n(1-\bar{\varphi}_n)}{\sigma_n} - 1 \right) \quad (4.13)$$

$$b = a \left(\frac{1}{\bar{\varphi}_n} - 1 \right) \quad (4.14)$$

$\bar{\varphi}_n = \int_0^1 \varphi_n^* \bar{P}(\varphi_n^*) d\varphi_n^*$ et $\sigma_n = \overline{\varphi_n^2} - \bar{\varphi}_n^2$ conditionnent la forme de la fonction de densité de probabilité. Comme $0 \leq \varphi_n \leq 1$, on montre facilement que :

$$0 \leq \sigma_n \leq \bar{\varphi}_n(1-\bar{\varphi}_n) \quad (4.15)$$

Plutôt que de manipuler σ_n dont les limites varient en fonction de la valeur moyenne de φ_n , il est commode d'introduire le facteur de ségrégation S_φ défini par :

$$S_{\varphi_n} = \frac{\sigma_n}{\bar{\varphi}_n(1-\bar{\varphi}_n)} \quad (4.16)$$

Ainsi $S_{\varphi_n} = 0$ quand φ_n ne fluctue pas et $S_{\varphi_n} = 1$ quand le niveau de variance de φ_n est maximal.

Il est également possible d'estimer la forme de la PDF/FDF au sens de Favre par une fonction β . Dans ce cas $\tilde{P}(\varphi^*)$ est toujours définie par l'Eq. 4.12 mais a et b s'expriment en fonction de $\tilde{\varphi}_n$ et de $\theta_n = \widetilde{\varphi_n^2} - \tilde{\varphi}_n^2$.

$$a = \tilde{\varphi}_n \left(\frac{\tilde{\varphi}_n(1-\tilde{\varphi}_n)}{\theta_n} - 1 \right) \quad (4.17)$$

$$b = a \left(\frac{1}{\tilde{\varphi}_n} - 1 \right) \quad (4.18)$$

A cause des multiples formes qu'elle peut prendre, la fonction β est bien adaptée à la modélisation de la distribution statistique du mélange entre le combustible et le comburant. Par exemple, considérons la distribution de la fraction de mélange. Une variance de fraction de mélange z nulle correspond à un mélange parfait entre le combustible et l'oxydant. Dans ce cas, la PDF devient un Dirac centré sur \tilde{z} . Considérons la situation opposée où le milieu est composé de paquets de combustibles et de comburants qui ne se sont pas mélangés. $\theta_z = \tilde{z}^2 - \tilde{z}^2$ tend alors vers sa valeur maximale, $\tilde{z}(1-\tilde{z})$, et $\tilde{P}(z^*)$ est composée de deux pics positionnés respectivement en $z = 0$ et $z = 1$. Pour des niveaux de fluctuations intermédiaires, la fonction β prend une forme proche d'une gaussienne centrée sur sa valeur moyenne. La figure 4.1 illustre les formes suivies par la fonction β en fonction de la variance de z .

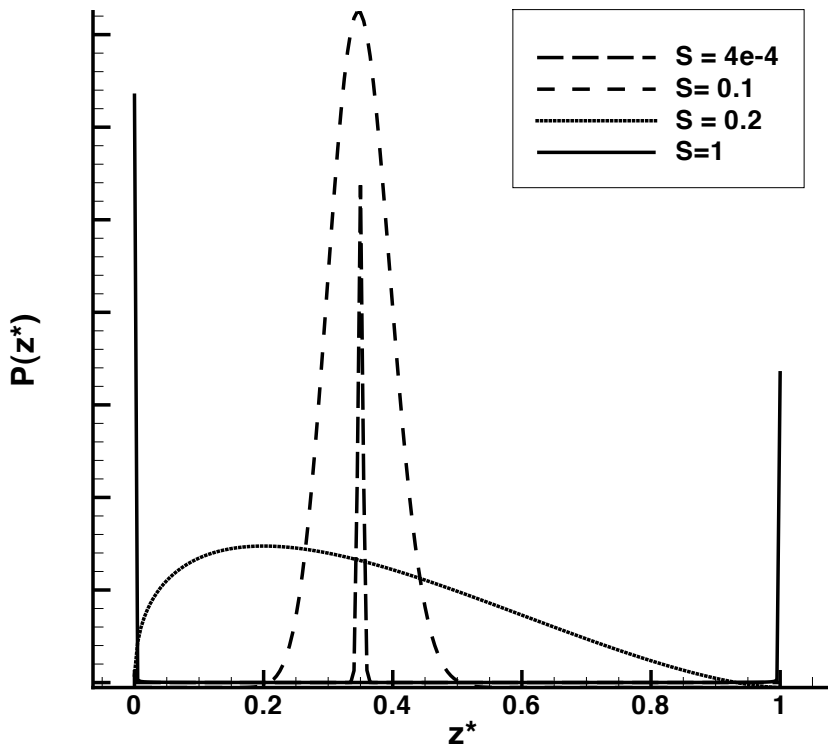


FIGURE 4.1 – Allure de la fonction β pour une valeur moyenne de $\tilde{z} = 0.35$.
 La forme de la PDF varie en fonction du facteur de ségrégation $S = (\tilde{z}^2 - \tilde{z}^2)/(\tilde{z}(1 - \tilde{z}))$.

Pour modéliser des mélanges entre plus de deux constituants, Girimaji (1991) a développé une formulation multi-variable de la fonction β . Cette formulation, qui corrèle les fluctuations de deux mélanges par l'intermédiaire d'une covariance, a été utilisée par Hasse et Peters (2005) pour modéliser la fonction de densité de probabilité jointe de deux fractions de mélange utilisée pour tenir compte des injections multiples dans un moteur Diesel.

Distribution log normale. La modélisation de la PDF/FDF de la variable φ par une fonction log-normale s'écrit :

$$\begin{aligned} \overline{P}(\varphi) &= \frac{1}{\varphi^* \sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\ln\varphi^* - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \\ \text{où } \mu &= \ln(\overline{\varphi}) - \frac{\sigma^2}{2} \end{aligned} \quad (4.19)$$

où σ est la déviation standard. La loi de distribution log-normale est généralement utilisée pour modéliser la PDF/FDF du taux de dissipation scalaire χ de la fraction de mélange. Dans ce cas, la déviation σ est généralement fixée à 1 comme le suggèrent les résultats expérimentaux de Effelsberg et Peters (1989).

4.2 Modélisation de la combustion turbulente pour des simulations RANS.

4.2.1 Equations des valeurs moyennes des coordonnées de la table chimique

Formulation générale

Dans une formulation RANS classique, l'écoulement moyen est décrit par la résolution des équations de continuité (ou équation de Poisson si le nombre de Mach est supposé faible), de la quantité de mouvement et éventuellement de variables qui permettent de modéliser les flux turbulents (k , ϵ , ...). En fonction de la stratégie de modélisation suivie, l'état thermodynamique moyen du système est alors identifié à partir des moments d'ordre 1 (moyenne) et éventuellement d'ordre 2 (variance) des coordonnées de la base thermo-chimique.² La valeur moyenne $\widetilde{\psi}_l$ et la variance $\widetilde{\psi}_l''^2$ des coordonnées ψ_l sont solutions des équations

2. En RANS, la variance $\widetilde{\psi}_l''^2$ de la variable ψ_l vérifie la propriété $\widetilde{\psi}_l''^2 = \widetilde{\psi}_l^2 - \widetilde{\psi}_l^2$. Ce n'est pas le cas dans un formalisme LES où la relation $\widetilde{\psi}_l \widetilde{\psi}_l = \widetilde{\psi}_l^2$ n'est *a priori* pas vérifiée.

suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\psi}_l}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\psi}_l \right) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\underbrace{\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{\psi}_l}{\partial x_j}}}_{A-I} - \underbrace{\overline{\rho u_j'' \tilde{\psi}_l''}}_{A-II} \right) \\ &+ \underbrace{\bar{\rho} \tilde{\omega}_{\psi_l}}_{A-III} \quad l = 1, \dots, n \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\psi}_l''^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\psi}_l''^2 \right) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\underbrace{\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{\psi}_l''^2}{\partial x_j}}}_{B-I} - \underbrace{\overline{\rho u_j'' \tilde{\psi}_l''^2}}_{B-II} \right) \\ &+ \underbrace{2 \tilde{\psi}_l'' \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \tilde{\psi}_l}{\partial x_j}} \right)}_{B-III} - \underbrace{2 \overline{\rho u_j'' \tilde{\psi}_l''} \frac{\partial \tilde{\psi}_l}{\partial x_j}}_{B-IV} \\ &- \underbrace{2 \rho D \frac{\partial \tilde{\psi}_l''}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{\psi}_l''}{\partial x_j}}_{B-V} + \underbrace{2 \bar{\rho} \tilde{\psi}_l'' \tilde{\omega}_{\psi_l}}_{B-VI} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Les fermetures utilisées en pratique pour résoudre ces équations sont les suivantes :

- Les termes de diffusion moléculaire $A-I$, $B-I$ et $B-III$ sont ici modélisés par une loi de Fick.
- Les termes de transport et de production turbulents $A-II$, $B-II$ et $B-IV$ sont souvent calculés en fermant les flux turbulents par des hypothèses de gradient :

$$\overline{\rho u_j'' \tilde{\psi}_l''} = -\bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{t1}} \frac{\partial \tilde{\psi}_l}{\partial x_j} \quad (4.22)$$

$$\overline{\rho u_j'' \tilde{\psi}_l''^2} = -\bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{t2}} \frac{\partial \tilde{\psi}_l''^2}{\partial x_j} \quad (4.23)$$

$$(4.24)$$

où ν_t et $S_{t1,2}$ sont respectivement une viscosité et des nombres de Schmidt turbulents.

- La modélisation de $\tilde{\chi}_{p,\psi_l}$, le taux de dissipation des fluctuations du scalaire ψ_l qui apparaît dans le terme B-V est plus délicate car elle dépend de la nature de celui-ci . Si il est passif (par exemple la fraction de mélange), il peut être relié à un temps de mélange turbulent $\tau_t = k/\epsilon$ en utilisant une relaxation linéaire :

$$\bar{\rho}\tilde{\chi}_{p,\psi_l} = 2\rho D \frac{\overline{\partial\psi_l'' \partial\psi_l''}}{\partial x_j \partial x_j} = \bar{\rho}C_\psi \frac{\epsilon}{k} \widetilde{\psi_l''^2} \quad (4.25)$$

où k et ϵ sont respectivement l'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation de l'énergie turbulente. C_ψ est une constante. Par contre, lorsque le scalaire est réactif, des analyses de DNS montrent que les hypothèses de relaxation linéaires ne sont plus aussi légitimes. Des lois de fermeture qui tiennent compte de la densité de surface de flamme seront plus adaptées (Vervisch *et al.* 2004; Fiorina *et al.* 2005b).

- Parmi les nombreux modèles disponibles dans la littérature pour le taux de réaction chimique moyen (Poinsot et Veynante 2005), nous ne considérons ici que les formulations basées sur les fonctions de densité de probabilité, plus faciles à coupler aux tables chimiques. Ils sont donc modélisés par le biais des PDF jointes introduites dans le paragraphe 4.1.2 :

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_{\psi_l} &= \int_e \int_\rho \int_{\psi_1} \dots \int_{\psi_n} \dot{\omega}_{\psi_l} \times \\ \tilde{P}(e, \rho, \psi_1, \dots, \psi_n; \mathbf{x}, t) de, d\rho, d\psi_1, \dots, d\psi_n \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} \widetilde{\psi_l'' \dot{\omega}_{\psi_l}} &= \int_e \int_\rho \int_{\psi_1} \dots \int_{\psi_n} (\psi_l - \tilde{\psi}_l) \dot{\omega}_{\psi_l} \times \\ \tilde{P}(e, \rho, \psi_1, \dots, \psi_n; \mathbf{x}, t) de, d\rho, d\psi_1, \dots, d\psi_n \end{aligned} \quad (4.27)$$

Application aux coordonnées les plus couramment utilisées

- **Valeur moyenne de la fraction de mélange**

L'équation de transport de la valeur moyenne de la fraction de mélange est résolue en pratique sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{z}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{z}) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \right) \\ \text{avec } D_t &= \frac{\mu_t}{Sc_t} \end{aligned} \quad (4.28)$$

où le terme de diffusion moléculaire provient de l'approximation suivante :

$$\overline{\rho(D + D_t) \frac{\partial z}{\partial x_j}} \approx \bar{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_j} \quad (4.29)$$

Et où Sc_t est un nombre de Schmidt turbulent.

- **Variance de la fraction de mélange :**

La variance de la fraction de mélange $\widetilde{z''^2}$ peut être obtenue en résolvant directement son équation de transport, fermée sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{z}''^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \widetilde{u}_j \widetilde{z}''^2 \right) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \widetilde{z}''^2}{\partial x_j} \right) \\ &\quad + 2\bar{\rho} D_t \frac{\partial \widetilde{z}}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{z}}{\partial x_i} - 2\bar{\rho} C_z \frac{\epsilon}{k} \widetilde{z}''^2 \end{aligned} \quad (4.30)$$

où C_z est une constante de l'ordre de l'unité.

Une autre procédure pour estimer la variance (Vervisch *et al.* 2004) est de résoudre une équation de transport pour la moyenne du carré de la fraction de mélange :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{z}^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \widetilde{u}_j \widetilde{z}^2 \right) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \widetilde{z}^2}{\partial x_j} \right) \\ &\quad + 2\bar{\rho} D_t \frac{\partial \widetilde{z}}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{z}}{\partial x_i} - 2\rho D \frac{\partial \widetilde{z}''}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{z}''}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (4.31)$$

La variance de z se déduit ensuite par la relation :

$$\widetilde{z}''^2 = \widetilde{z}^2 - \widetilde{z}^2 \quad (4.32)$$

- **Moyenne de la variable d'avancement de réaction**

L'écriture d'une équation de transport de la variable d'avancement de réaction normalisée c définie par l'Eq. 2.17 introduit des termes de dérivées croisées liés en particulier à la dépendance de Y_c^{eq} vis à vis de la fraction de mélange z (cf. discussion dans le paragraphe 2.2.2). Il est donc préférable de résoudre une équation de transport pour la valeur moyenne de Y_c :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Y}_c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \widetilde{u}_j \widetilde{Y}_c \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \widetilde{Y}_c}{\partial x_j} \right) + \bar{\rho} \widetilde{\omega}_{Y_c} \quad (4.33)$$

- **Variance de la variable d'avancement de réaction**

La variance la variable d'avancement de réaction s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Y}_c''^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \widetilde{u}_j \widetilde{Y}_c''^2 \right) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} (D + D_t) \frac{\partial \widetilde{Y}_c''^2}{\partial x_j} \right) \\ &\quad + 2\bar{\rho} D_t \frac{\partial \widetilde{Y}_c}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{Y}_c}{\partial x_i} - 2\rho D \frac{\partial \widetilde{Y}_c''}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{Y}_c''}{\partial x_i} + \bar{\rho} \widetilde{Y}_c'' \widetilde{\omega}_{Y_c} \end{aligned} \quad (4.34)$$

Si la PDF jointe \widetilde{P} est identifiée, alors le terme de production chimique $\widetilde{Y}_c'' \widetilde{\omega}_{Y_c}$ se calcule directement à partir de la relation 4.27. Le caractère réactif de la variable d'avancement est le plus souvent négligé pour la fermeture du taux

de dissipation scalaire des fluctuations de Y_c , qui s'écrit alors :

$$\overline{\rho D \frac{\partial Y_c''}{\partial x_i} \frac{\partial Y_c''}{\partial x_i}} \approx \bar{\rho} C_{Y_c} \frac{\epsilon}{k} \widetilde{Y_c''^2} \quad (4.35)$$

D'autres modèles de fermetures qui tiennent compte de la densité de surface de flamme peuvent être formulés (Vervisch *et al.* 2004). Ils améliorent sensiblement les résultats si la flamme est prémélangée (Vervisch *et al.* 2004; Fiorina *et al.* 2005b). Comme ces modèles ne seront pas détaillés dans ce manuscrit, le lecteur est invité à se référer aux travaux (Vervisch *et al.* 2004; Fiorina *et al.* 2005b; Fiorina 2004) pour plus d'informations.

- **Moyenne de l'enthalpie h ou de l'énergie interne e .**

Si la base thermochimique est non-adiabatique, alors l'enthalpie ou l'énergie interne sont également des coordonnées. Il est commode d'utiliser l'enthalpie sensible et chimique h dans le cas de flamme à pression constante et l'énergie interne et chimique e dans le cas de combustion à pression variable. La fermeture des équations de transport des grandeurs moyenne de e ou h ne pose pas de problème particulier lorsque la diffusion différentielle des espèces est négligée. Si les pertes d'énergie d'origines visqueuses sont négligées et en modélisant les flux turbulents par des lois de gradient, les équations de transport de \tilde{e} et \tilde{h} sont respectivement :

$$\frac{\partial \tilde{\rho e}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{\rho u}_j \tilde{e}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{P_{rt}} \frac{\partial \tilde{e}}{\partial x_j} \right) + \dot{Q} \quad (4.36)$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho h}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{\rho u}_j \tilde{h}) = \frac{\partial \tilde{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{P_{rt}} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right) + \dot{Q} \quad (4.37)$$

où \dot{Q} représente les pertes par rayonnement et où une approximation de type Eq. 4.29 a été faite. Si la diffusion différentielle des espèces est considérée, le calcul des flux laminares des enthalpies des espèces est alors plus délicat (Auzillon 2011).

- **Taux de dissipation scalaire moyen de la fraction de mélange.**

Certaines tables chimiques sont paramétrées également en fonction du taux de dissipation scalaire d'une variable ψ_l . C'est le cas des bibliothèques de flammelettes introduites par Peters (1986), qui relie la structure chimique en fonction du taux de dissipation scalaire de la fraction de mélange, $\chi = 2\rho D |\nabla z|^2$. Dans un contexte RANS, la valeur moyenne de ce taux de dissipation scalaire s'écrit :

$$\overline{\rho \tilde{\chi}} = \bar{\rho} \tilde{\chi}_m + \bar{\rho} \tilde{\chi}_p \quad (4.38)$$

où $\bar{\rho}\tilde{\chi}_m = 2\bar{\rho}D(\partial\tilde{z}/x_i)(\partial\tilde{z}/x_i)$, le taux de dissipation scalaire des valeurs moyenne de la fraction de mélange est généralement négligé dans un contexte RANS. Comme nous l'avons indiqué précédemment, le taux de dissipation scalaire des fluctuations, $\tilde{\chi}_p$, peut modéliser par l'Eq. 4.25. Sous ces hypothèses, $\bar{\rho}\tilde{\chi}$ s'exprime directement à partir de la variance de la fraction de mélange et ne nécessite pas la résolution d'une équation de transport supplémentaire :

$$\bar{\rho}\tilde{\chi} = \bar{\rho}C_z \frac{\epsilon}{k} z'^{m/2} \quad (4.39)$$

4.2.2 Exemples de modélisation RANS de la chimie tabulée

Formalisation turbulente de la méthode FPI adiabatique (combustion partiellement prémélangée)

La méthode FPI détaillée dans le paragraphe 2.3.1 permet d'identifier les grandeurs thermochimiques φ en fonction de deux coordonnées :

$$\varphi = \varphi(Y_c, z) \quad (4.40)$$

Y_c est une variable d'avancement de réaction définie, par exemple, comme une combinaison linéaire des fractions massiques de CO et CO₂ (Eq. 2.16). z est la fraction de mélange qui, sous une hypothèse de nombre de Lewis unitaire, est modélisée à partir de la composition élémentaire du mélange (Eq. 2.13). Dans ce contexte, la valeur moyenne d'une grandeur thermodynamique φ , définie dans le cas général par l'Eq. 4.7, s'exprime en fonction de la PDF jointe $\tilde{P}(Y_c, z)$:

$$\tilde{\varphi} = \int_{Y_c} \int_z \varphi(Y_c, z) \tilde{P}(Y_c^*, z^*) dY_c^* dz^* \quad (4.41)$$

La fonction de densité de probabilité jointe des variables Y_c^* et z^* se décompose de la manière suivante :

$$\tilde{P}(Y_c^*, z^*) = \bar{P}(Y_c^* | z = z^*) \tilde{P}(z^*) \quad (4.42)$$

où $\bar{P}(Y_c^* | z = z^*)$ est la PDF de Y_c^* conditionnée par z^* . Comme les variables Y_c et z sont en pratique fortement corrélées,³ il est faux de supposer la même distribution statistique de Y_c quelque soit la valeur prise par la fraction de mélange (Vervisch 1992) : $\tilde{P}(Y_c^*, z^*) \neq \tilde{P}(Y_c^*)$.

3. La corrélation entre Y_c et z s'explique en partie par le fait que l'état d'équilibre thermodynamique dépend fortement de la richesse du mélange. En effet comme Y_c est définie à partir d'une combinaison d'espèces chimiques (par exemple $Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2}$), alors la valeur de Y_c^{eq} dépend fortement de la fraction de mélange z

L'importance des corrélations est réduite lorsque l'on considère l'espace chimique normalisé (z, c) où c est la forme normalisée de Y_c :

$$c = \frac{Y_c - Y_{c_f}(z)}{Y_{b_f}(z) - Y_{c_f}(z)} \quad (4.43)$$

Vervisch (1992) a extrait, à partir du calcul en simulation numérique directe d'une flamme non prémélangée méthane/air, les formes des PDF de la variable c conditionnée par la variable z . Les résultats de cette étude montrent que la forme de $\bar{P}(c^*|z = z^*)$ est peu dépendante des valeurs prises par z . Rullaud (2004) a abouti à la même conclusion en post-traitant des résultats expérimentaux d'une flamme partiellement prémélangée turbulente. Dans ces conditions, les variables z et c peuvent être supposées indépendantes ce qui revient à écrire :

$$\tilde{P}(z^*, c^*) = \bar{P}(c^*|z = z^*)\tilde{P}(z^*) \simeq \bar{P}(c^*)\tilde{P}(z^*) \quad (4.44)$$

Ainsi, la moyenne d'une variable est estimée par :

$$\tilde{\varphi} = \int_0^1 \int_0^1 \varphi(c^*, z^*) \bar{P}(c^*) \tilde{P}(z^*) dc^* dz^* \quad (4.45)$$

Cette méthodologie développée en RANS dans les travaux de Vervisch *et al.* (2004) et Fiorina *et al.* (2005b) est nommée FPI-PCM où PCM signifie Presumed Conditioned Moment.

