

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

FACULTE DES SCIENCES DE L'INGENIEUR
DEPARTEMENT DE GENIE MECANIQUE

N° d'ordre : *141/MAG/2005*
Série : *003/GM/2005*

MEMOIRE

Présenté en vue d'obtenir le diplôme de
MAGISTER en Génie Mécanique

Option : ENERGETIQUE

***Etude Numérique de la Combustion Turbulente
Prémélangée d'un mélange Gazeux
(Air/Combustible) dans un Brûleur à Bec Bunsen***

Par

CHEKIRED MOURAD

Soutenu le :
Devant le jury :

Président	Mr.M.Kadja	Professeur	Université Mentouri-Constantine
Rapporteur	Mr.Z.Nemouchi	Professeur	Université Mentouri-Constantine
Examineur	Mr.S.Boudebous	M.C	Université Mentouri-Constantine
Examineur	Mr.M.S.Rouabah	M.C	Université Mentouri-Constantine
Invité	Mr.M.S.Boulahlib	C.C	Université Mentouri-Constantine

Remerciements

Mes louanges et mes gratitudes intarissables vont en premier lieu à Dieu, que son nom soit exalté, le tout puissant qui ma prodigué le courage, la volonté et la patience afin d'accomplir ce modeste œuvre.

*Ma très grande reconnaissance va à mon chère encadreur, **Pr.Z.Nemouchi** qu'avec son noble esprit scientifique et sa modestie sans égale, m'a inculqué les vraies valeurs de l'homme du savoir , qui par sa patience, sa loyauté scientifique et morale a su dirigé avec une si parfaite habileté ce présent travail.*

*Mes sincères remerciements vont aussi à mon chère co-encadreur **Mr.M.S.Boulahlib** qui était tout le temps à mes côtés dans les moments les plus difficiles durant la réalisation de ce mémoire, celui qui n'a lésiné ni sur les biens ni sur les moyens et qui par sa bonté et sa largesse d'esprit n'a épargné aucun effort pour me guider par ses précieuses conseils et constatations qui étaient d'une grande utilité pour moi.*

Qu'ils trouvent ici le témoignage de mes nobles sentiments de gratitude et l'hommage de mon profond respect.

*Je remercie infiniment, **Pr. M.Kadja**, directeur du laboratoire d'énergétique appliquée et de pollution, pour tous ses aides précieux, aussi pour les moyens mis à notre disposition durant la réalisation de ce travail. Je le remercie encore une fois d'avoir accepter de présider mon jury.*

*J'exprime ma reconnaissance à **Mr. M.S.Rouabah**, Maître de Conférence à l'Université de Constantine pour avoir accepter de participer à mon jury, montrant ainsi ,par ce geste, le grand intérêt qu'il porte au sujet de ce mémoire.*

*Mes gratitudes vont aussi à **Mr. S.Boudebous**, Maître de Conférence à l'Université de Constantine pour sa disposition, qui ne m'est pas étrange, à faire partie du jury et pour l'importance qu'il a affiché quant au thème du mémoire.*

Je tiens à remercier aussi mes collègues de post graduation qui m'ont toujours encouragé et partagé avec moi des précieux moments de discussions fructueuses qui étaient toujours utiles pour l'avancement du travail de ce mémoire.

Dédicaces

Je dédie ce humble travail à :

La mémoire de ma mère qui m'est toujours la plus chère, que dieu le miséricordieux ait son âme.

A mon chère père, l'archétype de la bonté et de la fidélité qui était toujours à mes côtés dans les moments les plus décisifs de ma vie.

A mes frères.

A mes sœurs.

A ma belle mère.

A mon oncle et ma tante.

A ma grande mère.

A tous mes amis.

A tous les hommes qui se sont sacrifiés pour qu'on vive en hommes libres et sages.

Mourad

Sommaire

<i>Nomenclature</i>	4
---------------------------	---

Chapitre I

INTRODUCTION GENERALE ET ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE

I.1 <i>Introduction Générale</i>	8
I.2 <i>Etude bibliographique</i>	10
I.3 <i>Objectif du travail et contenu du mémoire</i>	17

Chapitre II

THEORIE GENERALE DES ECOULEMENTS REACTIFS

II.1 <i>Introduction</i>	19
II.2 <i>Classification des flammes</i>	20
II.3 <i>Quelques caractéristiques des flammes laminaires prémélangées</i>	22
II.4 <i>Influence de la turbulence sur la combustion-observations</i>	23
II.4.1 <i>Flamme turbulente prémélangée mono-dimensionnelle</i>	23
II.5 <i>Analyse physique – Diagramme de combustion turbulente</i>	24
II.5.1 <i>Introduction</i>	24
II.5.2 <i>Diagramme de combustion prémélangée</i>	25