Formalisation turbulente de la méthode FPI non adiabatique (combustion partiellement prémélangée avec prise en compte des pertes thermiques)

Si l'impact des pertes thermiques sur la cinétique chimique de la combustion est considéré, alors les grandeurs thermochimiques φ s'expriment :

$$\varphi = \varphi(h, Y_c, z) \quad (4.46)$$

où h est l'enthalpie sensible et chimique définie par l'Eq. 2.2. Comme dans la formulation adiabatique, les variables h et Y_c sont normalisées :

$$h_n = \frac{h - h_{min}(z)}{h_{max}(z) - h_{min}(z)} \quad (4.47)$$

$$c = \frac{Y_c - Y_{c_f}(z, h)}{Y_{b_f}(z, h) - Y_{c_f}(z, h)} \quad (4.48)$$

Les variables z , c et h_n sont supposées indépendantes afin de décomposer la fonction de densité de probabilité jointe $\tilde{P}(h_n^*, z^*, c^*)$:

$$\tilde{P}(h_n^*, z^*, c^*) = \bar{P}(h_n^*)\bar{P}(c^*)\tilde{P}(z^*) \quad (4.49)$$

Ainsi, la moyenne d'une variable est estimée par :

$$\tilde{\varphi} = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \varphi(h_n^*, c^*, z^*) \overline{P}(c^*) \tilde{P}(z^*) \overline{P}(h_n^*) dh_n^* dc^* dz^* \quad (4.50)$$

Formalisation turbulente de la méthode UTAC (Unsteady flamelet Tabulated Chemistry) pour la combustion non prémélangée en régime instationnaire

Afin de capturer la dynamique et la structure chimique de flammes non prémélangées qui s'auto-allument, il a été proposé dans le paragraphe 2.3.3 de tabuler des solutions de flammelettes instationnaires 1-D dans une base de données $\varphi(z, c, \chi_{st})$. Les grandeurs moyennes au sens de Favre s'expriment donc :

$$\tilde{\varphi} = \int_0^{+\infty} \int_0^1 \int_0^1 \phi(z^*, c^*, \chi_{st}^*) \tilde{P}(z^*, c^*, \chi_{st}^*) dz^* dc^* d\chi_{st}^* \quad (4.51)$$

où χ_{st}^* est le taux de dissipation scalaire à la stoechiométrie. Sous l'hypothèse d'indépendance statistique de z^* , c^* et χ_{st}^* , il vient :

$$\tilde{P}(z^*, c^*, \chi_{st}^*) = \tilde{P}(z^*) \overline{P}(c^*) \overline{P}(\chi_{st}^*) \quad (4.52)$$

Ainsi les grandeurs thermochimiques s'expriment :

$$\tilde{\varphi} = \int_0^{+\infty} \int_0^1 \int_0^1 \phi(z^*, c^*, \chi_{st}^*) \tilde{P}(z^*) \overline{P}(c^*) \overline{P}(\chi_{st}^*) dz^* dc^* d\chi_{st}^* \quad (4.53)$$

4.2.3 Exemples de fermeture des PDF

Fonctions de densité de probabilité $\tilde{P}(z^*)$ et $\overline{P}(c)$:

La fonction β introduite dans le paragraphe 4.1.3 prend des formes multiples en fonction du niveau du facteur de ségrégation S_φ . (Peters 1986) et (Bradley *et al.* 1998) ont respectivement utilisé ces fonctions pour présumer du comportement statistique des variables z et c .

La modélisation de la fonction de densité de probabilité de la fraction de mélange par une fonction β ne pose pas de problème particulier. En effet, la fonction $\tilde{P}(z^*)$ est paramétrée uniquement par les variables \tilde{z} et $\theta_z = \tilde{z}^2 - \tilde{z}^2$ qui sont solutions des équations de transport 4.29 et 4.30.

La modélisation de la fonction de densité de probabilité de la variable d'avancement de réaction normalisée c est plus délicate. En effet $\overline{P}(c)$ est identifiée par les variables \bar{c} et $\overline{c'^2}$ qui ne sont pas transportées, seules les informations sur les

grandeurs moyennes au sens de Favre sont disponibles. L'analyse proposée ci-dessous met en avant ce problème et conduit à une approximation couramment utilisée en pratique.

Pour simplifier l'analyse, considérons un régime adiabatique. A partir de la définition 4.43, la moyenne conditionnée de c à $z = z^*$ s'écrit :

$$\overline{(c|z = z^*)} = \frac{\overline{(Y_c|z = z^*)} - Y_{c_f}(z^*)}{Y_{b_f}(z^*) - Y_{c_f}(z^*)} \quad (4.54)$$

Si l'on suppose que c et z sont indépendantes, alors la moyenne conditionnée et la moyenne de c se confondent :

$$\overline{(c|z = z^*)} = \bar{c} \quad (4.55)$$

L'équation 4.54 peut donc se reformuler de la façon suivante :

$$\overline{(Y_c|z = z^*)} = \bar{c} (Y_{b_f}(z^*) - Y_{c_f}(z^*)) + Y_{c_f}(z^*) \quad (4.56)$$

D'autre part, comme toute grandeur thermo-chimique, Y_{b_f} s'écrit :

$$\begin{aligned} \bar{Y}_c &= \int_0^1 \int_0^1 Y_c(c^*, z^*) \bar{P}(c^*, z^*) dc^* dz^* \\ &= \int_0^1 \int_0^1 Y_c(c^*, z^*) \bar{P}(c|z = z^*) \bar{P}(z^*) dc^* dz^* \\ &= \int_0^1 \overline{(Y_c|z = z^*)} \bar{P}(z^*) dz^* \end{aligned} \quad (4.57)$$

Ainsi, en multipliant 4.56 par $\bar{P}(z^*) dz^*$ puis en intégrant sur z^* , on obtient :

$$\bar{c} = \frac{\bar{Y}_c - \bar{Y}_{c_f}^f}{\bar{Y}_{c_b}^b - \bar{Y}_{c_f}^f} \quad (4.58)$$

Comme les moyennes au sens de Reynolds ne sont pas connues, une approximation est nécessaire à ce stade. Une solution souvent utilisée (Bradley *et al.* 1998; Vervisch *et al.* 2004; Fiorina *et al.* 2005b; Fiorina *et al.* 2009) en pratique est d'estimer le rapport du membre de droite de l'Eq. 4.58 à partir des moyennes de Favre :

$$\bar{c} \simeq \frac{\tilde{Y}_c - \tilde{Y}_{c_f}}{\tilde{Y}_{c_b} - \tilde{Y}_{c_f}} \quad (4.59)$$

où les moyennes \widetilde{Y}_{c_f} et \widetilde{Y}_{c_b} sont estimées par :

$$\widetilde{Y}_{c_b} = \int_0^1 \int_0^1 Y_{b_f}(z^*, h_n^*) \widetilde{P}(z^*) \overline{P}(h_n^*) dz^* dh_n^* \quad (4.60)$$

$$\widetilde{Y}_{c_f} = \int_0^1 \int_0^1 Y_{c_f}(z^*, h_n^*) \widetilde{P}(z^*) \overline{P}(h_n^*) dz^* dh_n^* \quad (4.61)$$

Une analyse similaire est proposée dans Fiorina *et al.* (2005b) pour estimer \bar{c} et \bar{c}'^2 à partir des grandeurs transportées \widetilde{Y}_c et $\widetilde{Y}_c''^2$:

$$\frac{\bar{c}}{c'} \approx \frac{\widetilde{Y}_c''^2 + \widetilde{Y}_c^2 - \widetilde{Y}_{c_f}^2}{(\widetilde{Y}_{b_f} - \widetilde{Y}_{c_f})^2} - \frac{(\widetilde{Y}_c - \widetilde{Y}_{c_f})^2}{(\widetilde{Y}_{c_b} - \widetilde{Y}_{c_f})^2} - 2 \frac{(\widetilde{Y}_c - \widetilde{Y}_{c_f})}{(\widetilde{Y}_{b_f} - \widetilde{Y}_{c_f})^2} \frac{\overline{\rho(Y_{b_f} - Y_{c_f})Y_{c_f}}}{\overline{\rho Y_{b_f}} - \overline{\rho Y_{c_f}}} \quad (4.62)$$

Fonction de densité de probabilité $\overline{P}(\chi_{st}^*)$:

La fonction de densité de probabilité du taux de dissipation scalaire à la stoechiométrie est souvent modélisée par la loi log-normale définie dans le paragraphe 4.1.3 par l'équation 4.19. $\overline{P}(\chi_{st}^*)$ est alors paramétrée par la valeur moyenne du taux de dissipation scalaire à la stoechiométrie $\widetilde{\chi}_{st}$.⁴

Le taux de dissipation scalaire conditionné à la stoechiométrie χ_{st} est relié à χ au travers de l'Eq. 2.54. La relation entre $\widetilde{\chi}$ et $\widetilde{\chi}_{st}$ se déduit en introduisant la fonction de densité de probabilité de la fraction de mélange $\widetilde{P}(z^*)$:

$$\widetilde{\chi}_{st} = \frac{\widetilde{\chi}}{\int_0^1 \frac{F(z^*)}{F(z_{st})} \widetilde{P}(z^*) dz^*} = \widetilde{\chi} \mathcal{F}(\widetilde{z}, S_z) \quad (4.63)$$

Le terme $\mathcal{F}(\widetilde{z}, S_z)$ est en pratique calculé lors de la génération de la table chimique. Le taux de dissipation scalaire moyen $\widetilde{\chi}$ peut être facilement calculé en utilisant l'Eq. 4.38

Fonction de densité de probabilité $\overline{P}(h_n^*)$:

Les pertes thermiques s'effectuent pendant des échelles de temps généralement plus lentes que la turbulence et la cinétique chimique. Ainsi nous supposons que les fluctuations de l'enthalpie normalisée restent faibles et nous négligerons

4. Comme il est difficile d'estimer $\widetilde{\chi}_{st}$, on suppose en pratique que $\overline{P}(\chi_{st}^*) \approx \widetilde{P}(\chi_{st}^*)$

leurs impacts sur la grandeur moyenne $\tilde{\varphi}$. Dans ce cas, $\tilde{P}(h_n^*)$ est définie par une fonction Dirac δ :

$$\tilde{P}(h_n^*) = \delta(\bar{h}_n - h_n^*) \quad (4.64)$$

où \bar{h}_n , la moyenne au sens de Reynolds de l'enthalpie normalisée, est estimée à partir de l'enthalpie \tilde{h} transportée. Un raisonnement similaire à celui mené pour établir la relation 4.59 conduit à :

$$\bar{h}_n = \frac{\tilde{h} - \tilde{h}_{min}}{\tilde{h}_{max} - \tilde{h}_{min}} \quad (4.65)$$

4.2.4 Implantation dans un code de CFD

Pré-calcul des PDF

L'intégration des fonctions β , nécessaire pour l'estimation d'une grandeur moyennée (relation 4.50), est coûteuse en temps de calcul. Pour éviter au code de CFD d'effectuer les mêmes opérations à chaque itération et en chaque point du maillage, l'ensemble des grandeurs moyennes $\tilde{\varphi}$ est calculé initialement pour toutes les combinaisons possibles de $(\tilde{z}, \tilde{z}''^2, \bar{c}, \bar{c}^2, \bar{h}_n)$.

Le principe de fonctionnement de cette procédure est schématisé sur la figure 4.2.

- Soit la base de chimie tabulée est destinée à être utilisée pendant la résolution numérique de l'écoulement. Dans ce cas, sont seulement stockées dans la base les grandeurs $\bar{\rho}$, $\tilde{\omega}_{Y_c}$, \tilde{T} et $\tilde{\psi}''\tilde{\omega}_{\psi_l}$ intervenant dans les équations de Navier-Stokes et les équations 4.29, 4.30, 4.33, 4.34 et 4.37 ainsi que les grandeurs nécessaires au passage de $(\tilde{Y}_c, \tilde{Y}_c''^2, \tilde{h})$ à $(\bar{c}, \bar{c}^2, \bar{h}_n)$ (relations 4.59, 4.62 et 4.65).
- Soit la base FPI moyennée est utilisée en post-traitement du calcul convergé, dans ce cas l'ensemble des concentrations massiques des espèces chimiques \tilde{Y}_k que l'on souhaite prédire peut être stocké.

Schéma du modèle

Un organigramme représentant le couplage du modèle de combustion turbulente RANS à un code de CFD à faible nombre de Mach est représenté sur la figure 4.3. Les principales étapes réalisées par le solveur sont indiquées ci-dessous.

1. Les équations moyennées habituelles de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie, de l'énergie cinétique et de la dissipation de l'énergie turbulente sont résolues par le solveur de CFD.

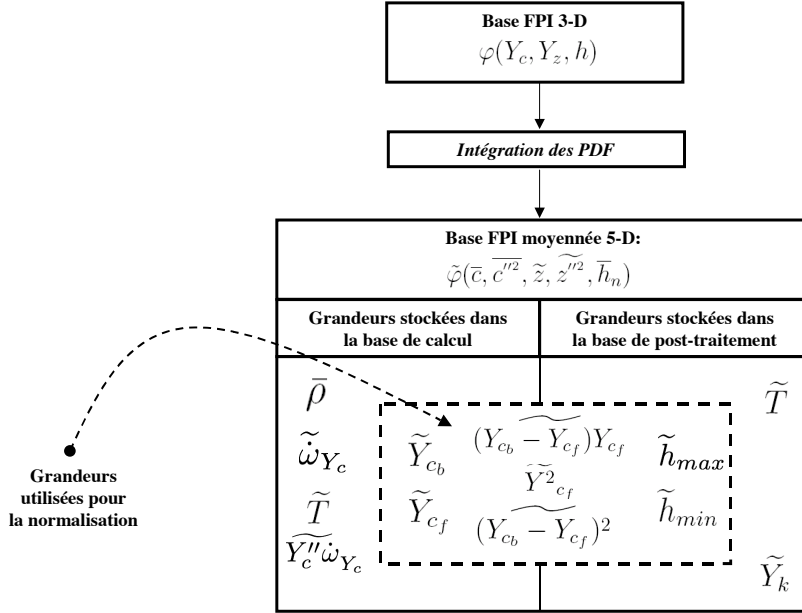


FIGURE 4.2 – Pré-tabulation des grandeurs moyennes. Schéma de principe.

Les équations 4.29, 4.30, 4.33 et 4.34 sont ajoutées aux équations de Navier-Stokes.

2. A partir des coordonnées $(\tilde{Y}_c, \tilde{Y}_c''^2, \tilde{z}, \tilde{z}''^2, \tilde{h})$ sont calculées les coordonnées $(\bar{c}, \bar{c}''^2, \tilde{z}, \tilde{z}''^2, \bar{h}_n)$ en appliquant les relations de normalisation 4.59, 4.62 et 4.65.
3. Les grandeurs thermo-chimiques sont interpolées dans la base de chimie tabulée à partir des coordonnées $\tilde{z}, \tilde{z}''^2, \bar{c}, \bar{c}''^2$ et \bar{h}_n .
4. Les variables $\bar{\rho}, \tilde{\omega}_{Y_c}, \tilde{Y}_c'' \tilde{\omega}_{Y_c}$ et \tilde{T} sont réactualisées et introduites dans les équations de bilan de l'écoulement.

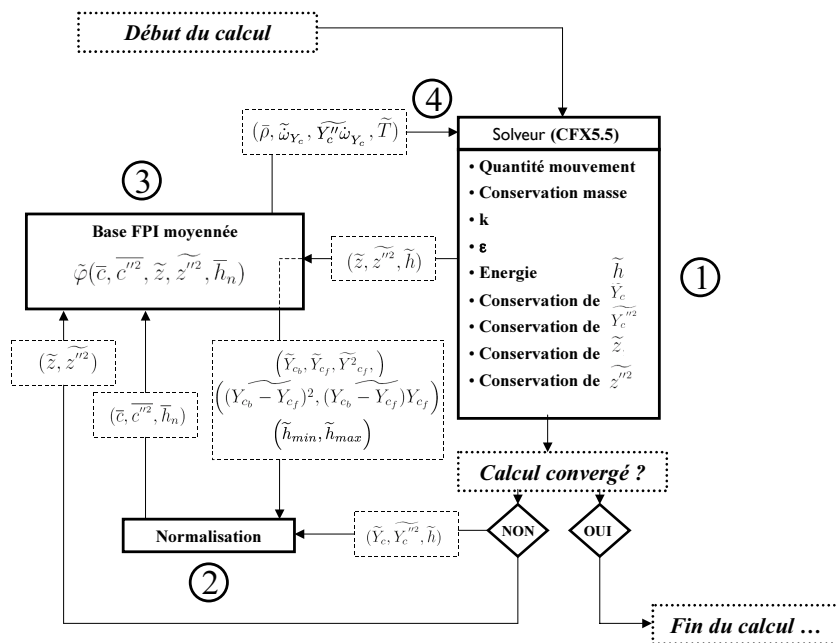


FIGURE 4.3 – Schéma d’implantation du modèle de combustion turbulente dans un code à faible nombre de Mach. Les numéros représentent les principales étapes décrites dans le paragraphe 4.2.4

4.2.5 Exemples d’applications

Flamme D (SANDIA national lab)

Le formalisme FPI-PCM (Vervisch *et al.* 2004; Fiorina *et al.* 2005b) a été utilisé pour simuler la flamme jet, référencée “Flamme D”, étudiée à SANDIA par Barlow et Frank (1998). Le brûleur, positionné au centre d’un écoulement d’air, génère un jet de méthane et d’air, caractérisé par une richesse de 3, entouré d’une multitude de flammes pilotes. Ces flammes pilotes génèrent des gaz brûlés qui ont une composition proche de l’état d’équilibre d’un mélange pauvre de méthane et d’air ($\phi = 0.77$). Tous les détails qui concernent les conditions aux limites et les mesures expérimentales sont disponibles sur le site <http://www.ca.sandia.gov/TNF>. Le modèle FPI-PCM est implanté dans le code commercial Fluent (ANSYS 2010).

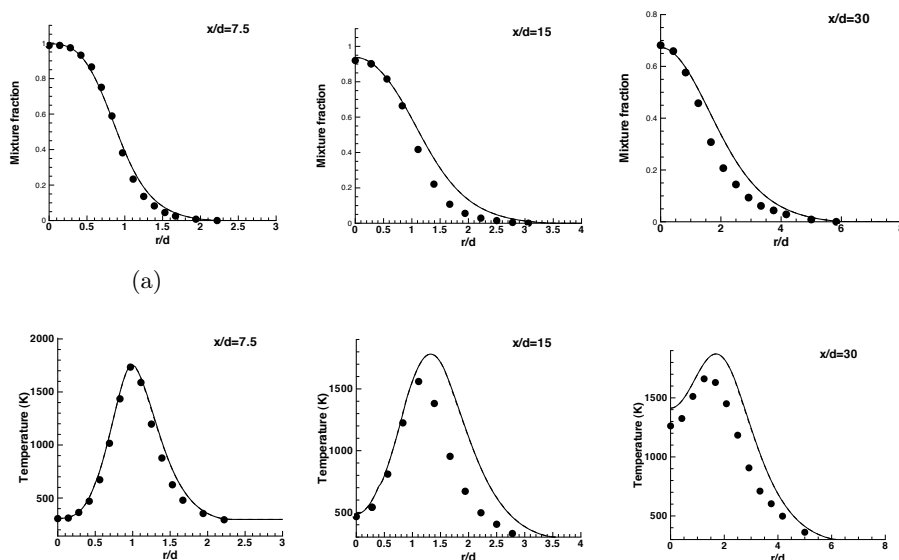


FIGURE 4.4 – *Profils radiaux de température à différentes positions axiales pour la flamme D : comparaison entre la prédiction par le modèle FPI-PCM (traits plein) et les mesures expérimentales (symboles) (Fiorina et al. 2009).*

Dans cette situation où la flamme a une structure de flamme de diffusion, c'est souvent la capacité des modèles RANS à prédire l'écoulement turbulent qui est le premier facteur limitant. La précision du modèle de combustion turbulente aura un impact sur la qualité de la simulation numérique seulement si le mélange entre combustible et comburant est bien prédit.

Des simulations sont conduites avec le modèle de turbulence $k-\epsilon$ sur un maillage structuré 2-D axi-symétrique de 300×170 noeuds. Les constantes de l'équation de ϵ ont été modifiées selon l'étude TNF4 (1999) afin d'améliorer la description du mélange entre le combustible et le comburant. Dans ces conditions, comme le montre la figure 4.4 les résultats de la simulation sont en accord avec les mesures expérimentales. Le détail des comparaisons est discuté dans Fiorina (2004) et Fiorina *et al.* (2009).

Simulation d'une flamme stratifiée non-adiabatique

Afin de tester le modèle dans une situation prémélangée, nous retiendrons l'expérience effectuée par Moreau et Boutier (1977). Dans cette configuration, une flamme prémélangée se propage dans un canal sous la pression atmosphérique. La figure 4.5 illustre la géométrie de la chambre de combustion. La section de la

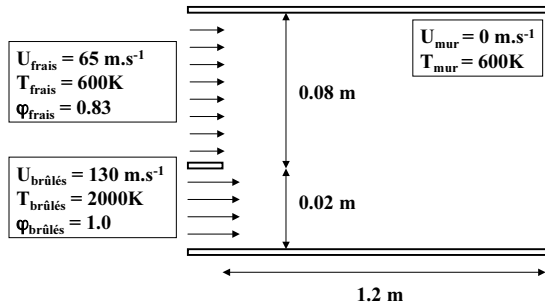


FIGURE 4.5 – Géométrie de la chambre de combustion et conditions aux limites du calcul numérique. Expérience de Moreau et Boutier (1977)

chambre de combustion est constante et rectangulaire. L'écoulement principal est un mélange pauvre de méthane et d'air ($\phi = 0.83$) préchauffé à une température de $600K$. Ces gaz frais sont injectés dans la chambre de combustion à une vitesse moyenne de l'ordre de $65 m s^{-1}$. Une flamme est stabilisée par un jet secondaire de produits de combustion chauds, injectés parallèlement à l'entrée des gaz frais, à vitesse élevée ($\simeq 130 m s^{-1}$). La composition des gaz chauds est équivalente à l'équilibre chimique d'un mélange stœchiométrique de méthane et d'air refroidi à $2000K$. Comme les murs sont refroidis ($\simeq 600K$), les échanges thermiques jouent un rôle important dans les interactions entre la flamme et la paroi. Nous avons donc conduit une simulation numérique non-adiabatique où la température en paroi a été imposée à $600 K$. Les résultats de la simulation numériques sont présentés sur la figure 4.6. Un bon accord entre la modélisation et les mesures expérimentales est observé. Cependant comme l'indique les travaux de Fiorina *et al.* (2005b), la qualité de la simulation est très sensible au modèle de dissipation scalaire des fluctuations de Y_c utilisé pour fermer l'équation 4.34. En effet, une mauvaise prédiction de cette grandeur se répercute sur la forme de $\overline{P}(c^*)$ et donc sur l'estimation du taux de réaction chimique de l'avancement de réaction ainsi que sur la prédiction de la vitesse de propagation de la flamme. Cette grande sensibilité à la modélisation de la dissipation des fluctuations de l'avancement de réaction est une limite importante de la modélisation de la combustion turbulente dans un contexte RANS.

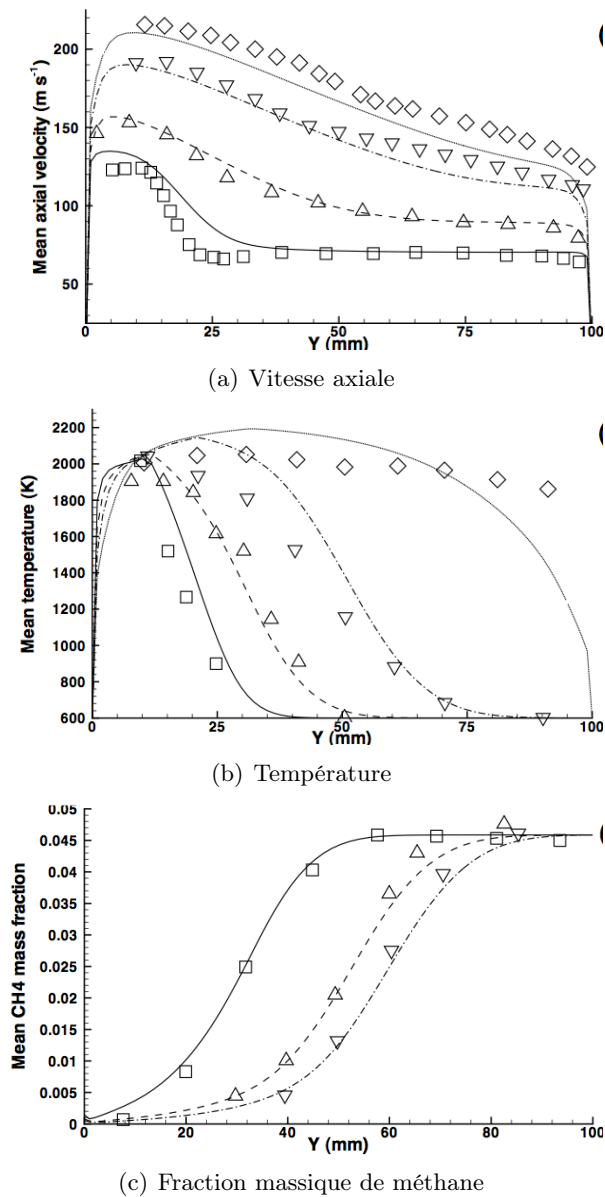


FIGURE 4.6 – Profils transversaux pour différentes positions axiales x de la vitesse axiale moyenne, de la température moyenne et de la fraction massique moyenne de méthane. Symboles : données expérimentales issues des travaux de Moreau et Boutier (1977) ; Lignes : simulation. Traits pleins et carrés : $x = 42$ mm ; traits tiretés et triangles orientés vers le haut : $x = 122$ mm ; Traits mixtes et triangles orientés vers le bas : $x = 322$ mm ; Traits pointillés et losanges : $x = 922$ mm.

Flamme jet dans un écoulement d'air vicié

La flamme étudiée par Cabra *et al.* (2005), à laquelle nous avons fait référence dans le paragraphe 2.3.3, a été conçue pour reproduire la stabilisation des flammes turbulentes par un écoulement d'air mélangé avec des gaz brûlés chauds. Dans la configuration étudiée (Cabra *et al.* 2002), un brûleur de 4.57 mm de diamètre injecte un mélange H_2 / N_2 dans un écoulement d'air vicié chaud généré par la combustion d'un mélange pauvre d'air et d'hydrogène. La prédiction de la position de la flamme est un véritable défi car celle-ci est très sensible à la température de l'air vicié (Gordon *et al.* 2007) : en effet la hauteur de décollement varie d'un facteur deux pour une variation d'une vingtaine de Kelvin. Nous simulons ici d'abord la configuration où la température annoncée de l'air vicié est de 1045K, mais Cabra *et al.* (2002) ont reporté une incertitude expérimentale de 3 % sur la température. Nous proposerons ici d'ajuster la température de l'air vicié à 1052 K, compatible avec l'incertitude expérimentale de 3 %, afin d'obtenir numériquement la même hauteur de décollement que celle relevée dans l'expérience.

Le modèle UTAC adiabatique, couplé aux équations RANS selon le formalisme décrit dans le paragraphe 4.2.2 est implanté dans le code CFX (ANSYS 2010). Un maillage 2-D axi-symétrique de 69 000 éléments a été utilisé pour effectuer la simulation numérique. La figure 4.7 montre les champs 2-D de la température et de la fraction massique de OH. Nous vérifions visuellement que le choix de la température initiale de l'écoulement d'air vicié de 1052 K permet de capturer la position de la flamme. Les profils radiaux de la fraction de mélange et de sa variance sont tracés respectivement sur les figures 4.8(a) et 4.8(b) à six positions axiales : $X/d = 8, 9, 10, 11, 14$ et 26. Le bon accord entre la simulation numérique et les expériences témoigne de la capacité de la simulation à reproduire le mélange du jet. Les profils radiaux de température sont montrés sur la Fig. 4.8(c). Aux trois premières positions $X/d = 8, 9$ et 10, la combustion n'a pas débutée ou n'est pas encore visible sur les profils de température. L'allumage est observé d'abord dans des conditions de mélange pauvre en combustible, favorables à l'auto-allumage, puis celui-ci s'étend aux autres valeurs de richesse. Le même constat est observé dans la simulation numérique comme dans les mesures expérimentales. Les fractions massiques d'espèces chimiques, qui ne sont pas transportées, sont extraites de la table et comparées aux profils radiaux mesurés expérimentalement sur la Fig. 4.9. Simulation et expérience sont en bon accord.

Enfin, cinq simulations RANS sont comparées. Elles diffèrent par la température initiale de l'écoulement d'air vicié : 1030 K, 1038 K, 1045 K, 1052 K (cas de référence) et 1060 K. La hauteur de flamme prédite à l'issue de chaque calcul RANS est reportée sur la Fig. 4.10(a). Les prédictions sont également

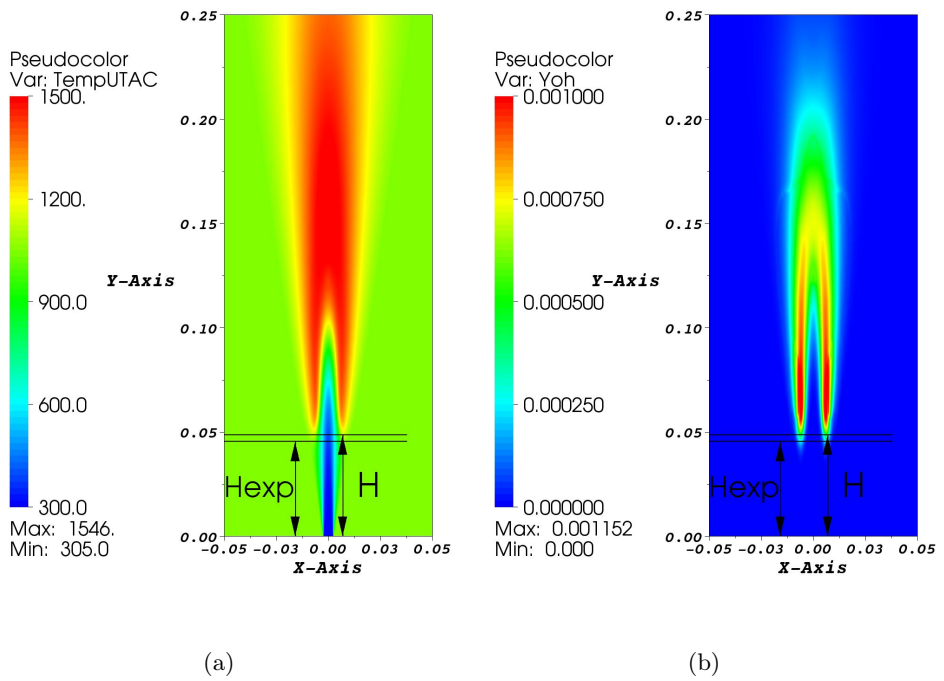


FIGURE 4.7 – Contour de température (a) et de fraction massique d'OH moyenne (b) dans la flamme de Cabra H_2/N_2 (Vicquelin 2010).

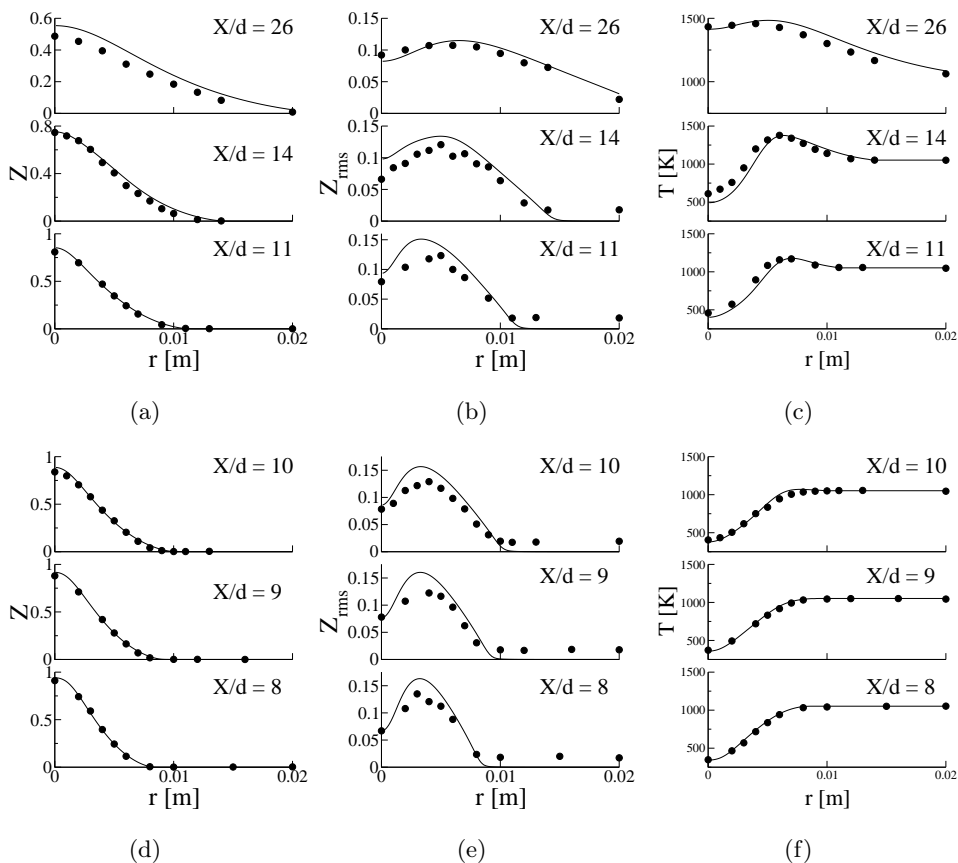


FIGURE 4.8 – *Flamme de Cabra H_2/N_2 . Profils radiaux à six positions axiales ($X/d = 8, 9, 10, 11, 14$ et 26) de la fraction de mélange moyenne (a,d), des RMS de la fraction de mélange (b,e) et de la température moyenne (c,f). Traits pleins : calcul RANS avec le modèle UTaC. Symboles : données expérimentales. (Vicquelin 2010).*

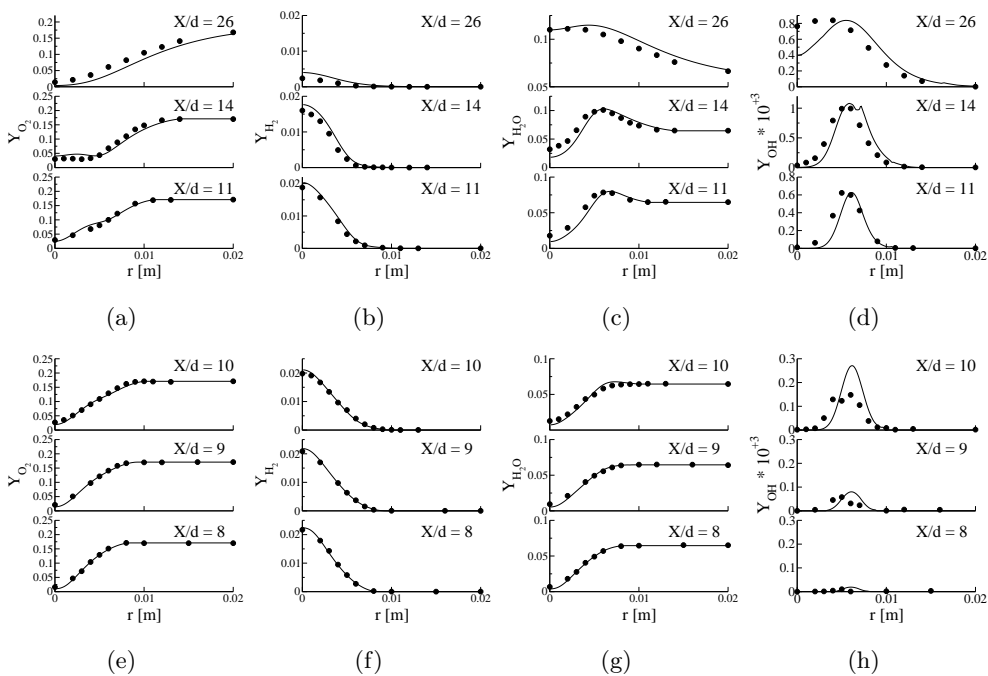


FIGURE 4.9 – Profils des fractions massiques moyennes des espèces chimiques. Celles-ci sont extraites de la table UTaC (traits pleins) puis comparés aux valeurs mesurées (symboles). (a,e) Profils radiaux de O_2 . (b,f) Profils radiaux de H_2 . (c,g) Profils radiaux de H_2O . (d,h) Profils radiaux de OH (Vicquelin 2010).

comparées à d'autres mesures publiées (Gordon *et al.* 2005; Wu *et al.* 2003). Les disparités entre les données sont en grande parties dues aux incertitudes de mesure absolues la température de l'écoulement d'air vicié T_{coflow} . Au sein de la même campagne expérimentale, les mesures relatives de la variation de température d'injection de l'oxydant sont cependant plus précises. Ainsi pour permettre des comparaisons entre les campagnes de mesure ou de simulation, la hauteur de décollement est tracée en fonction la variation de température de l'écoulement d'air vicié $\Delta T_{coflow} = T_{coflow} - T_{ref}$ où T_{ref} est la température pour laquelle la hauteur de décollement de la flamme égale $10D$ avec D le diamètre de l'injecteur central. Les courbes, tracées sur la Fig 4.10(b) se superposent, dont celle issue de la prédiction du modèle UTaC. Ces résultats témoignent de la capacité du modèle UTaC à prédire la position de la flamme lorsque celle-ci est pilotée à la fois par des phénomènes d'auto-allumage et par des effets diffusifs.

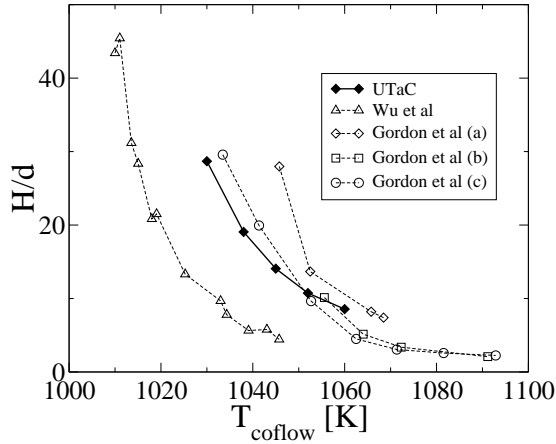
4.2.6 Réduction de la taille des bases thermochimiques en exploitant les propriétés auto-similaires des flammes turbulentes

Les grandeurs thermochimiques moyennes sont tabulées en fonction de toutes les valeurs possibles des moments d'ordre 1 et 2 des coordonnées de la base. Par exemple, dans le cas d'une tabulation FPI-PCM adiabatique, le taux de réaction chimique de la moyenne de l'avancement de la réaction qui apparaît dans l'Eq. 4.33 est stocké dans une base de dimension 4 ($\tilde{z}, S_z, \bar{c}, S_c$) :

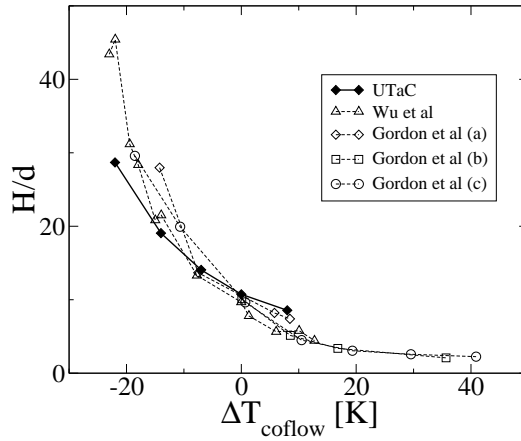
$$\tilde{\omega}_{Y_c} = \tilde{\omega}_{Y_c}(\tilde{z}, S_z, \bar{c}, S_c) \quad (4.66)$$

où $S_z = \tilde{z}'^2 / \tilde{z}(1 - \tilde{z})$ et $S_c = \bar{c}'^2 / \bar{c}(1 - \bar{c})$ sont respectivement les taux de ségrégation des variables z et c . Si cette méthodologie est nécessaire pour limiter le coût CPU, son implantation peut introduire des problèmes d'encombrement de mémoire vive. En effet, dans un contexte de calculs parallèles, les bases de chimie tabulée doivent être chargées sur la mémoire vive locale de chaque processeur afin de limiter les communications. Si le nombre de coordonnées de la table devient important, la taille de la base de donnée peut devenir prohibitive. Des stratégies ont été développées pour réduire la taille des bases de chimie tabulées. Nous citerons par exemple la méthode ISAT (In Situ Adaptive Tabulation) (Pope 1997) ou l'utilisation de réseaux de neurones (Flemming *et al.* 2005; Ihme *et al.* 2007).

Une autre stratégie que nous développons ici consiste à exploiter les propriétés auto-similaires des flammes prémélangées. Cette méthodologie a été proposée initialement par Ribert *et al.* (2006) pour réduire la taille des bases FPI dans un contexte de combustion laminaire partiellement prémélangée. Cette



(a)



(b)

FIGURE 4.10 – Sensibilité de la hauteur de décollement de la flamme à T_{coflow} (a) et ΔT_{coflow} (b). Les données expérimentales de Gordon et al. (2005) and Wu et al. (2003) sont introduites (Vicquelin 2010).

étude montre que les fractions massiques d'espèces et les taux de réaction se confondent sur des courbes 1-D, lorsque l'on utilise un jeu réduit de paramètres. Par exemple dans le contexte d'une tabulation FPI, le taux de réaction de la variable d'avancement de réaction $\dot{\omega}_{Y_c}(c, z)$ se réécrit :

$$\dot{\omega}_{Y_c}(c, z) = \Omega_{Y_c}(z) \dot{\omega}_{Y_c}^+ \left(\frac{c - c_1(z)}{c_2(z) - c_1(z)} \right) \quad (4.67)$$

où $\Omega_{Y_c}(z)$, $\dot{\omega}_{Y_c}^+$, $c_1(z)$ et $c_2(z)$ sont quatre vecteurs. Cette formulation permet une importante réduction de la table bidimensionnelle en quatre tables mono-dimensionnelles.