Chapitre III

LE CODE DE CALCUL KIVAII ET FORMULATION MATHEMATIQUE

III.1 <i>Présentation générale du code KIVAII</i>	32
III.2 <i>Equations de l'aérothermochimie turbulente</i>	33
III.2.1 <i>Equations de l'aérodynamique</i>	33
III.2.1.1 <i>Equation de continuité pour l'espèce m</i>	33
III.2.1.2 <i>Equation de continuité pour le mélange</i>	33
III.2.1.3 <i>Equation de conservation de quantité de mouvement</i>	34
III.2.1.4 <i>Equation de conservation de l'énergie</i>	34
III.2.1.5 <i>Equation de transport de l'énergie cinétique turbulente</i>	35
III.2.1.6 <i>Equation de transport du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente</i>	35

III.2.2 Equations d'état.....	36
III.2.3 Réactions chimiques.....	37
III.2.3.1 Les réactions d'équilibre.....	38
III.2.3.2 Les réactions cinétiques.....	39

Chapitre IV

METHODE NUMERIQUE DE RESOLUTION

IV.1 Introduction.....	47
IV.2 Méthode de résolution (A.L.E) dans le code de calcul	
KIVAII.....	47
IV.2.1 La phase lagrangienne.....	47
IV.2.2 Phase de rezonning (Phase C).....	47
IV.3 Maillage et topologie.....	48
IV.3.1 Cellule de base.....	49
IV.3.2 Cellule auxiliaire.....	53
IV.3.3 Autres cellules auxiliaires.....	54
IV.4 Description de la phase lagrangienne (phase A et B).....	55
IV.4.1 Phase A (explicite).....	56
IV.4.2 Phase B (implicite).....	58
IV.4.3 Algorithme SIMPLE.....	64
IV.5 Phase C (explicite).....	65
IV.5.1 Calcul des variables positionnées aux centres des cellules de base.....	65
IV.5.2 Calcul des variables positionnées aux sommets des cellules de base.....	67
IV.6 Traitement de la convection.....	68
IV.6.1 Schémas « Partiel Donor Cell ».....	68
IV.6.1.1 Schéma centré.....	69
IV.6.1.2 Schémas donneur pur.....	69
IV.6.1.2 Autres schémas.....	70
IV.6.2 Schémas « Q.S.O.U ».....	71
IV.7 Conditions aux limites.....	72
IV.8 Organigramme du code de calcul KIVA II.....	74

Chapitre V**RESULTATS ET DISCUSSION**

V.1 Introduction.....	78
V.2 Géométrie et données du problème.....	78
V.3 Génération du maillage.....	80
V.4 Discussion des résultats.....	81
V.4.1 Le jet non-réactif.....	83
V.4.2 Le jet réactif.....	83
V.4.3 Effets de quelques paramètres sur l'aérothermochimie de la flamme.....	85
V.4.3.1 Effet du nombre de Reynolds.....	85
V.4.3.2 Effet de l'intensité de turbulence à l'entrée.....	86
V.4.3.3 Effet de l'intensité de turbulence à l'entrée et de la richesse sur la hauteur de la flamme.....	87
V.5 Résultats et graphes.....	88
Conclusion Générale.....	101
Bibliographie.....	103

Nomenclature

Symbole	Unité	Définition
\vec{A}_a	m^2	Vecteur surface normal à la facette a d'une cellule de base
\vec{A}'_β	m^2	Vecteur surface d'une cellule auxiliaire de quantité de mouvement
\vec{A}''_γ	m^2	Vecteur surface d'une cellule auxiliaire utilisée pour le calcul des vitesses normales des facettes des cellules de base
a_{mr}, b_{mr}		Coefficients stœchiométriques de la réaction r
C_p	$J.Kg^{-1}.K^{-1}$	Chaleur spécifique du mélange à pression constante
C_{pm}	$J.Kg^{-1}.K^{-1}$	Chaleur spécifique de l'espèce m à pression constante
C_v	$J.Kg^{-1}.K^{-1}$	Chaleur spécifique du mélange à volume constant
C_{vm}	$J.Kg^{-1}.K^{-1}$	Chaleur spécifique de l'espèce m à volume constant
D	$m^2.s^{-1}$	Coefficient de diffusion (loi de Fick)
h_m	$J.Kg^{-1}$	Enthalpie spécifique de l'espèce m
I	$J.Kg^{-1}$	Energie interne spécifique du mélange
I_m	$J.Kg^{-1}$	Energie interne de l'espèce m
Id_3		Matrice identité
\vec{J}	$W.m^{-2}$	Vecteur densité du flux de chaleur
k	$m^2.s^{-2}$	Energie cinétique turbulente
K	$W.m^{-1}.K^{-1}$	Conductivité thermique
M_{ijk}	Kg	Masse contenue dans la cellule (i,j,k)
M'_{ijk}	Kg	Masse contenue dans la cellule auxiliaire (i,j,k) de quantité de mouvement.
M''_{ijk}	Kg	Masse contenue dans la cellule auxiliaire centrée sur la face a de la cellule (i,j,k)
p	$N.m^{-2}$	Pression du mélange
R_o	$J.mole^{-1}.K^{-1}$	Constante universelle des gaz parfaits