Cette technique a ensuite été étendue à la combustion turbulente par Veynante *et al.* (2008). Dans ce cas, la forme du taux de réaction est sensible à l'intensité turbulente dans le front de flamme. Par exemple, pour un faible taux de turbulence, $S_c \rightarrow 0$ et $\overline{P}(c^*)$ tend vers une fonction Dirac centrée sur \bar{c} , et le taux de réaction moyen ressemble à celui rencontré dans une flamme laminaire. Quand la turbulence augmente, $S_c \rightarrow 1$ et l'allure du taux de réaction devient parabolique. Pour mettre en avant les propriétés auto-similaires (pour un niveau de fluctuations turbulentes donné), le taux de réaction est reformulé ainsi :

$$\tilde{\omega}_{Y_c} = \max(\tilde{\omega}_{Y_c}) F_c(\bar{c}, S_c, \tilde{z}, S_z) G_c(S_c, \tilde{z}, S_z) \quad (4.68)$$

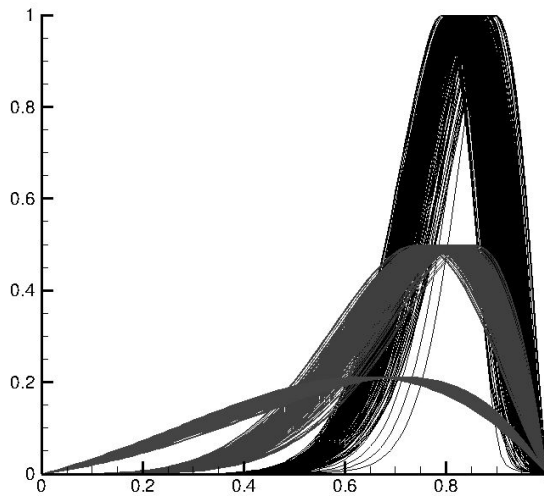
où

$$F_c = \frac{\tilde{\omega}_{Y_c} \max(\tilde{\omega}_{Y_c} | S_c)}{\max(\tilde{\omega}_{Y_c}) \max(\tilde{\omega}_{Y_c} | S_c, \tilde{z}, S_z)} \quad (4.69)$$

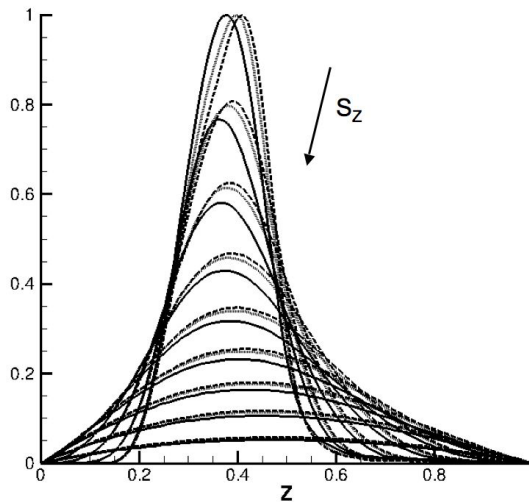
$$G_c = \frac{\max(\tilde{\omega}_{Y_c} | S_c, \tilde{z}, S_z)}{\max(\tilde{\omega}_{Y_c} | S_c)} \quad (4.70)$$

La fonction $F_c(\bar{c}, S_c, \tilde{z}, S_z)$ dépend *a priori* des quatre coordonnées de la table. La figure 4.11(a) trace F_c en fonction de \bar{c} pour trois différentes valeurs de la ségrégation S_c à partir de données extraites de la base chimique originale. Pour une valeur de S_c , la base de données contient environ 2 000 courbes : 101 valeurs possibles pour la fraction de mélange moyenne \tilde{z} et 21 valeurs possibles pour son taux de ségrégation S_z ($0 < S_z < 1$). Seuls les profils qui présentent un maximum supérieur à $0.01 \times \max(\tilde{\omega}_{Y_c} | S_c)$ sont considérés. La plupart des profils se confondent sur des courbes simples identifiées seulement par \bar{c} et le facteur de ségrégation S_c . Un léger décalage est observé pour les cas laminares où $S_c \rightarrow 0$ mais cette situation n'est pas rencontrée en pratique dans des simulations RANS. Aux vues de ces résultats, un taux de réaction réduit $\tilde{\omega}_{Y_c}^+$, fonction seulement de (\bar{c}, S_c) , est défini :

$$\tilde{\omega}_{Y_c}^+(\bar{c}, S_c) = \left(\overline{F_c(\bar{c}, S_c, \tilde{z}, S_z)} | \bar{c}, S_c \right) \quad (4.71)$$

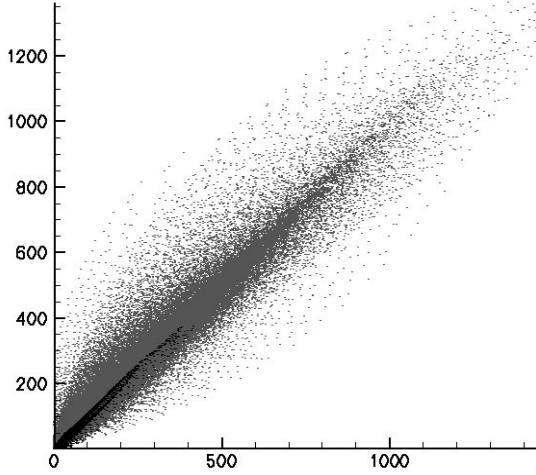


(a) F_c (Eq. 4.69) en fonction de \bar{c} pour trois valeurs du taux de ségrégation de l'avancement de réaction. $S_c=0$ (1074 profils), 0.116 (1100 profils) and 0.460 (1121 profils).



(b) G_c (Eq. 4.70) en fonction de \tilde{z} pour 9 valeurs du taux de ségrégation de la fraction de mélange et pour trois valeurs de S_c . Traits pleins : $S_c=0$; Traits-tirets : $S_c = 0.116$ et traits pointillés : $S_c = 0.460$.

FIGURE 4.11 – *Etude des fonctions F_c et G_c (Fiorina et al. 2009).*



(a)

FIGURE 4.12 – Taux de production chimique $\tilde{\omega}_{Y_c}$ estimé en utilisant les propriétés auto-similaires des flammes turbulentes (Eqs 4.73) en fonction du taux de production chimique moyen original $\tilde{\omega}_{Y_c}(\bar{c}, S_c, \tilde{z}, S_z)$. Les points gris représentent l'ensemble des données de la table pour \bar{c} , S_c , \tilde{z} and S_z variant entre 0 et 1. Les points noirs sont les points de la base atteints durant la simulation RANS (Fiorina et al. 2009).

La fonction G_c , définie par l'Eq. 4.70, dépend *a priori* des trois variables (S_c , \tilde{z} and S_z). La figure 4.11(b) trace G_z en fonction de \tilde{z} pour 9 valeurs de S_z et trois valeurs de S_c . De nouveau, des similarités sont observées entre les profils et G_c peut être approchée par sa moyenne conditionnée par \tilde{z} et S_z :

$$G_c^+(\tilde{z}, S_z) = \left(\overline{G_c(S_c, \tilde{z}, S_z) | \tilde{z}, S_z} \right) \quad (4.72)$$

Le taux de réaction peut donc finalement être estimé par :

$$\tilde{\omega}_{Y_c} = \max(\tilde{\omega}_{Y_c}^+) \tilde{\omega}_{Y_c}^+(\bar{c}, S_c) G_c^+(\tilde{z}, S_z) \quad (4.73)$$

où les fonctions $\tilde{\omega}_{Y_c}^+(\bar{c}, S_c)$ et $G_c^+(\tilde{z}, S_z)$ peuvent être tabulées. Ainsi la base, stockée initialement dans une table 4-D, s'enregistre maintenant dans un vecteur 1-D et deux tables 2-D. L'approximation est comparée à la formulation exacte sur la Fig. 4.12 où le taux de production chimique $\tilde{\omega}_{Y_c}$ estimé par l'Eq 4.73 est tracé en fonction de l'expression originale donnée par l'Eq. 4.66 pour une base représentative de la combustion de méthane et d'air. L'accord entre les deux méthodes est très bon, avec un coefficient de corrélation de 0.98. Les petites

différences sont obtenues principalement dans les situations peu turbulentes ($S_c = 0$) ou prémélangées ($S_z = 0$).

La simulation FPI-PCM de la flamme D, décrite dans le paragraphe 4.2.5, a été effectuée avec la base de chimie tabulée originale et la base de chimie tabulée moyennée construite selon l'Eq. 4.73. Dans la base de chimie tabulée originale, $101 \times 21 \times 101 \times 21 = 4\,498\,641$ données sont enregistrées alors que la base de données réduite ne contient que $101 \times 21 + 101 \times 21 + 1 = 4\,243$ grandeurs. Les résultats de l'étude, décrits dans Fiorina *et al.* (2009) montrent que les deux méthodes de stockage des données chimiques aboutissent aux mêmes résultats.

4.3 Modélisation de la combustion turbulente pour des simulations aux grandes échelles.

4.3.1 Modélisation de la propagation d'une flamme prémélangée

Description du contexte

Les problématiques soulevées en LES sont différentes que celles rencontrées en RANS. Les deux approches diffèrent notamment par la taille des échelles spatiales qui sont résolues. Une simulation RANS résout l'épaisseur moyenne du front de flamme qui est de l'ordre du centimètre et nécessite un maillage dont la taille reste raisonnable (Poinsot et Veynante 2005). La situation est différente en LES où le code de calcul résout la position instantanée de la flamme dont l'épaisseur de la zone réactionnelle est généralement plus petite que la taille des cellules qui constituent le maillage. Pour permettre la résolution numérique de la propagation de la flamme, l'épaisseur du front de la flamme filtrée doit être suffisamment grande pour que le taux de réaction chimique soit discrétisé sur quelques noeuds du maillage. Par exemple, lorsque que le schéma numérique du troisième ordre TTGC (Colin et Rudgyard 2000) est utilisé, Auzillon *et al.* (2011) ont observé que l'épaisseur réactionnelle doit être résolue sur au minimum 4 noeuds pour conserver la vitesse de propagation de la flamme. Le filtre LES de taille Δ associé implicitement à la flamme est donc nécessairement plus grand que la taille des mailles Δ_x .⁵

Nous nous placerons dans le régime de flammelette, c'est à dire que la structure interne de la flamme n'est pas affectée par la turbulence ou par la courbure.

5. Par contre, pour exploiter au mieux la résolution du maillage, la taille du filtre LES retenue pour fermer les flux turbulents non-résolus de la quantité de mouvement est généralement supposée égale à la taille de maille Δ_x . Cette incohérence, souvent incontournable en pratique, soulève un problème fondamental.

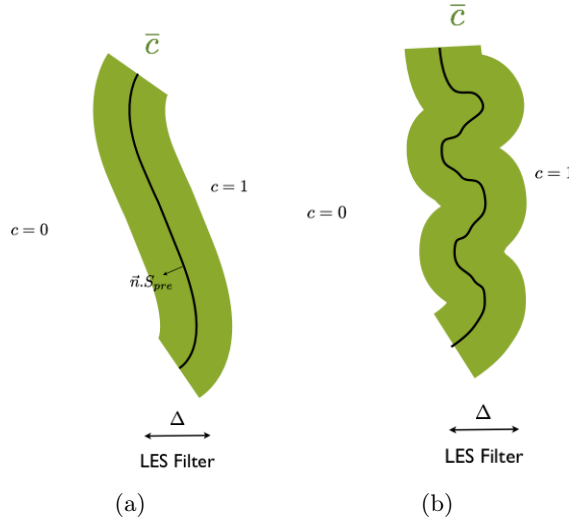


FIGURE 4.13 – Situations d'interactions flamme turbulente en combustion pré-mélangée. a) Plissement résolu à l'échelle LES ; b) Plissement non résolu à l'échelle LES.

Dans ce cas, la vitesse de propagation S_l de la flamme dans la direction normale à son front x_n s'écrit :

$$\rho_0 S_l = \frac{1}{Y_c^{eq} - Y_c^{fr}} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho^* \dot{\omega}_{Y_c}^*(x_n) dx_n \quad (4.74)$$

où ρ_0 est la masse volumique des gaz frais. Le symbole φ^* indique que φ est issu d'une flamme 1-D plane prémélangée laminaire calculée dans la direction x_n . Ainsi $\dot{\omega}_{Y_c}^*(x_n)$ est le taux de réaction chimique de la variable d'avancement Y_c dans une flammelette 1-D prémélangée.

Pour une taille de filtre Δ associée à la flamme, deux situations sont envisageables comme l'illustre la figure 4.13. Soit le plissement de la flamme est entièrement résolu à l'échelle du filtre. Dans ce cas, la turbulence n'affecte pas le déplacement du front de flamme filtré qui se propage à la vitesse $S_\Delta = S_l$. Nous appellerons dégénérescence laminaire la capacité d'un modèle de combustion à reproduire ce régime. Un autre cas de figure est rencontré lorsque la flamme est plissée en sous-maille. Dans ce cas, la turbulence a augmenté la surface de la flamme en sous-maille et par conséquent le front de flamme se propage à une vitesse $S_\Delta = \Xi S_l$, où $\Xi = |\nabla c|/|\nabla \bar{c}|$ est le taux de plissement non résolu de la flamme.

L'analyse par Fiorina *et al.* (2010) de la simulation LES d'une flamme pré-mélangée turbulente caractéristique des foyers aéronautiques met en évidence l'importance de ces deux régimes. En effet, la Fig. 4.14 trace la distribution des

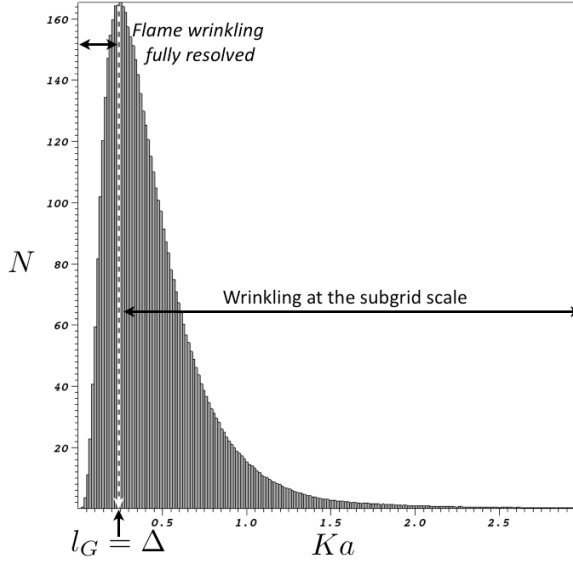


FIGURE 4.14 – Distribution des points de la simulation aux grandes échelles d'un foyer aéronautique en fonction du nombre de Karlovitz. Les données sont extraites de la simulation de la configuration PRECCINSTA mesurée par Meier *et al.* (2007). Seuls les points situés dans le front de flamme filtré ont été tracés. i.e. pour $0.01 < \tilde{c} < 0.99$ (Fiorina *et al.* 2010).

points qui constituent le front de flamme en fonction du nombre de Karlovitz relié, dans le cadre de la LES, aux fluctuations de vitesse en sous-maille v'_{Δ} et à l'échelle de la flamme laminaire δ_l (Pitsch 2006) :

$$Ka^2 = \frac{\delta_l}{S_l^{03}} \varepsilon = \left(\frac{v'_{\Delta}}{S_l^0} \right)^3 \frac{\delta_l}{\Delta} \quad (4.75)$$

Il est premièrement observé que la plupart des points du calcul de la chambre PRECCINSTA (Meier *et al.* 2007) sont situés dans le régime de flammelette ($Ka < 1$). La structure chimique de la flamme demeure laminaire, comme le supposent les modèles de chimie tabulée de type FPI. En s'appuyant sur l'analyse de Pitsch (2006), nous introduisons ensuite la longueur de Gibson l_G qui indique la plus petite échelle de plissement de la flamme. Le plissement est résolu entièrement lorsque la longueur de Gibson l_G est égale à la taille du filtre Δ , ce qui équivaut à vérifier la relation $u'_{\Delta} = S_l$. La Fig. 4.14 indique que environ 30% des points de la flamme présentent des conditions où $\Delta < l_G$. Cela signifie que dans ces situations le plissement de la flamme est complètement résolu à l'échelle de la maille ($\Xi = 1$). Cette tendance s'accroît avec l'augmentation

de la résolution des maillages, permise par l'amélioration des puissances de calcul disponibles. Ainsi, un enjeu majeur de la modélisation de la combustion turbulente pour des simulations LES est de prédire la vitesse de propagation de la flamme dans ces deux régimes. Dans la partie suivante, nous allons décrire les trois principales approches existantes et discuter de leur compatibilité avec la chimie tabulée.

Stratégies possibles

G-Equation. Cette approche consiste à résoudre un champ scalaire dont une iso-surface caractérise la position instantanée de la flamme. L'objectif est de décrire la propagation de la flamme sans chercher à résoudre sa structure interne. Ce type d'approche, appelé *G-equation*, a été initialement développé dans un contexte RANS (Kerstein *et al.* 1988) puis reformulé pour la LES (Menon et Jou 1991; Pitsch 2006). La grandeur scalaire G utilisée pour capturer la position de la flamme est solution de l'équation de transport :

$$\frac{\partial \rho \tilde{G}}{\partial t} + \frac{\partial \rho \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \rho_0 \tilde{S}_T |\nabla \cdot \tilde{G}| \quad (4.76)$$

La position de la flamme, dont l'épaisseur est négligée, est identifiée par une valeur spécifique prise par le scalaire : $\tilde{G} = G^*$. Cette approche est performante pour prédire la propagation d'un front de flamme lorsque elle est combinée à des méthodes numériques dédiées à la capture de surfaces en déplacement (Moureau *et al.* 2007). Le point faible est que, comme l'épaisseur de la flamme est supposée nulle, le champ de masse volumique présente une discontinuité. Ainsi, il est plus difficile pour des raisons numériques de tenir compte de l'action de la combustion sur l'écoulement. Le transport de l'équation de G doit donc être combiné avec une méthode de reconstruction de l'épaisseur de la flamme. Une solution proposée par Moureau *et al.* (2009) est de résoudre une équation supplémentaire pour l'avancement de réaction dont le terme de production est synchronisé avec la prédiction de la position de la flamme indiquée par la solution de l'Eq. 4.76. Moureau *et al.* (2009) ont démontré la faisabilité de cette approche dans le cadre d'une chimie simple. L'introduction de la chimie complexe est plus délicate. Des études ont été proposées dans ce sens (Li *et al.* 2009; Roux et Pitsch 2010) mais beaucoup d'efforts restent à fournir avant de pouvoir appliquer cette approche à des systèmes industriels complexes.

Modèle de flamme épaissie. Une solution pour propager une flamme sur un maillage grossier est d'épaissir artificiellement son front en modifiant la diffusion moléculaire et la constante pré-exponentielle de la loi d'Arrhenius (Butler et O'Rourke 1977; Colin *et al.* 2000). Cette approche, nommée Thickened

Flame for LES (TFLES), consiste à épaissir la flamme F fois en effectuant la transformation :

$$D \rightarrow D \cdot F \quad \text{et} \quad \dot{\omega} \rightarrow \frac{\dot{\omega}}{F} \quad (4.77)$$

où D le coefficient de diffusion et $\dot{\omega}$ le taux de réaction. Cette transformation permet de conserver la vitesse de flamme laminaire tout en augmentant d'un facteur F son épaisseur. L'équation de transport des fractions massiques épaissies \hat{Y}_k des espèces chimiques s'écrit :

$$\frac{\partial \hat{\rho} \hat{Y}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\hat{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \hat{Y}_k) = \nabla \cdot \left(\hat{\rho} D \Xi F \nabla \hat{Y}_k \right) + \frac{\Xi \hat{\rho} \dot{\omega}_{Y_k}}{F} \quad (4.78)$$

où le taux de réaction chimique $\dot{\omega}_{Y_k}$ est modélisé par une loi d'Arrhénius. L'introduction du plissement de sous-maille de la flamme Ξ dans les termes de diffusion et de réaction de l'Eq. 4.78 assure que la flamme se propage à la vitesse $S_\Delta = \Xi S_l$. En pratique, le facteur Ξ est généralement estimé par des modèles analytiques (Colin *et al.* 2000; Charlette *et al.* 2002). Wang *et al.* (2011) ont cependant montré que la précision de ces modèles très simples peut être améliorée lorsque leurs paramètres sont estimés de manière dynamique.

Le modèle TFLES a été développé de manière empirique. En particulier, il n'y a pas de justification théorique qui permet de lier les grandeurs épaissies dont la variable \hat{Y}_c aux grandeurs filtrées qui interviennent dans les équations LES de l'écoulement. Malgré cela, il est très performant : il est simple à implanter dans un code de CFD (structuré ou non structuré), il ne nécessite pas de ressource CPU particulière et prédit correctement la propagation du front de la flamme. Pour ces raisons c'est probablement le modèle le plus fréquemment utilisé pour simuler des chambres industrielles (Roux *et al.* 2005; Boileau *et al.* 2008).

Cette méthodologie peut facilement être transposée dans le cadre de la chimie tabulée en régime prémélangé (Albouze *et al.* 2009; Kuenne *et al.* 2011). La structure chimique de la flamme est indiquée par la variable d'avancement de réaction épaissie \hat{Y}_c , solution de l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial \hat{\rho} \hat{Y}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\hat{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \hat{Y}_c) = \nabla \cdot \left(\hat{\rho} D \Xi F \nabla \hat{Y}_c \right) + \frac{\Xi \dot{\omega}_{Y_c}(\hat{Y}_c)}{F} \quad (4.79)$$

où $\dot{\omega}_{Y_c}(\hat{Y}_c)$, le taux de réaction chimique de la variable d'avancement de réaction épaissie est tabulé à partir d'une flamme laminaire 1-D prémélangée résolue en chimie complexe (cf. méthode FPI, paragraphe 2.3.1). Cette approche a également été récemment suivie par Kuenne *et al.* 2011 pour réaliser la simulation LES d'une flamme stratifiée en tabulant la chimie par une approche de type FPI/FGM.

Modèle de flamme filtrée. Une autre stratégie possible est de résoudre une variable d'avancement de réaction filtrée, solution de l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_c) &= \nabla \cdot (\overline{\rho D \nabla Y_c}) - \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_c - \bar{\rho} \tilde{\omega}_{Y_c}) \\ &+ \bar{\rho} \tilde{\omega}_{Y_c} \end{aligned} \quad (4.80)$$

où chaque terme du membre de droite nécessite un modèle de fermeture. La résolution de l'équation 4.80 nécessite que la taille du filtre associé à la flamme soit plus grand que les tailles des cellules et ceci afin de permettre la résolution de la structure de la flamme filtrée. Différentes approches ont été proposées pour résoudre l'Eq. 4.80. Boger *et al.* (1998) puis Duwig (2007) proposent, dans le cadre d'une chimie simple, de filtrer des flammes 1-D laminares afin de modéliser les termes de sous-maille. Galpin *et al.* (2008) et Domingo *et al.* (2008) ont proposé de conserver le formalisme FPI-PCM, développé dans le paragraphe 4.2.2 pour des modélisation RANS afin d'introduire la chimie tabulée dans un contexte LES. Les FDF de l'avancement de la réaction et de la fraction de mélange sont modélisées par des fonctions β .

Toutes les stratégies de modélisation proposées ne permettent pas nécessairement la dégénérescence laminaire du modèle. Pour étudier cette propriété, nous avons conduit des tests sur une flamme 1-D stoechiométrique laminaire prémélangée propane/air calculée avec le code PREMIX (Kee *et al.* 1985) et en utilisant le mécanisme GRI 3.0 (Smith *et al.* 1999). Cette flamme 1-D a été filtrée afin de permettre des tests *a priori* de la β -FDF. Les résultats de l'étude, dont le détail figure dans Fiorina *et al.* (2010), sont résumés au travers de la Figure 4.15 où est tracée la vitesse de propagation du front de flamme filtré en fonction du rapport Δ/δ_l . Δ est la taille du filtre associé à la flamme et $\delta_l = 1/\max|\nabla c|$ est une épaisseur caractéristique de la flamme. Quand $\Delta/\delta_l < 1$ l'effet de la fonction β -FDF sur la structure de la flamme est limité et la propagation de la flamme est correctement reproduite. Cependant, lorsque la taille du filtre est plus grande que le front de flamme, ce qui est le cas dans la plupart des applications réelles, la vitesse de propagation du front de flamme filtré est largement surestimée par la fonction β , et ceci jusqu'à un facteur de plus de 2.5. Ceci signifie qu'en pratique, la β -PDF n'est pas adéquate lorsque le plissement de sous-maille est résolu.

Une solution alternative à la fonction β est celle suivie par Boger *et al.* (1998) et Duwig (2007). Une fonction filtre normalisée $F(x)$ est utilisée directement pour estimer le taux de réaction filtré. Si le problème est mono-dimensionnel, le taux de réaction filtré s'écrit :

$$\tilde{\omega}_{Y_c}(x) = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x') \dot{\omega}_{Y_c}(x') F(x - x') dx', \quad (4.81)$$

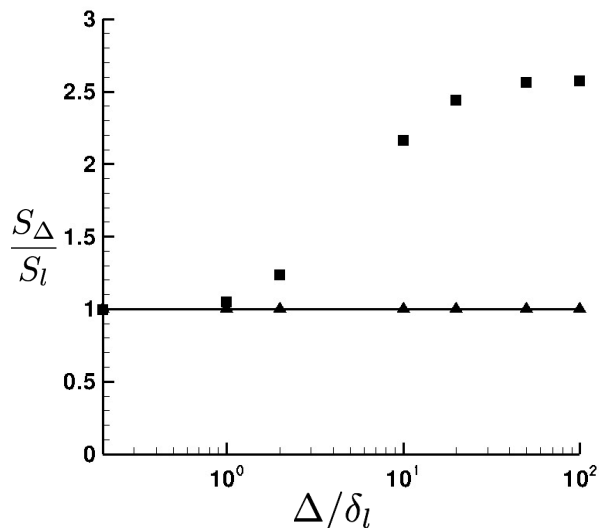


FIGURE 4.15 – Estimation de la vitesse de propagation $\rho_0 S_\Delta = 1 / (Y_c^{eq} - Y_c^{fr}) \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\rho} \tilde{\omega}_{Y_c}(x) dx$ d'un front de flamme laminaire filtré pour différentes tailles de filtre. Le trait plein est la solution théorique qui correspond à $S_\Delta = S_l$. Les symboles représentent les solutions obtenues lorsque le taux de réaction filtré est modélisé par une β -FDF (carrés) ou par une filtre Gaussien (triangles). Les modèles sont testés a priori c'est à dire en s'appuyant sur le même profil de variable d'avancement filtrée, estimé à partir de la solution d'une flamme laminaire de référence filtrée.

Comme par définition, $F(x)$ satisfait $\int_{-\infty}^{+\infty} F(x)dx = 1$, alors la relation $S_\Delta = S_l$ est toujours satisfaite. En effet :

$$\begin{aligned}
 \rho_0 S_\Delta &= \frac{1}{Y_c^{eq} - Y_c^{fr}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\rho} \tilde{\omega}_{Y_c}(x) dx \\
 &= \frac{1}{Y_c^{eq} - Y_c^{fr}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x') \dot{\omega}_{Y_c}(x') F(x - x') dx' dx \\
 &= \frac{1}{Y_c^{eq} - Y_c^{fr}} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x') \dot{\omega}_{Y_c}(x') \left[\int_{-\infty}^{+\infty} F(x - x') dx \right] dx' \\
 &= \frac{1}{Y_c^{eq} - Y_c^{fr}} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x') \dot{\omega}_{Y_c}(x') dx' \\
 &= \rho_0 S_l^0
 \end{aligned} \tag{4.82}$$

Cette propriété est vérifiée en pratique sur la Fig. 4.15 où la vitesse de propagation S_Δ du front filtré est *a priori* calculée en modélisant le taux de réaction de l'avancement de réaction filtré par l'Eq. 4.81.

Ainsi la fonction filtre possède l'avantage par rapport à la fonction β d'assurer la dégénérescence laminaire du modèle. Suite à ce constat, nous proposons dans le paragraphe suivant un modèle de fermeture de l'équation d'avancement de réaction basé sur le filtrage explicite de flamme 1-D laminaire prémélangées résolues en chimie complexe. Ce modèle est nommé F-TACLES (Filtered Tabulated Chemistry for LES).

F-TACLES (Filtered TABulated Chemistry for LES)

Dans le régime de flammelettes, la structure de la flamme dans la direction \mathbf{n} normale à son front est supposée identique à la structure d'une flamme plane laminaire prémélangée libre. La solution de cette flamme laminaire peut facilement être déterminée dans un contexte de chimie détaillée en utilisant des codes 1-D chimie complexe tel PREMIX (Kee *et al.* 1985). Ensuite, l'application d'un opérateur filtre $F(x)$ (par exemple une fonction Gaussienne) fournit la structure 1-D de la flamme filtrée. A titre d'exemple, la figure 4.16 présente chaque terme de l'Eq. 4.80 dans le cas d'une flamme 1-D prémélangée stœchiométrique résolue avec le schéma cinétique GRI 3.0 (Smith *et al.* 1999) filtrée par un filtre Gaussien dont la taille varie. En filtrant une flamme 1-D prémélangée pour une taille de filtre Δ , nous pouvons constituer une base de données qui permet de fermer l'Eq. 4.80. Le détail de la fermeture de chaque terme est indiqué ci-dessous.

Taux de réaction chimique filtré $\tilde{\omega}_{Y_c}$. Nous supposons le régime de flammelettes. Auzillon *et al.* (2011) montre que dans ce cas le front de flamme

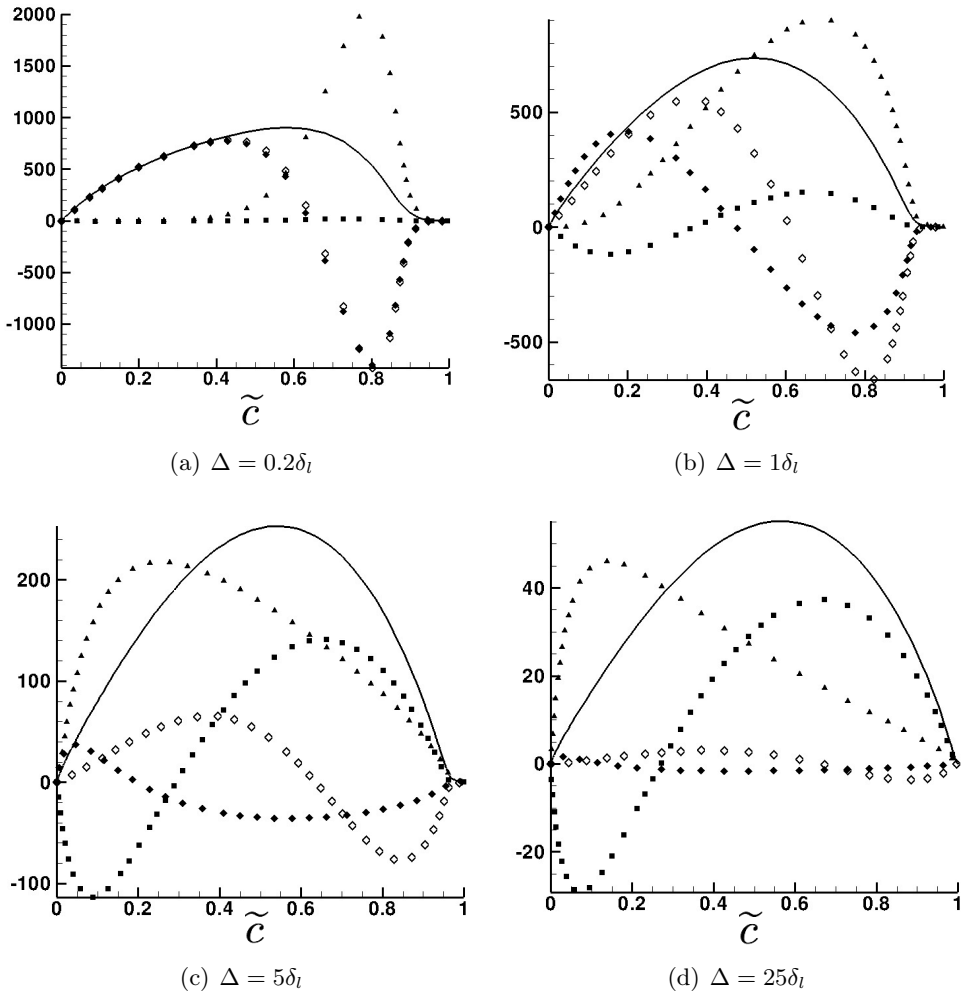


FIGURE 4.16 – Termes (en $\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$) en fonction de $\tilde{c} = \tilde{Y}_c / (Y_c^{eq} - Y_c^{fr})$ de l'équation de transport de la variable d'avancement de réaction filtrée d'une flamme 1-D stationnaire plane : $\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}^* \tilde{Y}_c^*}{\partial x^*} = \frac{\partial}{\partial x^*} \left(\tilde{\rho} D \frac{\partial \tilde{Y}_c^*}{\partial x^*} \right) - \frac{\partial}{\partial x^*} \left(\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}^* \tilde{Y}_c^* - \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}^* \tilde{Y}_c^* \right) + \tilde{\rho} \tilde{\omega}_{Y_c}^*$. Chaque contribution est tracée pour différentes valeurs de Δ , la taille de filtre associé à la flamme. — : $\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}^* \tilde{Y}_c^*}{\partial x^*}$. \blacklozenge : $\frac{\partial}{\partial x^*} \left(\tilde{\rho} D \frac{\partial \tilde{Y}_c^*}{\partial x^*} \right)$. \blacksquare : $-\frac{\partial}{\partial x^*} \left(\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}^* \tilde{Y}_c^* - \tilde{\rho} \tilde{\mathbf{u}}^* \tilde{Y}_c^* \right)$. \blacktriangle : $\tilde{\rho} \tilde{\omega}_{Y_c}^*$. \blacklozenge : $\frac{\partial}{\partial x^*} \left(\tilde{\rho} D \frac{\partial \tilde{Y}_c^*}{\partial x^*} \right)$.

à la même structure qu'une flamme plane filtrée puis plissée. Le taux de réaction chimique $\tilde{\omega}_{Y_c}$ se modélise ainsi par (Fiorina *et al.* 2010) :

$$\tilde{\omega}_{Y_c} = \Xi \tilde{\omega}_{Y_c}^*(\tilde{Y}_c, \Delta). \quad (4.83)$$

où Ξ est le plissement de sous-maille. L'exposant * représente les grandeurs extraites d'une flamme 1-D laminaire plane résolue dans la direction spatiale x_n . Le taux de réaction filtré de la flamme 1-D laminaire $\tilde{\omega}_{Y_c}^*(\tilde{Y}_c, \Delta)$ est en pratique pré-calculé et stocké dans une table 2-D en fonction de \tilde{Y}_c et Δ . Le plissement de sous-maille Ξ peut être estimé soit par des lois analytiques dont les constantes sont fixées empiriquement (Colin *et al.* 2000; Charlette *et al.* 2002) ou de manière dynamique (Wang *et al.* 2011) soit en résolvant l'équation de transport de la surface de flamme (Hawkes et Cant 2000).

Terme de diffusion laminaire. Dans de nombreuses approches, ces termes sont généralement négligés ou simplifiés par (Poinsot et Veynante 2005) :

$$\nabla \cdot (\overline{\rho D \nabla Y_c}) \approx \nabla \cdot (\overline{\rho} D \nabla \tilde{Y}_c). \quad (4.84)$$

La figure 4.16 compare les flux de diffusion laminaire exacts $\nabla \cdot (\overline{\rho D \nabla Y_c}^*)$ et l'approximation $\nabla \cdot (\overline{\rho} D \nabla \tilde{Y}_c^*)$ issus d'une flamme laminaire 1-D filtrée à différentes échelles. Quand la taille du filtre Δ est plus petite que l'épaisseur de la flamme δ_l , l'approximation par l'Eq. 4.84 reste valide. Cependant, dès que Δ devient plus grand que δ_l , des différences importantes sont observées entre $\nabla \cdot (\overline{\rho D \nabla Y_c}^*)$ et $\nabla \cdot (\overline{\rho} D \nabla \tilde{Y}_c^*)$. Cette approximation est en réalité très grossière et peut générer des erreurs de l'ordre de 50% sur la prédiction de la vitesse de propagation d'un front filtré (Fiorina *et al.* 2010).

Nous proposons le modèle suivant pour corriger cet effet ⁶ :

$$\nabla \cdot (\overline{\rho D \nabla Y_c}) = \nabla \cdot (\alpha_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \Delta) \rho_0 D_0 \nabla \tilde{Y}_c). \quad (4.85)$$

où le facteur $\alpha_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \Delta)$ est défini par :

$$\alpha_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \Delta) = \frac{\overline{\rho D \left| \frac{\partial Y_c^*}{\partial x^*} \right|}}{\rho_0 D_0 \left| \frac{\partial \tilde{Y}_c^*}{\partial x^*} \right|}. \quad (4.86)$$

6. En pratique l'erreur provient principalement de l'estimation d'un gradient de grandeurs filtrées au sens de Reynolds à partir de grandeurs filtrées au sens de Favre. En effet, en première approximation $\rho D = \text{cst.}$ Donc $\overline{\rho D \nabla Y_c} = \overline{\rho} D \nabla \tilde{Y}_c \neq \overline{\rho} D \nabla \tilde{Y}_c$.

La quantité $\alpha_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \Delta)$ est estimée à partir de la solution de la flamme 1-D filtrée et est tabulée en fonction de \tilde{Y}_c pour une valeur donnée de taille de filtre Δ .

Termes convectifs de sous-maille. Lorsque le plissement est entièrement résolu à l'échelle du filtre de la flamme, les termes convectifs de sous-maille sont exclusivement liés à l'expansion thermique des gaz. Boger (2000) puis Fiorina *et al.* (2010) montrent qu'ils s'expriment à partir de données issues d'une flamme 1-D prémélangée par la relation suivante :

$$-\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_c - \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_c) = -\rho_0 S_l^0 \left(\frac{\partial \bar{Y}_c^*}{\partial x^*} - \frac{\partial \tilde{Y}_c^*}{\partial x^*} \right). \quad (4.87)$$

$$= \Omega_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \Delta) \quad (4.88)$$

Le terme $\Omega_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \Delta) = -\rho_0 S_L^0 \frac{\partial}{\partial x^*} (\bar{Y}_c - \tilde{Y}_c)$ est tracé sur la Fig. 4.16 pour différentes valeurs de Δ (carrés). Pour $\Delta < \delta_l$, les termes convectifs non résolus sont très faibles comparés aux autres flux. Cependant, quand $\Delta \geq \delta_l$, ces flux sont importants et deviennent de nature contre-gradient. La quantité $\Omega_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \Delta)$, estimée à partir de la solution d'une flamme 1-D filtrée, est alors tabulée en fonction de \tilde{Y}_c et Δ .

Nous proposons alors la formulation générale suivante pour tenir compte également des situations où la flamme est plissée à l'échelle de la sous-maille :

$$\begin{aligned} -(\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{c} - \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{c})) &= \Xi \Omega_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \Delta) \\ &+ (\Xi - 1) \nabla \cdot (\alpha_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \Delta)) \rho_0 D_0 \nabla \tilde{Y}_c \end{aligned} \quad (4.89)$$

Dans le premier terme du membre de droite, on retrouve Ω_{Y_c} , la contribution de l'expansion thermique qui est estimée à partir de flammes 1-D prémélangées. Le choix d'une modélisation de cette quantité par une formulation de type "terme source" évite l'implantation d'un opérateur de diffusion négative, préjudiciable au numérique. Le second terme modélise les flux turbulents de transport non-résolus avec une hypothèse de gradient classique.

Equation de transport de \tilde{Y}_c fermée. Pour résumer, l'équation de transport de \tilde{Y}_c est résolue, dans un contexte prémélangé, sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_c) &= \Xi \nabla \cdot (\alpha_{Y_c}(\tilde{c}, \Delta) \rho_0 D_0 \nabla \tilde{Y}_c) \\ &+ \Xi \Sigma_{Y_c}(\tilde{c}, \Delta) \end{aligned} \quad (4.90)$$

où, pour minimiser les accès à la base chimique filtrée, les termes de production chimique filtré et convectifs de sous-maille laminaires sont regroupés dans la quantité $\Sigma_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \Delta) = \Omega_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \Delta) + \tilde{\omega}_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \Delta)$.

Cette formulation suppose que le plissement de la flamme n'affecte pas l'épaisseur du front filtré, ce qui n'est pas exactement le cas en pratique comme en témoigne le post-traitement par Moureau *et al.* (2011) d'une DNS d'une flamme turbulente prémélangée en giration. En effet, même si les structures turbulentes ne pénètrent pas le front de la flamme, pour une même taille de filtre, l'épaisseur d'un front de flamme plissé puis filtré sera plus grande que celle d'une flamme plane filtrée. Néanmoins, cette formulation possède l'avantage d'assurer que la flamme se propage bien à la vitesse $S_\Delta = \Xi S_l$, qui est la propriété essentielle que doit capturer le modèle de combustion.

4.3.2 Modélisation de la propagation d'une flamme dans un milieu stratifié en richesse

Effet de la stratification sur la propagation d'un front

Dans la plupart des configurations réelles, le combustible et le comburant ne sont pas parfaitement prémélangés. Fiorina *et al.* (2005a) et Nguyen *et al.* (2010) ont montré que l'orientation des iso-surfaces de l'avancement de réaction vis à vis des iso-surfaces de la fraction de mélange affecte la structure chimique du front de flamme. Dans une première approche, afin de simplifier la modélisation, nous allons cependant supposer que les isosurfaces de variable d'avancement de réaction normalisée et de fraction de mélanges sont orthogonales. Cette hypothèse équivaut à supposer l'indépendance statistique des variables c et z à l'échelle de la sous-maille. Dans ce cas, Auzillon *et al.* (2011) montrent que le taux de réaction filtré de l'avancement de réaction s'écrit :

$$\bar{\rho}\tilde{\omega}_{Y_c} = \Xi \int_0^1 \langle \rho\dot{\omega}_{Y_c} | z = z' \rangle P(z') dz' \quad (4.91)$$

où $P(z')$ est la FDF de la fraction de mélange. $\langle \rho\dot{\omega}_c | z = z' \rangle$, la valeur filtrée conditionnée du taux de réaction à $z = z'$, est modélisée en filtrant une flamme 1-D prémélangée laminaire dont la richesse correspond à la fraction de mélange z' :

$$\langle \rho\dot{\omega}_{Y_c} | z = z' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho^* \dot{\omega}_{Y_c}^*(x'_n, z') F(x_n - x'_n) dx'_n \quad (4.92)$$

Ainsi, sous ces hypothèses, la vitesse de propagation d'une flamme filtrée qui évolue dans un environnement stratifié en richesse s'écrit :

$$S_\Delta = \Xi \tilde{S}_l \quad (4.93)$$

où

$$\tilde{S}_l = \frac{1}{\bar{\rho}_0} \int_0^1 \rho_0(z') S_l(z') P(z') dz' \quad (4.94)$$

$\rho_0(z)$, la masse volumique des gaz frais, est fonction de la fraction de mélange. $\bar{\rho}_0$ s'exprime donc par $\bar{\rho}_0 = \int_0^1 \rho_0(z') P(z') dz'$.

A partir de ces hypothèses nous proposons le formalisme suivant pour étendre le modèle F-TACLES à la combustion stratifiée.

Formalisation du modèle F-TACLES pour la combustion stratifiée

Les hétérogénéités de sous-maille de la richesse sont introduites en présumant la FDF de la fraction de mélange par une fonction β . Les variables thermo-chimiques filtrées $\tilde{\phi}$ sont donc stockées dans une base de données 4-D $[\Delta, \tilde{Y}_c, \tilde{z}, \tilde{z}''^2]$ où Δ est la taille du filtre. \tilde{Y}_c et \tilde{z} sont les variables d'avancement de réaction et de mélange filtrées au sens de Favre et \tilde{z}''^2 représente la variance de sous-maille de la fraction de mélange. Les schémas développés pour fermer les équations RANS de transport de \tilde{z} et \tilde{z}''^2 (Eqs. 4.29 et 4.30) sont retenus pour la LES (Poinsot et Veynante 2005). Dans un régime stratifié, l'équation de transport de la variable d'avancement filtré conserve la forme générale de l'Eq. 4.80. Les paragraphes suivants indiquent brièvement la fermeture de chacun des termes du membre de droite. Pour plus de détails sur les démonstrations et sur l'implantation du modèle, il est conseillé de se référer aux travaux de Auzillon *et al.* (2011).

Taux de réaction chimique filtré $\tilde{\omega}_{Y_c}$. Le taux de réaction chimique $\tilde{\omega}_{Y_c}$ est modélisé par l'Eq. 4.91 (Auzillon *et al.* 2011) où la grandeur conditionnée filtrée $\langle \rho \dot{\omega}_{Y_c} | z = z' \rangle$ est estimée par l'Eq. 4.92 en filtrant une flamme 1-D laminaire calculée pour une valeur de fraction de mélange z , c'est à dire pour une richesse donnée. La FDF $P(z)$ est modélisée par la fonction β détaillée dans le paragraphe 4.1.3 et paramétrée par \tilde{z} et $\theta_z = \tilde{z}^2 - \tilde{z}^2$. Le taux de réaction filtré $\tilde{\omega}_{Y_c}$ est en pratique pré-calculé et stocké dans une table 4-D $\tilde{\omega}_{Y_c} = \tilde{\omega}_{Y_c}^*(\tilde{Y}_c, \tilde{z}, S_z, \Delta)$.

Termes de diffusion laminaire Le modèle proposé pour la diffusion moléculaire filtrée est :

$$\nabla \cdot (\overline{\rho D \nabla Y_c}) = \nabla \cdot (\alpha_{Y_c} \rho_0 D_0 \nabla \tilde{Y}_c) \quad (4.95)$$

où le facteur correctif α_{Y_c} est estimé à partir de flammes 1-D prémélangées filtrées :

$$\alpha_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \tilde{z}, S_z, \Delta) = \frac{\overline{\rho^* D^* \frac{\partial Y_c^*}{\partial x_n}}}{\rho_0 D_0 \frac{\partial \tilde{Y}_c^*}{\partial x_n}} \quad (4.96)$$

La diffusivité laminaire est calculée sous l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire $D^* = \lambda^* / \rho^* C_p^*$. Le facteur $\alpha_{Y_c} = \alpha_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \tilde{z}, S_z, \Delta)$ est également tabulé.