t	s	Variable temps
T	K	Température du mélange
\vec{u}	$m.s^{-1}$	Vecteur vitesse du mélange de composantes (u, v, w)
V_{ijk}^n	m^3	Volume de la cellule (i,j,k) au pas du temps n
W_m	$Kg.mole^{-1}$	Masse molaire du mélange
V_{ijk}^A	m^3	Volume de la cellule (i,j,k) en fin de la phase A
V_{ijk}^B	m^3	Volume de la cellule (i,j,k) en fin de la phase B
x, y, z	m	Variables d'espace
$x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk}$	m	Coordonnées du sommet n°4 de la cellule (i,j,k)
$x_{ijk}^c, y_{ijk}^c, z_{ijk}^c$	m	Coordonnées du centre de la cellule (i,j,k)
X^n		Variable X au pas du temps (n)
X^A		Variable X en fin de la phase A
X^B		Variable X en fin de la phase B
X^{n+1}		Variable X au pas du temps $(n+1)$
Y_m^A		Fraction massique de l'espèce m en fin de la phase A
Y_m^B		Fraction massique de l'espèce m en fin de la phase B
\dot{Q}^c	$J/s.m^3$	Energie produite ou consommée par les réactions chimiques
Pr_k, Pr_ϵ		Constantes du modèle de turbulence $k - \epsilon$
\vec{g}	m/s^2	Force de gravité

Lettres grecques

Lettre	Unité	Définition
δ_{ml}		Symbole de Kronecker valant 1 si $m=l$ et 0 sinon
Δt	s	Pas du temps de calcul utilisé pour la discrétisation temporelle
ϵ	$m^2.s^{-3}$	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente
σ	$N.m^{-2}$	Tenseur des contraintes visqueuses
χ_m		Mole de l'espèce m
ρ	$Kg.m^{-3}$	Masse volumique du mélange
ρ_m	$Kg.m^{-3}$	Masse volumique de l'espèce m

$\dot{\omega}_r$	$mole.m^{-3}.s^{-1}$	Taux de réaction chimique n° r
ϕ_D		Paramètre d'implication des termes diffusifs
ϕ_P		Paramètre d'implication des termes de pression
τ_c	s	Echelle de temps caractéristique de la chimie
τ_t	s	Echelle de temps caractéristique de la turbulence
τ_k	s	Echelle de temps de Kolmogorov

Nombres sans dimensions

<i>Nombre</i>	<i>Définition</i>
<i>Da</i>	<i>Nombre de Damköhler</i>
<i>Pr</i>	<i>Nombre de Prandtl</i>
Re_t	<i>Nombre de Reynolds turbulent</i>
<i>Sc</i>	<i>Nombre de Schmidt</i>
<i>Ka</i>	<i>Nombre de Karlovitz</i>

Notations

<i>Notation</i>	<i>Définition</i>
–	<i>Moyenne au sens de Reynolds</i>
~	<i>Moyenne au sens de Favre</i>

Abréviations

<i>Abréviation</i>	<i>Définition</i>
<i>A.L.E</i>	<i>Arbitrary Lagrangian Eulerian</i>
<i>C.F.L</i>	<i>Courant Friedrichs Lewy</i>
<i>PDC</i>	<i>Schémas Partial Donor Cell</i>
<i>Q.S.O.U</i>	<i>Schémas Quasi Second Order Upwind</i>

Chapitre I.