Termes convectifs de sous-maille Les termes convectifs non résolus sont modélisés par :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left(\overline{\rho \mathbf{u} \tilde{Y}_c} - \overline{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_c \right) &= \Xi \left(\overline{\rho_0(z) S_l(z) \frac{\partial Y_c^*}{\partial x_n}} - \overline{\rho_0(z) S_l(z)} \frac{\partial \tilde{Y}_c^*}{\partial x_n} \right) \\ &\quad + \nabla \cdot \left((\Xi - 1) \alpha_{Y_c} \rho_0 D_0 \nabla \tilde{Y}_c \right) \\ &= \Xi \Omega_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \tilde{z}, S_z, \Delta) + \nabla \cdot \left((\Xi - 1) \alpha_{Y_c} \rho_0 D_0 \nabla \tilde{Y}_c \right) \end{aligned} \quad (4.97)$$

où, comme dans la formulation prémélangée, le premier terme du membre de droite correspond à l'expansion thermique, estimé à partir de flammes 1-D prémélangées et stocké dans la base de données 4-D : $\Omega_{Y_c}(\tilde{Y}_c, \tilde{z}, S_z, \Delta)$. Le second terme modélise le transport non résolu avec une hypothèse de gradient classique.

4.3.3 Exemples d'applications du modèle F-TACLES

Nous avons choisi de présenter ci-dessous deux applications du modèle F-TACLES qui illustrent ses capacités à reproduire la combustion turbulente prémélangée et la combustion turbulente stratifiée. Pour ces deux configurations, le modèle F-TACLES a été implanté dans le code compressible AVBP en utilisant le formalisme TTC (Tabulated Thermochemistry for Compressible flow) développé par Vicquelin *et al.* (2011) et décrit dans la partie 3.2. Des études complémentaires, qui ne sont pas présentées dans ce document, ont été menées afin d'identifier les performances du modèle F-TACLES pour modéliser la dynamique de la combustion. Les résultats de cette étude sont publiés dans Auzillon *et al.* (2011) et Auzillon (2011).

Combustion turbulente prémélangée

Le modèle F-TACLES est utilisé pour simuler la configuration de la chambre de combustion PRECCINSTA étudiée expérimentalement par Meier *et al.* (2007).

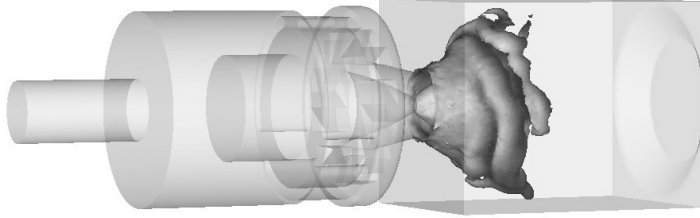


FIGURE 4.17 – LES de la chambre de combustion PRECCINSTA avec le modèle de combustion turbulente F-TACLES. Le domaine de calcul contient le plenum, l'injecteur et la chambre de combustion. Une vue instantanée de l'iso-surface du front de flamme filtré ($\tilde{c}=0.8$) est tracée (Fiorina et al. 2010).

La géométrie, visible sur la figure 4.17, est représentative d'un foyer de combustion aéronautique. Elle est composée d'un plenum, d'un injecteur d'écoulement en rotation et d'une chambre de combustion. Différentes stratégies de modélisation LES ont été suivies pour étudier numériquement cette configuration. Roux *et al.* (2005) ont utilisé un modèle TFLES et une chimie à 2 étapes tandis que Moureau *et al.* (2007) ont validé un algorithme de résolution de l'équation G. Récemment, Galpin *et al.* (2008) ont simulé également cette flamme avec le modèle FPI-PCM.

Les conditions opératoires sont un débit massique d'air de 12.2 g/s et un débit de méthane de 0.6 g/s. Le mélange entre le combustible et le comburant, au niveau du système de mise en rotation de l'écoulement, est supposé en première approximation homogène dès sa pénétration dans la chambre. Le maillage retenu pour la simulation avec le modèle F-TACLES est constitué de 12.7 millions d'éléments. Le plissement de sous-maille Ξ est estimé par le modèle analytique développé par Colin *et al.* (2000). La moyenne et l'écart type de la température sont tracés sur la figure 4.18. Un bon accord est observé entre les mesures expérimentales et la simulation numérique. Comme les pertes thermiques n'ont pas été considérées, la simulation surestime légèrement la température dans les régions proches de la paroi, principalement dans la zone de re-circulation pour $x < 20\text{ mm}$ et à une distance supérieure à 20 mm de l'axe du jet. Toutes les variables thermo-chimiques sont reliées à \tilde{Y}_c , ainsi un simple post-traitement de la solution par la base de données chimique filtrée permet d'accéder à toutes les espèces chimiques. Ceci est illustré sur la Fig. 4.19(a) qui montre les iso-contours 2-D de \tilde{c} utilisés pour estimer la fraction massique de HCO tracée sur la Fig. 4.19(b).

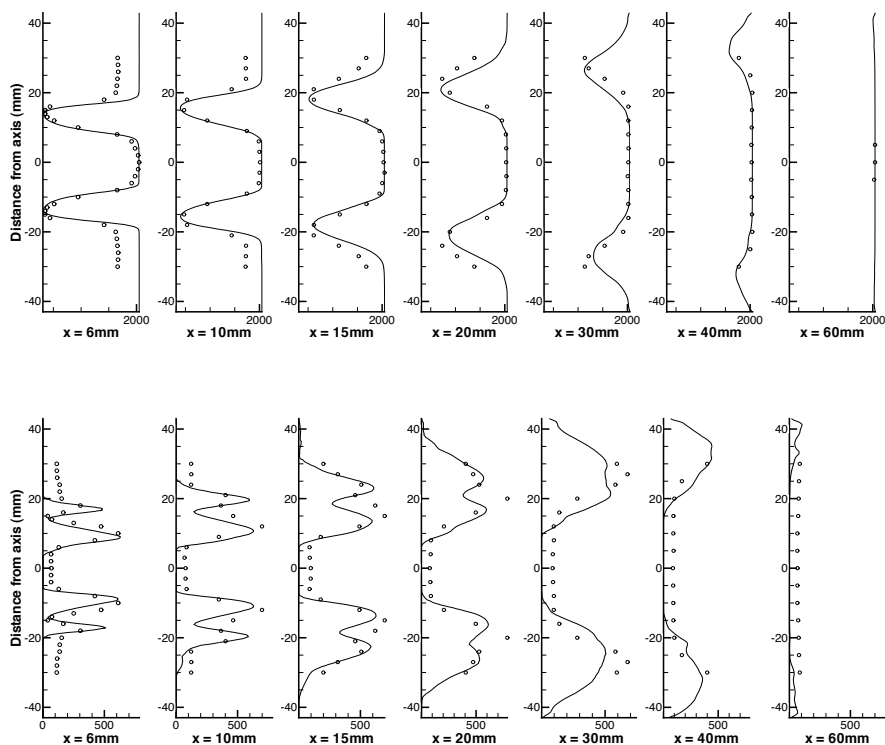


FIGURE 4.18 – *Profils transversaux de température moyenne (haut) et écarts types (bas) pour différentes positions axiales. Cas $\phi = 0.83$. Symboles : mesures. Lignes : simulation avec F-TACLES (Fiorina et al. 2010).*

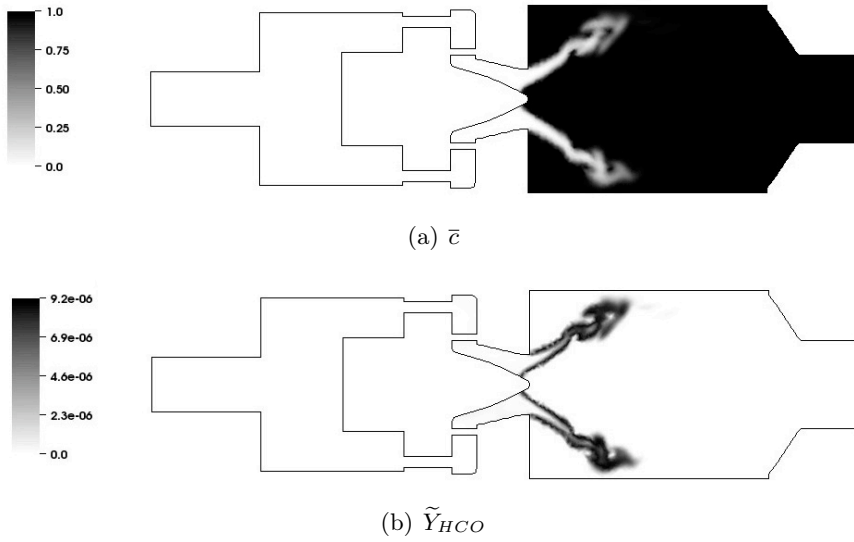


FIGURE 4.19 – Vue instantanée 2-D de $\tilde{c} = \tilde{Y}_c / (Y_{bf} - Y_{cf})$ et \tilde{Y}_{HCO} (Fiorina et al. 2010).

Combustion turbulente partiellement prémélangée

Dans la plupart des applications industrielles, le combustible et le comburant ne sont pas parfaitement prémélangés lorsqu'ils sont injectés dans la chambre de combustion. C'est le cas de du système d'injection Turboméca étudié expérimentalement par Janus *et al.* (Janus *et al.* 2004b; Janus *et al.* 2004a; Janus *et al.* 2007) sur le banc MOLECULES de l'université de Darmstadt (Allemagne) : le combustible, du gaz naturel, est directement injecté au centre de l'écoulement d'air en giration. La pression de la chambre est de 2 bar dans les conditions nominales. Le mélange est caractérisé par fluorescence induite par laser (PLIF) en utilisant de l'acétone comme traceur ajouté au combustible. Le front de la flamme est visualisé par PLIF sur le radical OH. Des coupes radiales de la fraction de mélange moyenne et de son écart type sont tracées sur la Fig. 4.20 à différentes distances de la sortie de l'injecteur. Un bon accord est observé entre la simulation numérique et les mesures expérimentales. La comparaison entre la fraction molaire moyenne du radical OH prédite et mesurée expérimentalement est montrée sur la Fig. 4.21. La hauteur de décollement est bien prédite par la simulation. Des calculs ont été conduits en supposant le mélange entre le combustible et le comburant homogène en sous-maille.⁷ La figure 4.22 montre deux vues instantanées 2-D du champ de température où $P(z)$ est modélisé par

7. La FDF de la fraction mélange est dans ce cas modélisée par une fonction Dirac centrée sur la valeur moyenne de la fraction de mélange au lieu d'une fonction β .

Reactive case

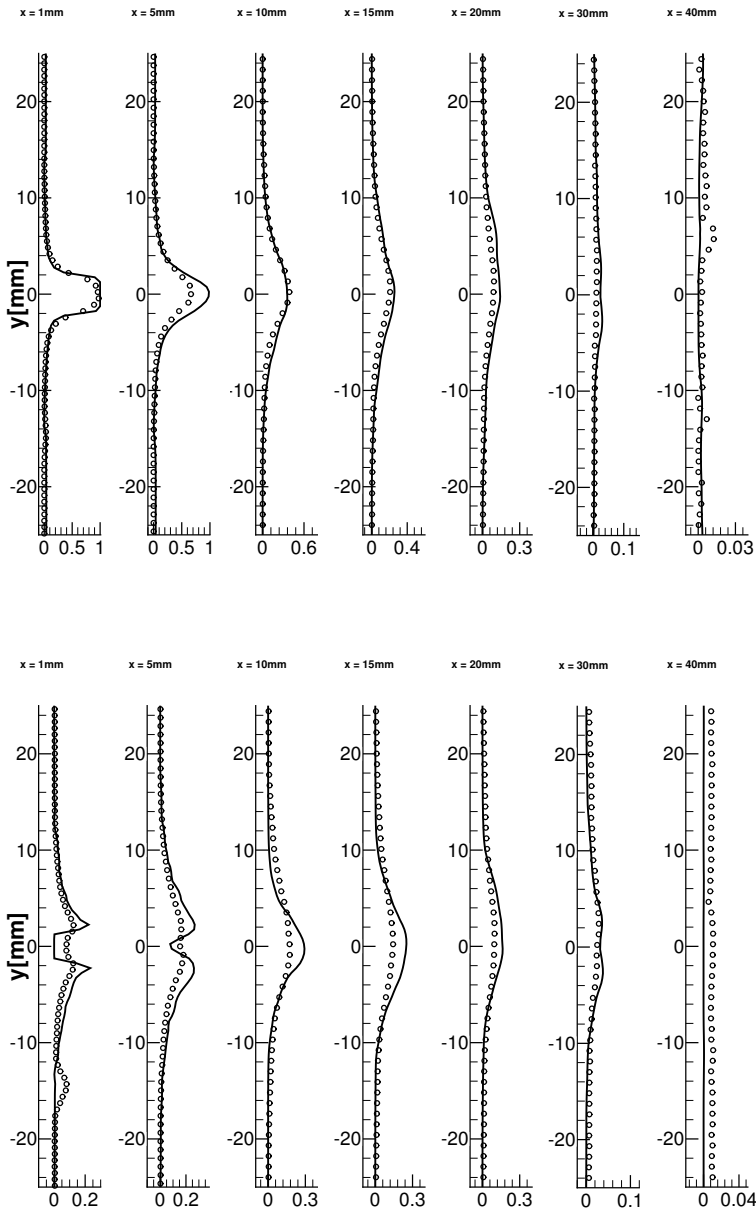


FIGURE 4.20 – Simulation de la configuration MOLECULES mesurée par (Janus et al. 2007). Moyenne (haut) et écarts types (bas) de la fraction massique de CH_4 . Symboles : mesures. Lignes : simulation avec F-TACLES (Auzillon et al. 2011) .

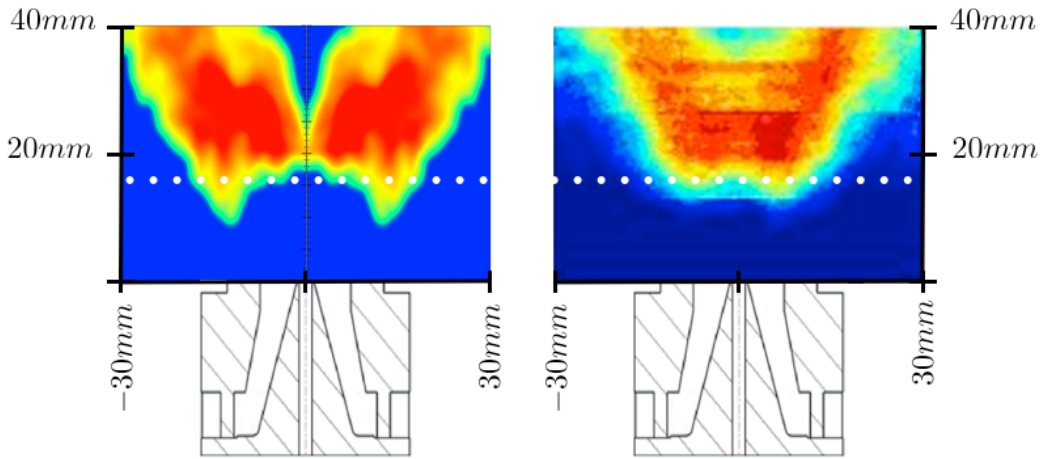


FIGURE 4.21 – Configuration *MOLECULES* étudiée par Janus et al. (2007). Iso-couleur des fractions molaires moyennes simulées (gauche) et mesurées (droite) du radical OH (Auzillon et al. 2011).

une fonction β (gauche) ou par une fonction Dirac (droite). La température, calculée à partir de la table chimique filtrée est fortement dépendante de la variance de la fraction de mélange. Les pics de température sont réduits lorsque l'on considère l'impact de la variance de sous-maille de la fraction de mélange. On note également une influence de $P(z)$ sur la dynamique de la flamme. En effet, si l'on ne considère pas les fluctuations de la fraction de mélange en sous-maille, alors la propagation de la flamme est trop rapide et celle-ci se stabilise sur les lèvres du brûleur au lieu d'être détachée.

Les résultats de cette simulation soulignent l'importance de la modélisation de l'impact des hétérogénéités de sous-maille de la fraction de mélange sur la cinétique chimique de la combustion. La stratégie de modélisation, efficace pour modéliser cette configuration, n'est cependant probablement pas applicable à tous les régimes de combustion en régime stratifié. En effet le modèle suppose que les surfaces d'iso- c et d'iso- z sont perpendiculaires, ce qui *a priori* n'est pas nécessairement le cas. La question de l'effet de cette hypothèse sur la propagation de la flamme reste ouverte.

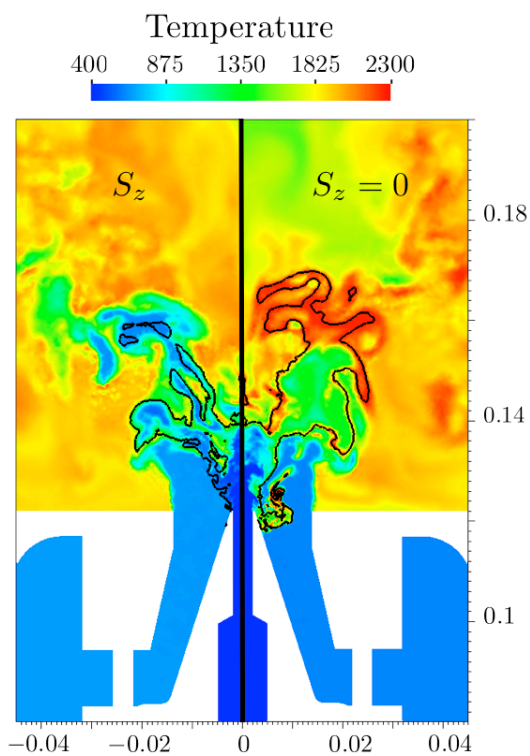


FIGURE 4.22 – Vues instantanées 2-D du champ de température dans la configuration MOLECULES. La Fonction de Densité de Filtre $P(z)$ est soit modélisée par une fonction β (gauche) soit par une fonction Dirac δ (droite). La flamme est alors stabilisée sur les lèvres du brûleur quand les hétérogénéités de sous-maille de la fraction de mélange ne sont pas considérées (droite). Le trait plein noir indique les conditions stœchiométriques (Auzillon et al. 2011).

Chapitre 5

Conclusions et perspectives

5.1 Conclusions

La modélisation de nombreux phénomènes physiques caractéristiques des écoulements réactifs nécessite de considérer le détail de la cinétique chimique de la combustion. Il s'agit par exemple de l'allumage et de l'extinction d'une flamme, de la formation des espèces polluantes ou encore de la propagation d'un front réactif dans un milieu stratifié en richesse. Une simplification des schémas cinétiques à une ou quelques étapes est souvent insuffisante pour prédire ces phénomènes. Ce manuscrit propose des modèles pour tenir compte de la complexité de la cinétique chimique de la combustion. Les stratégies développées s'articulent autour des méthodes de tabulation de la cinétique chimique. Comme elles sont peu pénalisantes en temps de calcul, elles permettent la réalisation de simulations numériques représentatives de la combustion dans des systèmes industriels où la géométrie des chambres de combustion est généralement complexe.

La première partie de ce document est consacrée à la construction des tables thermochimiques. Il est difficile de retenir une méthodologie générale. Au contraire, les stratégies de tabulation de la cinétique chimique proposées sont spécifiques au régime de combustion étudié. Par exemple, si la structure chimique d'une flamme partiellement prémélangée est bien reproduite par un ensemble de flammelettes laminaires prémélangées, cette bibliothèque de flammelette ne sera pas adaptée à la prédiction de la combustion dans un moteur Diesel à combustion interne. Les réactions d'initiation de la combustion dans un moteur à combustion interne seront plutôt capturées par une table chimique construite à partir de réacteurs 0-D à volume constant.

Ce manuscrit discute ensuite des procédures d'implantation des méthodes de chimie tabulée dans un code de simulation numérique de la mécanique des

fluides. Celles-ci dépendent des hypothèses émises pour la simulation de l'écoulement. En effet les difficultés sont différentes si les équations de la mécanique sont simplifiées dans le cadre des écoulements à faible nombre de Mach ou si les phénomènes compressibles sont résolus. Deux méthodologies d'implantation de la chimie tabulée, adaptées à ces situations, sont proposées dans la deuxième partie du manuscrit.

La question de la modélisation des interactions entre la chimie complexe et la turbulence est abordée dans la troisième partie de ce document. A la fois dans un contexte RANS ou LES, le manuscrit met l'accent sur une stratégie de modélisation basée sur des fonctions de densité de probabilités présumées. Ce choix se justifie par un compromis avantageux entre le coût de calcul et la qualité des résultats mais aussi par la simplicité d'implantation de la méthode dans un code de simulation numérique de la mécanique des fluides. Le détail des modélisations est indiqué dans un premier temps dans un contexte de simulations RANS puis dans un second temps dans un contexte LES. Les développements de modèles sont illustrés de simulations numériques confrontées à des résultats expérimentaux. Des bons accords sont observés entre les prédictions issues des calculs numériques et les mesures expérimentales.

En résumé, la maturité de la modélisation de la combustion est aujourd'hui suffisante pour prédire les interactions entre la chimie complexe et la turbulence à condition de rester dans le cadre de deux hypothèses principales qui sont que la combustion se déroule dans le régime de flammelette et que les trajectoires chimiques évoluent dans un sous-système dont les dimensions sont principalement réduites à un avancement de réaction, à une fraction de mélange et éventuellement aux pertes thermiques subies par le système. Les simulations RANS et LES présentées dans ce document ont montré que ces conditions sont respectées dans des systèmes réactifs "conventionnels" qui présentent des régimes de combustion en phase gazeuse de type partiellement prémélangés (foyers aéronautiques) ou non prémélangés (fours industriels, chaudières). La maturité des modèles est donc suffisante pour ces applications mais ne l'est plus en dehors du cadre des hypothèses du régime de flammelette et lorsque de nouveaux paramètres influencent les trajectoires cinétiques. Le paragraphe suivant précise comment le développement de nouveaux modes de combustion bouleverse les hypothèses émises précédemment.