Introduction Générale et Etude Bibliographique

I.1 Introduction Générale

I.2 Etude bibliographique

I.3 Objectif du travail

I.4 Contenu du mémoire

Chapitre.I

Introduction Générale et Etude Bibliographique

I.1 Introduction générale

La combustion turbulente prémélangée est l'un des thèmes privilégiés de l'énergétique. On peut expliquer cette situation par une double constatation. D'une part, ce mode de conversion de l'énergie intervient dans divers systèmes énergétiques, tels que les moteurs à allumage commandé, les foyers des turboréacteurs aéronautiques et aussi dans des situations de risques technologiques liés par exemple aux explosions accidentelles. Dans l'ensemble de ces situations, il est crucial de prédire correctement les taux de combustion et de propagation de la flamme en fonction des paramètres de l'écoulement (notamment la structure de la turbulence) et du mélange.

D'autre part, d'un point de vue de recherche de base dans les sciences de l'ingénieur, les problèmes d'interaction entre un écoulement turbulent et la flamme prémélangée sont d'une richesse exceptionnelle et appellent des interventions de divers ordres, comme l'attestent les divers travaux expérimentaux et numériques qui sont consacrés à ce thème depuis plus d'un demi-siècle.

Les différentes applications technologiques modernes de la combustion turbulente prémélangée nécessitent une meilleure connaissance de la structure de l'écoulement, des phénomènes de stabilisation de la flamme et leurs critères d'extinction. L'amélioration de chaque élément passe donc par une bonne compréhension des phénomènes relatifs à la combustion. De ce fait, il est nécessaire de comprendre les processus physiques et chimiques prépondérants au sein du système de combustion tels que la stabilité des flammes, l'interaction entre la turbulence et les réactions chimiques et le comportement dynamique.

Si l'on se place dans une perspective plus récente, on constate que depuis une vingtaine d'années le domaine de la combustion turbulente en général et celui de la combustion turbulente dans les systèmes réactifs prémélangés en particulier, se sont considérablement développés, sous l'influence conjuguée de l'avènement des techniques expérimentales utilisant les lasers et l'informatique et du développement des méthodes d'analyse mathématiques et numériques avancées.

Les travaux effectués au laboratoire d'énergétique appliquée et de pollution (**L.E.A.P**) à l'Université de Constantine, dans le domaine des écoulements réactifs et en particulier, dans celui des flammes turbulentes prémélangées s'inscrivent dans ce cadre, depuis quelques années. L'objectif global de ces études, est de comprendre les mécanismes d'interaction entre la structure de la turbulence et la réaction chimique dans la flamme, tout en mobilisant une approche numérique utilisant des modèles de combustion turbulente implémentés dans des codes de calcul et visant à les valider plus tard.

Dans l'introduction à une synthèse récente de l'état des connaissances sur les écoulements turbulents réactifs, *Strahle (1986)* notait l'absence d'études expérimentales systématiques sur la structure de tels écoulements qui pourraient servir de banques de données pour la validation des modèles de prédiction numérique. *Boukhalfa (1988)* explique qu'en se limitant au cas des flammes turbulentes de prémélange, la plupart des études expérimentales portent sur l'investigation détaillée de la structure dynamique ou scalaire d'une flamme donnée, avec une seule série de conditions de turbulence et de combustion. Autrement dit, l'aspect paramétrique de telles études fait cruellement défaut. Cet aspect qui lui paraît pourtant fondamental tant pour la compréhension phénoménologique des interactions qui caractérisent les flammes turbulentes que pour tester les domaines de validité des modèles théoriques et des codes de prédiction numérique. Il semble pour lui, en effet qu'un pas important peut être franchi si les caractéristiques de la réponse d'une flamme turbulente de prémélange de configuration donnée aux variations systématiques des paramètres d'écoulement et de combustion, peuvent être directement établies.

I.2 Etude bibliographique

Spalding (1972) a développé une procédure de calcul pour l'étude de la propagation de la flamme turbulente avec deux modèles distincts de la cinétique de la réaction de combustion. Dans le premier modèle, le taux de réaction moyen est relié aux concentrations moyennes et la température moyenne dans un point donné par la loi d'Arrhenius. Dans le deuxième modèle le taux de réaction local dépend seulement du taux de cassure des tourbillons par l'action de la turbulence. Ses résultats montrent que le deuxième modèle est en bon accord avec l'expérimental. Ce modèle appelé **E.B.U (Eddy Break Up)** représente un caractère attractif car le taux de réaction moyen est relié algébriquement à des quantités connues sans avoir recours à une équation de transport supplémentaire.