5.2 Les enjeux de la modélisation

Au delà du régime de flammelette

Si les structures turbulentes sont suffisamment petites et énergétiques pour pénétrer dans le front de la flamme alors sa structure chimique ne peut plus être assimilée à une flammelette laminaire. On parle de régime de flamme plissée-épaissie si seule la zone de préchauffage thermique est affectée et de régime de flamme épaissie si à la fois les zones thermiques et réactives sont perturbées par la turbulence (Peters 2000; Poinso et Veynante 2005). Dans ce dernier cas, la combustion a lieu dans une phase quasiment homogène. Si la plupart des flammes rencontrées dans les chambres de combustion “traditionnelles” se situent dans le régime de flammelettes, ce n’est plus le cas des nouveaux modes de combustion qui opèrent à plus basses température afin de minimiser la formation des oxydes d’azote.

Pour diminuer la température de fin de combustion, les gaz frais peuvent être dilués par des gaz brûlés refroidis. La cinétique chimique de la combustion est donc plus lente que celle rencontrée dans les systèmes conventionnels. C’est le cas des technologies de combustion sans flamme, développées principalement pour les fours industriels mais aussi certaines turbines à gaz et des moteurs de type HCCI (Homogenous Charge Compression Ignition) (Cavaliere et de Joannon 2004). Dans toutes ces applications, la dilution a pour effet d’homogénéiser les zones de réaction. Les régimes de combustion s’éloignent donc du régime de flammelette dès que les vitesses des réactions chimiques deviennent comparables aux temps de mélange turbulent.

Un autre exemple de situation qui fait intervenir des temps chimiques lents devant la turbulence est l’oxycombustion de gaz riches en combustible. Ces conditions sont propices au vapo-reformage thermique du méthane qui est un processus industriel pour produire de l’hydrogène. Dans ce cas, les réactions chimiques sont modélisées globalement par ces deux réactions.



Dans un réacteur ATR (AutoThermal Reforming), représenté sur la figure 5.1, la chaleur dégagée par l’oxydation partielle (Eq. 5.1a) permet la réaction endothermique de vaporeformage (Eq. 5.1b). La simulation numérique devrait permettre l’amélioration de l’efficacité énergétique de ces réacteurs. Seulement, les études récemment conduites par Caudal *et al.* (2013) ont montré que les

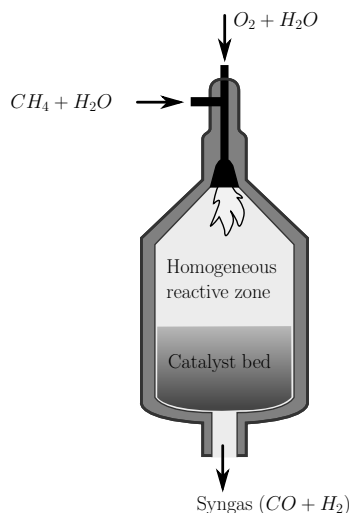


FIGURE 5.1 – *Vue schématique d'un réacteur de reformage autothermique du méthane (ATR).*

temps chimiques caractéristiques des réactions d'oxydation partielle et de vapo-reformage sont très différents. Il est donc probable que les modèles de combustion turbulente développés pour des conditions de fonctionnement standards ne soient donc pas directement adaptables à l'ensemble des réactions d'oxydation et de vapo-reformage. Des expériences numériques sont conduites dans le cadre de la thèse de Jean Caudal (CIFRE Air Liquide) pour répondre à cette question.

Au delà des espaces chimiques actuellement couverts

L'effet de la dilution des gaz frais par des produits de combustion a un deuxième effet sur la combustion. En éloignant la combustion du régime de flammelette, elle modifie également les trajectoires chimiques suivies par le système réactif. Ainsi les trajectoires dépendent également des conditions de dilution des gaz frais par des gaz brûlés. En terme de modélisation, ceci signifie que les variables thermochimiques évoluent dans un espace des compositions plus grand que celui décrit par les variables d'avancement de réaction, de fraction de mélange et d'enthalpie.

Nous avons évoqué dans le chapitre 2 des situations où la structure chimique des flammes ne peut plus s'apparenter à des régimes simples représentatives soit de la combustion prémélangée, soit des flammes de diffusion. Dans ces ré-

gimes de combustion complexes qui présentent simultanément des branches de diffusion et des noyaux prémélangés, les bases de chimie construites à partir de flammelettes soit prémélangées, soit non prémélangées ne permettent pas de prédire l'intégralité de la structure chimique de la flamme. Ainsi l'espace chimique atteint dans ce cas par le système réactif est agrandi comme l'indiquent les stratégies de tabulation récemment proposées dans ce contexte (Bykov et Maas 2007; Bykov et Maas 2009; Nguyen *et al.* 2010; Franzelli *et al.* 2012). Elles demeurent principalement au stade de développement et n'ont pas été encore introduites dans des modèles de combustion turbulentes RANS ou LES.

Un autre exemple de modification des trajectoires chimique conventionnelles est observé dans les technologies de combustion assistée par plasma. Dans ces conditions, un plasma, produit entre deux électrodes, apporte de l'énergie au gaz environnant et génère des électrons et des radicaux qui vont agir sur la combustion. La présence d'un plasma va modifier la cinétique chimique complexe de la combustion, soit directement par apport d'énergie thermique, soit via la formation de radicaux. L'intérêt technologique est de pouvoir contrôler des flammes turbulentes très pauvres, naturellement instables (Pilla *et al.* 2006; Pilla *et al.* 2008). Fonctionner à des richesses plus pauvres permet d'obtenir des températures de fin de combustion plus faibles et donc de réduire la formation des oxydes d'azote. Une autre application de ce procédé est de se substituer aux systèmes d'allumages traditionnels par bougie dans des chambres à combustion interne (l'efficacité est meilleure). Le défi en terme de modélisation et de capturer ce phénomène afin de simuler l'effet des interactions entre un plasma et une flamme. La mise en place d'une expérimentation numérique permettrait de comprendre plus précisément les mécanismes fondamentaux d'interactions entre la combustion et un plasma. Une question qui est également ouverte est de savoir si la cinétique de création du plasma coexiste en pratique avec la cinétique chimique de la combustion ou bien si les deux processus sont séparés dans le temps. Cette problématique sera prochainement abordée dans le cadre du projet ANR PLASMAFLAME dont l'un des objectifs est de proposer des modèles de combustion turbulente qui tiennent compte de l'effet d'un plasma.

Au delà des gaz parfaits

Les pressions d'injection du combustible et du comburant sont augmentées dans les nouvelles technologies de chambre de combustion afin d'améliorer rendements et puissances. Dans certains cas, les propriétés du gaz ne correspondent plus à celles des gaz parfaits. Ce phénomène est courant dans les moteurs fusée à ergols liquides où la pression est supérieure à la pression critique des réactifs et la température d'injection de l'un des ergols (en général l'oxygène) est inférieure à sa température critique. Le fluide à basse température, initialement

très dense, évolue vers une masse volumique nettement plus réduite, en l'absence de toute interface liquide/gaz. Ce régime est également rencontré dans les nouveaux moteurs à combustion interne où l'augmentation de la pression des injecteurs permet d'accélérer le processus de mélange entre les réactifs qui précède la combustion.

Dans ces cas, le comportement de l'écoulement s'écarte notablement de celui d'un gaz parfait. Les simulations aux grandes échelles réalisées actuellement dans un contexte de gaz réels reposent sur une méthode de chimie réduite à l'équilibre (Scmitt *et al.* 2011). Cette méthode permet de qualitativement reproduire les flammes transcritiques visualisées expérimentalement, cependant, la structure interne de la flamme n'est pas correctement représentée et la température et la composition des gaz brûlés obtenues peuvent être éloignées de celles qui sont effectivement mesurées. Ainsi, en terme de modélisation, des travaux fondamentaux doivent être menés afin de trouver des modèles de combustion capables de tenir compte de la chimie complexe dans un environnement où les variables d'état thermodynamique suivent des lois de gaz réels.

En collaboration avec Nasser Darabiha et Olivier Gicquel et dans le cadre de la thèse d'Axel Coussement, nous avons élaboré un code de simulation numérique directe pour les écoulements réactifs dans des conditions de gaz réels (Coussement *et al.* 2012). Cet outil permettra de conduire des expériences numériques utilisables pour la compréhension et la modélisation de la combustion dans des régimes de gaz réels. Les résultats de ces études seront directement utiles pour les simulations hautes performances de la combustion turbulente transcritique et cryotechnique menées par Thomas Schmitt, chargé de recherche au CNRS, récemment recruté au laboratoire EM2C.

5.3 Stratégies possibles

5.3.1 Poursuite de la tabulation de la cinétique chimique

Les problèmes évoqués précédemment peuvent être abordés en conservant la même stratégie. Elle constitue une ligne directrice que l'on retrouve dans les projets de recherches engagées ou qui débiteront dans un futur proche.

Tabulation de l'effet de la dilution pour la modélisation de la combustion sans flamme

L'étude de l'impact de la dilution des gaz frais par des gaz brûlés est le but du projet ADEME inter-partenaire CANOE qui regroupe les laboratoires EM2C

et CORIA ainsi que GDF-SUEZ. En terme de modélisation, nous nous concentrons dans un premier temps sur la modélisation de l'effet de la dilution par des gaz brûlés sur la cinétique chimique de la combustion. Nous supposons que le régime de combustion demeure celui de flammelettes. La stratégie de modélisation suivie pour tenir compte de la dilution par des gaz brûlés consiste à augmenter le nombre de coordonnées des bases de données thermochimiques. Des travaux sur ce sujet sont actuellement menés par Jean Lamouroux dans le cadre de sa thèse qui a débutée en 2009. La base de chimie tabulée doit donc prendre en compte le mélange entre le combustible et le comburant, la dilution des gaz frais par des gaz brûlés, les pertes thermiques, l'avancement de la réaction et éventuellement la formation des oxydes d'azotes.

Tabulation de la structure chimique des flammes complexes

Comme nous l'avons indiqué précédemment, une stratégie possible pour tenir compte des flammes à structure chimique complexe est d'étendre les dimensions des bases de données chimiques (Bykov et Maas 2007; Bykov et Maas 2009; Nguyen *et al.* 2010; Franzelli *et al.* 2012), notamment en introduisant les taux de dissipation scalaire des variables d'avancement de la réaction et de la fraction de mélange comme coordonnées. Franzelli *et al.* (2012) ont proposé de couvrir l'espace chimique atteint dans ces flammes à partir de flammelettes partiellement-prémélangées en développant la méthode TPPC (Tabulated Partially Premixed Combustion).

Cette approche a été récemment appliquée à la modélisation des flammes diphasiques dans le cadre du projet européen KIAI. La structure des flammes diphasiques est en effet naturellement complexe, même en régime laminaire, car différents régimes de combustion peuvent être rencontrés au sein même d'une seule flamme en fonction des paramètres du spray (par exemple la taille et le nombre des gouttes ou les températures du gaz et du liquide) (Gutheil et Sirignano 1998). Prenons l'exemple d'une flamme 1-D kérosène/air diphasique dont la configuration à contre-courant est schématisée sur la Fig. 5.2(a). Celle-ci est résolue sous une hypothèse de chimie complexe en suivant le formalisme proposé par Darabiha (1992). Le taux de production chimique de la variable d'avancement de réaction est tracé sur la Fig. 5.2(b) et comparé aux méthodes de tabulation de la chimie FPI (Gicquel *et al.* 2000), FPV (Pierce et Moin 1999) construites respectivement à partir de flammelettes laminaires prémélangées et non prémélangées. Aucune des deux approches ne peut reproduire l'intégralité de la structure chimique de la flamme diphasique. Pour y parvenir, la même base de chimie tabulée doit nécessairement pouvoir modéliser une collection d'archétypes de flammelettes différents, ce que ne permettent pas de faire les méthodes FPI ou FPV (cf. paragraphe 2.3.1). Les méthodes de tabulation de la

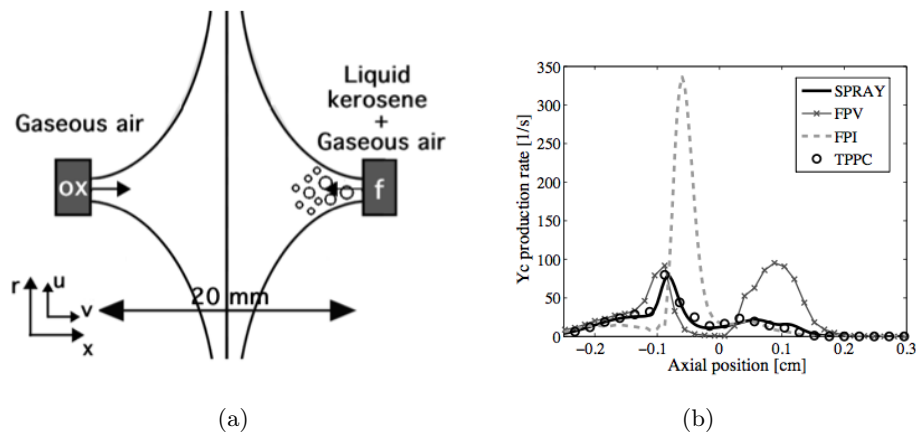


FIGURE 5.2 – *a) Configuration d'une flamme diphasique à contre-courant. b) Taux de production chimique de la variable d'avancement de réaction. La solution de référence obtenue par une simulation chimie complexe est tracée en trait plein (SPRAY). Les autres courbes indiquent les prédictions de trois différents modèles de chimie tabulée (FPI, FPV et TPPC) (Franzelli et al. 2012).*

cinétique chimique dédiées aux modes de combustion hybrides (Bykov et Maas 2007; Nguyen *et al.* 2010; Franzelli *et al.* 2012) seront par contre adaptées. Par exemple la méthode TPPC (Tabulated Partially Premixed Combustion) (Franzelli *et al.* 2012) contient suffisamment d'ingrédients pour modéliser la structure chimiques des flammes diphasiques comme en témoigne la Fig. 5.2(b).

Une tabulation de la cinétique chimique hybride construite à partir d'éléments de combustion gazeux peut donc être retenue pour poser les bases d'un modèle de combustion turbulente. Un travail conséquent de modélisation doit cependant être mené, notamment afin de permettre d'utiliser ces stratégies de tabulation dans des cadre de simulations d'écoulements turbulents RANS ou LES.

Combustion des gaz à faible PCI

En 2005, le secteur de la sidérurgie a généré 27% des émissions de CO_2 industrielles mondiales. Bien que la consommation énergétique ait fortement diminué depuis les années 70, plusieurs solutions n'ont pas encore été pleinement exploitées dont la valorisation énergétique des gaz combustibles émanant des différentes unités sidérurgiques. Certains, comme les gaz de hauts-fourneaux, ont des pouvoirs calorifiques très faibles, environ trois fois inférieurs à celui

du méthane. Les températures adiabatiques des gaz brûlés sont donc basses et avoisinent la limite d'extinction des flammes. Ainsi, il est très difficile de concevoir un système de combustion stable alimenté par des gaz à faible pouvoir calorifique.

IFPEN, Arcelor Mittal et le laboratoire EM2C sont associés dans le projet ANR VALOGAZ, pour étudier des voies possibles de valorisation de ces combustibles. Des études expérimentales et numériques vont être menées sur des nouvelles géométries de brûleur pour identifier des régimes de stabilisation. Comme la puissance par unité de surface de la flamme sera faible, les modèles de combustion turbulente développés pour des combustibles usuels ne pourront probablement pas être appliqués directement. En effet la turbulence interagira différemment avec le front de flamme qui ne sera plus assimilable à un ensemble de flammelettes mono-dimensionnelles laminaires. Des études théoriques et numériques réalisées dans ce contexte apporteront des solutions de modélisation. Ces travaux se feront dans le cadre de la thèse de Renaud Mercier qui a débuté en 2011.

Oxy-combustion

Air Liquide crée, à compter du 1er janvier 2012 et pour une durée de six ans, la Chaire d'Excellence OXYTEC au laboratoire EM2C. Les objectifs de la chaire industrielle sont, d'une part, l'amélioration des connaissances des procédés de combustion à l'oxygène pur et, d'autre part, le développement de nouveaux modèles pour l'optimisation des technologies d'oxy-combustion. Cette chaire sera pilotée par T. Schuller et comprend trois axes (1) Analyse expérimentale de l'oxy-combustion (responsable T. Schuller), (2) Transferts thermiques (responsable F. Enguehard), et (3) Simulation de la combustion (responsable N. Darabiha). Nos travaux entrent dans le troisième axe, notamment en ce qui concerne la modélisation de la combustion turbulente et de la cinétique chimique des différents combustibles en présence de dilution par du dioxyde de carbone et de la vapeur d'eau. Une collaboration a été déjà amorcée avec Air Liquide sur ce sujet depuis deux ans (thèse de Jean Caudal) sur la production d'hydrogène comme nous l'avons mentionné ci-dessus.

Le programme scientifique de la chaire étudiera expérimentalement et numériquement l'oxy-combustion dans un contexte où la combustion turbulente interagit fortement avec les pertes thermiques qu'elles soient de nature conductives ou radiatives. Comme les trois phénomènes combustion, conduction et rayonnement, ont des temps caractéristiques très différents, trois codes de calculs distincts seront utilisés et couplés. Les modèles à mettre en oeuvre pour résoudre la conduction dans les parties solides seront des modèles classiques. Pour la partie rayonnement des gaz, les calculs seront basés sur une méthode

Monte-Carlo ou une méthode aux ordonnées discrètes (dos Santos *et al.* 2008). Pour la modélisation de la combustion une stratégie de chimie tabulée qui tient compte des pertes thermiques sera retenue.

5.3.2 Fin de la tabulation de la cinétique chimique

Bien qu'il n'y ait aucune objection théorique, l'augmentation de la complexité des systèmes réactifs a tendance à compliquer l'utilisation de la chimie tabulée. Prenons l'exemple de la combustion sans flamme où il faut prendre en compte le mélange entre le combustible et le comburant, la dilution des gaz frais par des gaz brûlés, les pertes thermiques, l'avancement de la réaction et éventuellement la formation des oxydes d'azotes. Le nombre de coordonnées à considérer devient extrêmement important. A cause de leur taille, les bases chimiques deviennent complexes à générer et à gérer. Le développement du modèle de combustion turbulente nécessite également plus d'hypothèses lorsque les variables thermochimiques dépendent d'un grand nombre de coordonnées. De plus la tabulation nécessite des flammes génériques modèles (PSR, flamme prémélangée, ...) dont le choix ou la combinaison devient délicate avec ces nouveaux régimes de combustion.

D'un autre côté, grâce aux performances informatiques actuelles et aux progrès réalisés dans les méthodes numériques, il devient envisageable, du moins pour certaines applications, d'augmenter le nombre d'équations de transport résolues par un code de CFD. Pour des hydrocarbures relativement légers dont les mécanismes cinétiques de combustion se décrivent par une trentaine d'espèces, il est ou sera bientôt envisageable de résoudre une équation de transport par espèce chimique en plus des équations de Navier-Stokes. Dans un contexte LES ou RANS, l'enjeu en terme de modélisation de la combustion turbulente est grand. Il s'agit de proposer des modèles de fermeture pour toutes les espèces chimiques qui interviennent dans la chimie de la combustion que ce soit des espèces majoritaires, des espèces intermédiaires ou encore radicalaires qui présentent des temps et des échelles caractéristiques très différentes. L'utilisation de PDF/FDF présumées est délicate car les espaces statistiques dans lesquels évoluent les espèces chimiques ne sont plus *a priori* connus. Une modélisation par transport de PDF/FDF serait plus adaptée mais est difficile à mettre en œuvre et demeure probablement trop coûteuse en temps de calcul pour être appliquée à des configurations réalistes. Le problème est donc très ouvert.

Références

- al Maseeh, W. A. A., D. Bradley, P. H. Gaskell, et A. K. C. Lau (1990). Turbulent premixed, swirling combustion : direct stress, strained flamelet modelling and experimental investigation. In *The Proceedings of the Twenty-Third Symposium (Int.) on combustion.*, pp. 825–833. The Combustion Institute, Pittsburgh.
- Albouze, G., T. Poinso, et L. Gicquel (2009). Chemical kinetics modeling and LES combustion model effects on a perfectly premixed burner. *Comptes Rendus Mécanique* 337(6-7), 319–328.
- ANSYS (2010). Ansys CFX website. <http://www.ansys.com/products/fluid-dynamics/cfx/>.
- Auzillon, P. (2011). *Modélisation de la structure et de la dynamique des flammes pour la simulation aux grandes échelles*. Ph. D. thesis, Ecole Centrale Paris.
- Auzillon, P., B. Fiorina, R. Vicquelin, N. Darabiha, O. Gicquel, et D. Veynante (2011). Modeling chemical flame structure and combustion dynamics in LES. *Proc. Combust. Inst.* 33 33(1), 1331–1338.
- Auzillon, P., O. Gicquel, N. Darabiha, D. Veynante, et B. Fiorina (2011). A filtered tabulated chemistry model for LES of stratified flames. *Combust. Flame In Press*.
- Barlow, R. S. et J. H. Frank (1998). Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames. *Proc. Combust. Inst.* 27, 1087–1095.
- Baum, M. T., T. Poinso, et D. Thévenin (1995). Accurate boundary conditions for multi-component reactive flows. *J. Comput. Phys.* 116, 247–261.
- Bilger, R. W. (1993). Conditional moment closure for turbulent reacting flow. *Phys. Fluids* 5(2), 327–334.
- Bilger, R. W., S. H. Starner, et R. J. Kee (1990). On reduced mechanisms for methane-air combustion in nonpremixed flames. *Combustion and Flame* 80(2), 135–149.
- Boger, M. (2000). *Modélisation de sous-maille pour la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée*. Ph. D. thesis, Ecole Centrale Paris (France).

- Boger, M., D. Veynante, H. Boughanem, et A. Trouvé (1998). Direct numerical simulation analysis of flame surface density concept for large eddy simulation of turbulent premixed combustion. In *Twenty-Seventh Symposium (Int.) on Combustion. The Combustion Institute : Pittsburgh, Penn.*, pp. 917 – 925.
- Boileau, M., G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Poinsot, et C. Berat (2008). LES of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combust. Flame* 154(1-2), 2–22.
- Bradley, D., P. H. Gaskell, et X. J. Gu (1998). The mathematical modelling of liftoff and blowoff of turbulent non-premixed methane jet flames at high strain rate. In *The Proceedings of the Twenty-Seventh Symposium (Int.) on combustion*, pp. 1199–1206. The Combustion Institute, Pittsburgh.
- Bradley, D., L. K. Kwa, A. K. C. Lau, et M. Missaghi (1988). Laminar flamelet modelling of recirculating premixed methane and propane-air combustion. *Combust. Flame* 71, 109–122.
- Butler, T. D. et P. J. O'Rourke (1977). A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. *Proceedings of the 16th Symp. (Int.) on Combustion. The Combustion Institute : Pittsburgh, Penn.*, 1503–1515.
- Bykov, V. et U. Maas (2007, DEC). The extension of the ILDM concept to reaction-diffusion manifolds. *COMBUSTION THEORY AND MODELING* 11(6), 839–862.
- Bykov, V. et U. Maas (2009). Problem adapted reduced models based on Reaction-Diffusion Manifolds (REDIMs). *PROCEEDINGS OF THE COMBUSTION INSTITUTE* 32(Part 1), 561–568.
- Cabra, R., J. Y. Chen, R. W. Dibble, A. N. Karpetis, et R. S. Barlow (2005). Lifted methane-air jet flames in a vitiated coflow. *Combustion and Flame* 143(4), 491–506.
- Cabra, R., T. Myhrvold, J. Y. Chen, R. W. Dibble, A. N. Karpetis, et R. S. Barlow (2002). Simultaneous laser raman-rayleigh-lif measurements and numerical modeling results of a lifted turbulent H₂/N₂ jet flame in a vitiated coflow. *Proceedings of the Combustion Institute* 29(2), 1881–1888.
- Caudal, J., B. Fiorina, M. Massot, B. Labegorre, N. Darabiha, et O. Gicquel (2013). Characteristic chemical time scales identification in reactive flows. *Proc. Comb. Inst.* 34.
- Cavaliere, A. et M. de Joannon (2004). Mild combustion. *Progress in Energy and Combustion Science* 30(4), 329–366.
- Charlette, F., C. Meneveau, et D. Veynante (2002). A power-law flame wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion, part I : non-dynamic formulation. *Combust. Flame* 131(1/2), 159–180.
- Coffee, T. P. (1984). Kinetic mechanisms for premixed, laminar, steady state methane/air flames. *Combust. Flame* 55, 161–170.

- Colin, O., F. Ducros, D. Veynante, et T. Poinsot (2000). A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids* 12(7), 1843–1863.
- Colin, O. et M. Rudgyard (2000). Development of High-order Taylor-Galerkin Schemes for Unsteady Calculations. *J. Comput. Phys.* 162(2), 338–371.
- Coussement, A., O. Gicquel, B. Fiorina, G. Degrez, et N. Darabiha (2012). Multicomponent real gas 3-D-NSCBC for direct numerical simulation of reactive compressible viscous flows. *submitted*.
- Dally, B. B., A. N. Karpetis, et R. S. Barlow (2002). Structure of turbulent non-premixed jet flames in a diluted hot coflow. *Proceedings of the Combustion Institute* 29(1), 1147–1154.
- Darabiha, N. (1992). Transient behaviour of laminar counterflow hydrogen-air diffusion flames with complex chemistry. *Combust. Sci. Tech.* 86, 163–181.
- Domingo, P., L. Vervisch, et D. Veynante (2008). Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow. *Combust. Flame* 152(3), 415 – 432.
- dos Santos, R. G., M. Lecanu, S. Ducruix, O. Gicquel, E. Iacona, et D. Veynante (2008). Coupled large eddy simulations of turbulent combustion and radiative heat transfer. *Combustion and Flame* 152(3), 387 – 400.
- Drake, M. C. et D. Haworth (2007). Advanced gasoline engine development using optical diagnostics and numerical modeling. *Proc. Comb. Inst.* 31, 99–124.
- Duwig, C. (2007, DEC). Study of a filtered flamelet formulation for large eddy simulation of premixed turbulent flames. *Flow Turbul. Combust.* 79(4), 433–454.
- Effelsberg, E. et N. Peters (1989). Scalar dissipation rates in turbulent jets and jet diffusion flames. *Proc. Comb. Inst.* 22(1), 693–700.
- Embouazza, M. (2005). *Etude de l'Auto-Allumage par Réduction des Schémas Cinétiques Chimiques. Application à la Combustion Homogène diesel*. Ph. D. thesis, Ecole Centrale Paris.
- Embouazza, M., O. Gicquel, et N. Darabiha (2003). Modelling autoignition of HCCI engine by reduced tabulated chemistry. In *Third Mediterranean Combustion Symp., Marrakech, Morocco*.
- Fiorina, B. (2004). *Modélisation de la combustion turbulente pour l'amélioration de la prédiction des polluants dans un brûleur industriel*. Ph. D. thesis, Ecole Centrale de Paris.
- Fiorina, B., R. Baron, O. Gicquel, D. Thévenin, S. Carpentier, et N. Darabiha (2003). Modelling non-adiabatic partially-premixed flames using Flame Prolongation of ILDM. *Combust. Theor. Modell.* 7, 449–470.

- Fiorina, B., O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, et N. Darabiha (2005a). Approximating the chemical structure of partially-premixed and diffusion counterflow flames using FPI flamelet tabulation. *Combust. Flame* 140(3), 147–160.
- Fiorina, B., O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, et N. Darabiha (2005b). Premixed turbulent combustion modelling using tabulated chemistry and PDF. *Proc. Combust. Inst.* 30, 867–874.
- Fiorina, B., O. Gicquel, et D. Veynante (2009). Turbulent flame simulation taking advantage of tabulated chemistry self-similar properties. *Proc. Combust. Inst.* 32(2), 1687–1694.
- Fiorina, B., R. Vicquelin, P. Auzillon, N. Darabiha, O. Gicquel, et D. Veynante (2010). A filtered tabulated chemistry model for LES of premixed combustion. *Combust. Flame* 157, 465–475.
- Flemming, F., A. Sadiki, et J. Janicka (2005). LES using artificial neural network for chemistry representation. *Progress in computational fluid dynamics* 5(7), 375–385.
- Franzelli, B., B. Fiorina, et N. Darabiha (2012). A tabulated chemistry method for spray combustion. *submitted*.
- Galpin, J., C. Angelberger, A. Naudin, et L. Vervisch (2008). Large-eddy simulation of H-2-air auto-ignition using tabulated detailed chemistry. *Journal of Turbulence* 9(13), 1–21.
- Galpin, J., A. Naudin, L. Vervisch, C. Angelberger, O. Colin, et P. Domingo (2008). Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burner. *Combust. Flame* 155, 247–266.
- Gicquel, O., N. Darabiha, et D. Thévenin (2000). Laminar premixed hydrogen / air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion. *Proc. Combust. Inst.* 28, 1901–1908.
- Girimaji, S. (1991). Assumed beta-pdf model for turbulent mixing : validation and extension to multiple scalar mixing. *Comb. Sci. and Tech.* 78(177-210).
- Godel, G., P. Domingo, et L. Vervisch (2009). Tabulation of NOx chemistry for Large-Eddy Simulation of non-premixed turbulent flames. *Proc. Combust. Inst.* 32(Part 1), 1555–1561.
- Gordon, R. L., A. R. Masri, et E. Mastorakos (2008). Simultaneous Rayleigh temperature, OH- and CH2O-LIF imaging of methane jets in a vitiated coflow. *Combustion and Flame* 155(1-2), 181–195.
- Gordon, R. L., A. R. Masri, S. B. Pope, et G. M. Goldin (2007). A numerical study of auto-ignition in turbulent lifted flames issuing into a vitiated co-flow. *Combustion Theory and Modelling* 11(3), 351–376.
- Gordon, R. L., S. H. Starner, A. R. Masri, et R. W. Bilger (2005, Jul). Further Characterisation of Lifted Hydrogen and Methane Flames issuing into a

- Vitiated Coflow. In *Proceedings of the 5th Asia-Pacific Conference on Combustion*, University of Adelaide, pp. 333–336.
- Gutheil, E. et W. Sirignano (1998, APR). Counterflow spray combustion modeling with detailed transport and detailed chemistry. *COMBUSTION AND FLAME* 113(1-2), 92–105.
- Hasse, C. et N. Peters (2005). A two mixture fraction flamelet model applied to split injections in a di diesel engine. *Proc. Combust. Inst.* 30, 2755–2762.
- Hawkes, E. R. et R. S. Cant (2000). A flame surface density approach to large-eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Proc. Combust. Inst.* 28, 51–58.
- Haworth, D. C. (2010). Progress in probability density function methods for turbulent reacting flows. *Progress in Energy and Combustion Science In Press, Corrected Proof*, –.
- Hilbert, R. et D. Thévenin (2002). Autoignition of turbulent non-premixed flames investigated using direct numerical simulations. *Combust. Flame* 128(1-2), 22–37.
- Ihme, M., A. L. Marsen, et H. Pitsch (2007). Generation of Optimal Artificial Neural Networks Using a Pattern Search Algorithm : Application to Approximation of Chemical Systems. *Journal of Neural Computation* 20, 1–29.
- Ihme, M. et H. Pitsch (2008). Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent nonpremixed flames using a flamelet/progress variable formulation. *Physics of Fluids* 20(5), 055110.
- Ihme, M. et Y. C. See (2010). Large-eddy simulation of a turbulent lifted flame in a vitiated co-flow. *Combust. Flame* 157(10).
- James, S., J. Zhu, et M. Anand (2006). Large-eddy simulations as a design tool for gas turbine combustion systems. *AIAA J.* 44, 674–86.
- Janus, B., A. Dreizler, et J. Janicka (2004a). Experimental study on stabilization of lifted swirl flames in a model GT combustor. *Flow Turbul. Combust.* (75), 293 – 315.
- Janus, B., A. Dreizler, et J. Janicka (2004b). Flow field and structure of swirl stabilized non-premixed natural gas flames at elevated pressure. *ASME Turbo Expo, Vienna*, 293 – 315.
- Janus, B., A. Dreizler, et J. Janicka (2007). Experiments on swirl stabilized non-premixed natural gas flames in a model gasturbine combustor. *Proc. Combust. Inst.* 31 (2), 3091 – 3098.
- Jay, S. et O. Colin (2011). A variable volume approach of tabulated detailed chemistry and its applications to multidimensional engine simulations. *Proceedings of the Combustion Institute* 33(2), 3065 – 3072.

- Kee, R. J., J. F. Grcar, M. D. Smooke, et J. A. Miller (1985). A fortran program for modelling steady laminar one-dimensional premixed flames. Technical Report SAND85-8240-UC-401, Sandia National Laboratories.
- Kee, R. J., J. F. Grcar, M. D. Smooke, et J. A. Miller (1992). A Fortran Program for Modelling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flames. Technical report, Sandia National Laboratories.
- Kee, R. J., R. M. Rupley, et J. A. Miller (1989). CHEMKIN-II : a fortran chemical kinetics package for the analysis of gas phase chemical kinetics. Technical Report SAND89-8009B-UC-706, Sandia National Laboratories.
- Kerstein, A. R., W. Ashurst, et F. A. Williams (1988). Field equation for interface propagation in an unsteady homogeneous flow field. *Phys. Rev.* 37, 2728–2731.
- Kuenne, G., A. Ketelheun, et J. Janicka (2011). LES modeling of premixed combustion using a thickened flame approach coupled with FGM tabulated chemistry. *Combustion and Flame* 158(9), 1750 – 1767.
- Lamouroux, J. (2012). *Tabulation de la cinétique chimique pour la modélisation de la combustion sans flamme*. Ph. D. thesis, En préparation Ecole Centrale Paris.
- Lecocq, G., S. Richard, O. Colin, et L. Vervisch (2011). Hybrid presumed pdf and flame surface density approaches for Large-Eddy Simulation of premixed turbulent combustion : Part 1 : Formalism and simulation of a quasi-steady burner. *Combust. Flame* 158(6), 1201 – 1214.
- Li, B., E. Baudoin, R. Yu, Z. Sun, Z. Li, X. Bai, M. Alden, et M. Mansour (2009). Experimental and numerical study of a conical turbulent partially premixed flame. *Proc. Combust. Inst.* 32 (2), 1811 – 1818.
- Lindstedt, P. (1997). 12 month progree report 1. Technical report, Brite Euram Program Project BE 95 1523. Report No. TR-96 009.
- Luche, J. (2003). Elaboration of reduced kinetic models of combustion. Application to a kerosene mechanism. *Ph.D. thesis*.
- Maas, U. et S. Pope (1992). Simplifying chemical kinetics : Intrinsic Low-Dimensional manifolds in composition space. *Combust. Flame* 88, 239–264.
- Masri, A., R. Bilger, et R. Dibble (1988). Turbulent non-premixed flames of methane near extinction. *Combust. Flame* 73, 261–258.
- Mastorakos, E., T. Baritaud, et T. Poinso (1996). Numerical simulations of autoignition in turbulent mixing flows. In T. Baritaud, T. Poinso, et M. Baum (Eds.), *Direct Numerical Simulation for Turbulent Reacting Flows*, pp. 242–276. Editions Technip.
- Medwell, P. R., P. A. M. Kalt, et B. B. Dally (2007, Jan). Simultaneous imaging of OH, formaldehyde, and temperature of turbulent nonpremixed

- jet flames in a heated and diluted coflow. *Combustion and Flame* 148(1-2), 48–61.
- Meier, W., P. Weigand, X. Duan, et R. Giezendanner-Thoben (2007). Detailed characterization of the dynamics of thermoacoustic pulsations in a lean premixed swirl flame. *Combustion and Flame* 150(1-2), 2 – 26.
- Menon, S. et W. Jou (1991). Large eddy simulations of combustion instability in an axisymmetric ramjet combustor. *Combust. Sci. Technol.* 75, 53–72.
- Mercier, R., P. Auzillon, V. Moureau, N. Darabiha, O. Gicquel, D. Veynante, et B. Fiorina (2012). Modeling flame stabilization by heat losses using Filtered Tabulated Chemistry for LES. *Submitted*.
- Michel, J.-B., O. Colin, C. Angelberger, et D. Veynante (2009). Using the tabulated diffusion flamelet model ADF-PCM to simulate a lifted methane-air jet flame. *Combustion and Flame* 156(7), 1318 – 1331.
- Moreau, P. et A. Boutier (1977). Laser velocity measurements in a turbulent flame. In *In the Proceedings of the Sixteenth Symposium (Int.) on Combustion*, pp. 1747–1756. The Combustion Institute, Pittsburg.
- Moss, J.-B. et K. Bray (1977). A unified statistical model of the premixed turbulent flame. *Acta Astronaut.* 4, 291–319.
- Moureau, V., P. Domingo, et L. Vervisch (2011). From Large-Eddy Simulation to Direct Numerical Simulation of a lean premixed swirl flame : Filtered laminar flame-PDF. *158(7)*, 1340–1357.
- Moureau, V., B. Fiorina, et H. Pitsch (2009). A level set formulation for premixed combustion LES considering the turbulent flame structure. *Combust. Flame* 156(4), 801–812.
- Moureau, V., P. Minot, H. Pitsch, et C. Berat (2007). A ghost-fluid method for large-eddy simulations of premixed combustion in complex geometries. *J. Comput. Phys.* 221(2), 600 – 614.
- Nguyen, P., L. Vervisch, V. Subramanian, et P. Domingo (2010). Multidimensional flamelet-generated manifolds for partially premixed combustion. *Combust. Flame* 157(1), 43–61.
- Oberlack, M. et N. Peters (2000). On stochastic Damköhler number variations in a homogeneous flow reactor. *Combustion Theory and Modelling* 4, 495–509.
- Peters, N. (1984). Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Prog. Energy Combustion. Sci.* 10, 319–339.
- Peters, N. (1986). Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. In *In The Proceedings of the 21st Symposium (international) on Combustion*, pp. 1231–1250. The Combustion Institute, Pittsburgh.
- Peters, N. (2000). *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press.
- Pierce, C. et P. Moin (1999). A dynamic model for subgrid-scale variance and dissipation rate. *Physics of Fluids* 10(12), 3041–3044.

- Pierce, C. et P. Moin (2004). Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *Journal of Fluid Mechanics* 504, pp 73–97.
- Pilla, G., D. Galley, D. Lacoste, F. Lacas, D. Veynante, et C. O. Laux (2006). Plasma- Enhanced Combustion of a Lean Premixed Air-Propane Turbulent Flame using a Repetitively Pulsed Nanosecond Discharge. *IEEE Transactions on Plasma Science* 34, 2471–2477.
- Pilla, G., D. Lacoste, D. Veynante, et C. O. Laux (2008). Stabilization of a Swirled Propane-Air Flame Using a Nanosecond Repetitively Pulsed Plasma. *IEEE Transactions on Plasma Science* 36, 940–941.
- Pitsch, H. (1998). A C++ computer program for 0-D combustion and 1-D laminar flame calculations. Technical report, RWTH Aachen.
- Pitsch, H. (2006). Large-eddy simulation of turbulent combustion. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 38, 453–482.
- Pitsch, H. et N. Peters (1998). A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects. *combust. Flame* 114, 26–40.
- Pitsch, H. et H. Steiner (2000). Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia flame D). *Physics of Fluids* 12(10), 2541–2554.
- Poinsot, T. et S. K. Lele (1992). Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.* 1(101), 104–129.
- Poinsot, T. et D. Veynante (2005). *Theoretical and Numerical Combustion*. R. T. Edwards, Inc.
- Pope, S. B. (1985). Pdf method for turbulent reacting flows. *Prog. Energy Combust. Sci.* 11, 119–195.
- Pope, S. B. (1997). Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combust. Theory Modelling* 1, 41–63.
- Rente, T., V. Golovitchev, et I. Denbratt (2001). Thermo and Fluid Dynamics. *COMODIA*.
- Ribert, G., O. Gicquel, D. Veynante, et N. Darabiha (2006). Tabulation of complex chemistry based on self-similar behavior of laminar premixed flames. *Combust. Flame* 146, 649–664.
- Rottier, C. (2010). *Etude expérimentale de l'influence des mélanges gazeux sur la combustion sans flamme*. Ph. D. thesis, INSA de Rouen.
- Roux, A. et H. Pitsch (2010). Large-eddy simulation of stratified combustion. In *Annual Research Briefs*, pp. 275–289. Center For Turbulence Research.
- Roux, S., G. Lartigue, T. Poinsot, U. Meier, et C. Berat (2005). Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acous-

- tic analysis, and large eddy simulations. *Combustion and Flame* 141(1-2), 40 – 54.
- Rullaud, M. (2004). *Modélisation de la combustion turbulente via une méthode de tabulation de la cinétique chimique détaillée couplée à des fonctions de densité de probabilité*. Ph. D. thesis, INSA de Rouen.
- Scmitt, T., Y. Mery, M. Boileau, et S. Candel (2011). Large Eddy Simulation of oxygen/methane flames under transcritical conditions. *Proc. Combust. Inst* 33, 1383–1390.
- Seffrin, F., F. Fuest, D. Geyer, et A. Dreizler (2010). Flow field studies of a new series of turbulent premixed stratified flames. *Combustion and Flame* 157(2), 384–396.
- Smith, G. P., D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song, W. C. Gardiner, V. V. Lissianski, et Z. Qin (1999). <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>.
- Sommers, L. M. T. et L. P. H. D. Goey (1995). A numerical study of a premixed flame on a slit burner. *Combust. Sci and Tech.* 108, 121–32.
- TNF4 (1999). Technical report, Sandia National Laboratories. www.ca.sandia.gov/TNF/4thWorkshop/TNF4.html.
- Tudorache, D., P. Auzillon, O. Gicquel, N. Darabiha, et B. Fiorina (2011). Development of a chemical kinetics tabulation method for the prediction of Diesel engine pollutants. In *23th ICDERS, Irvine, USA*.
- Van-Kalmthout, E. et D. Veynante (1998). Direct numerical simulation analysis of flame surface density models for nonpremixed turbulent combustion. *Physics of Fluids* 10(9), 2347–2368.
- van Oijen, J. A. et L. P. H. de Goey (2009). Predicting NO Formation with Flamelet Generated Manifolds. *Proceedings of the European Combustion Meeting*.
- van Oijen, J. A., F. A. Lammers, et L. P. H. de Goey (2001). Modelling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds. *Combust. Flame* 127(3), 2124–2134.
- Vervisch, L. (1992). Study and modelling of finite rate chemistry effects in turbulent non-premixed flames. In *Annual Research Briefs*, pp. 411–429. CTR, Standord U.
- Vervisch, L., R. Haugel, P. Domingo, et M. Rullaud (2004). Three facets of turbulent combustion modelling : DNS of premixed flame, LES of lifted nonpremixed V-flame and RANS of jet-flame. *Flow Turbul. Combust.* 5(4), 1–36.
- Vervisch, L. et D. Veynante (2000). Interlinks between approaches for modelling turbulent flames. *Proc. Combust. Inst.* 28, 175–183.

- Veynante, D., B. Fiorina, P. Domingo, et L. Vervisch (2008). Using self-similar properties of turbulent premixed flames to downsize chemical tables in high-performance numerical simulations. *Combust. Theory and Modelling*, In Press.
- Veynante, D. et L. Vervisch (2002). Turbulent Combustion Modelling. *Prog. Energy Combust. Sci* 28, 193–266.
- Vicquelin, R. (2010). *Tabulation de la cinétique chimique pour la modélisation et la simulation de la combustion turbulente*. Ph. D. thesis, Ecole Centrale Paris.
- Vicquelin, R., B. Fiorina, S. Payet, N. Darabiha, et O. Gicquel (2011). Coupling tabulated chemistry with compressible CFD solvers. *Proc. Combust. Inst.* 33 33(1), 1481–1488.
- Vreman, A. W., J. A. van Oijen, L. P. H. de Goey, et R. J. M. Bastiaans (2009). Subgrid scale modeling in large eddy simulation of turbulent combustion using premixed flamelet chemistry. *Flow Turbul. Combust.* 82, 511–535.
- Wang, G., M. Boileau, et D. Veynante (2011). Implementation of a dynamic thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Combustion and Flame* 158(11), 2199 – 2213.
- Wang, K., G. Ribert, P. Domingo, et L. Vervisch (2010). Self-similar behavior and chemistry tabulation of burnt gas diluted premixed flamelets including heat loss. *Combust. Theory and Modelling* 14(4), 541–570.
- Wu, Z., S. H. Starner, et R. W. Bilger (2003). Lift-off heights of turbulent H₂/N₂ jet flames in a vitiated coflow. In *Proceedings of the 2003 Australian Symposium on Combustion and the 8th Australian Flame Days*, Monash University, Australia.
- Wunning, J. A. et J. G. Wunning (1997). Flameless oxidation to reduce thermal no-formation. *Progress in Energy and Combustion Science* 23(1), 81–94.