Spalding (1978) a présenté une nouvelle expression pour le taux de réaction moyen dans une flamme turbulente, pour un rapport (air/combustible) uniforme ou non. Cette expression est basée sur l'idée que des paquets de gaz cohérents frais et brûlés, exposés à un processus d'étirement, s'entremêlent donnant lieu à un mélange et donc à la réaction.

Abdelgayed et al (1979) ont présenté une théorie relative à la combustion turbulente, celle des « Deux tourbillons », lors de leur étude sur la propagation des flammes turbulentes prémélangées. Ils ont montré théoriquement et expérimentalement, que le taux de combustion dans les petites structures (petits tourbillons) peut être quelque fois plus grand que celui dans les grosses structures (grands tourbillons). Des expressions théoriques pour le rapport des vitesses de propagation laminaire et turbulente des flammes ont été proposées en fonction du nombre de Reynolds et le rapport de la vitesse laminaire et l'écart type des fluctuations de vitesses. Ces valeurs théoriques ne sont pas en bon accord avec celles obtenues par l'expérience. L'effet de la turbulence sur les limites d'inflammabilité n'est pas correctement capté. Ces limites sont réduites toutefois que la turbulence augmente en intensité. L'augmentation de l'énergie d'allumage et l'établissement de la flamme initiale dans une région où l'intensité de la turbulence est réduite peut engendrer le cas contraire.

Bray (1979) a étudié l'interaction entre la turbulence et la combustion d'un point de vue modélisation. Les effets de la combustion sur la structure de turbulence et ceux de la turbulence sur les taux de réactions chimiques ont été discutés.

Borghi et Dutoya (1979) ont traité le problème de fermeture du flux diffusif turbulent et la destruction moléculaire des fluctuations des espèces réactives (ou de la température) en considérant les formes de la **PDF** (*Probability Density Function*) pour la vitesse et les concentrations des espèces. Dans le cas d'une flamme parfaitement prémélangée, les hypothèses de fermeture ont été proposées d'une façon à permettre une étude numérique de l'influence de la réaction sur le coefficient diffusif turbulent et sur les micro-échelles de Taylor.

Yanagi et Mimura (1981) ont traité expérimentalement le problème de la corrélation vitesse température dans les flammes de prémélange. Dans leurs études expérimentales, la température et la vitesse dans la flamme, ont été mesurées par **L.D.A** et un thermocouple compensé. La corrélation a été calculée par micro-ordinateur. Pour clarifier le phénomène du transfert de chaleur anormal dans le front de flamme, les **PDF** et les macro-échelles des fluctuations de vitesse et de la température ont été mesurées. La nature bimodale de la **PDF** dans la région du front de flamme pour toutes les composantes fluctuantes suggère que la structure du front de flamme étudiée est celle d'une flamme plissée.

Gökalp et al (1981) ont mesuré le champ de température dans une flamme turbulente prémélangée froide (heptane-air), pour obtenir en premier lieu des informations concernant l'influence de la combustion sur la turbulence. Leurs mesures ont été effectuées sur une flamme froide, stabilisée dans un réacteur conico-cylindrique, où la turbulence est générée par une grille. Les fluctuations de la température dans la flamme ont été déterminées. Des mesures similaires ont aussi été faites sur un écoulement turbulent chaud traversant le réacteur précédent. Des comparaisons ont été établies entre les caractéristiques des champs thermiques turbulents pour deux températures différentes avec et sans réactions chimiques dues à la combustion.

Bill et al (1981) ont pu mesurer, en utilisant deux techniques expérimentales, les champs de vitesse et de masse volumique dans une flamme turbulente de prémélange (éthylène-air) pauvre. Le but de leur étude était de faire une investigation sur l'interaction entre la turbulence générée par une grille et une flamme du type V dans un brûleur. La vitesse de propagation turbulente de la flamme a été étudiée pour trois différentes vitesses du jet dans le brûleur. Leurs mesures portées sur les différentes quantités moyennes et fluctuantes de la vitesse et de la masse volumique ont suggéré selon eux, que les résultats obtenus dans ces

conditions d'expérience ne sont pas typiques pour l'interaction qui existe entre la combustion et la turbulence. La concentration des espèces chimiques intermédiaires a été trouvée appréciable et donc ne peut être négligée pour déterminer la statistique de la masse volumique dans l'écoulement.

Boukhalfa (1988) a rapporté dans sa thèse une contribution à l'étude de la structure scalaire des flammes turbulentes de prémélange du type bunsen. L'auteur a mené une étude expérimentale basée sur des techniques bien connues de l'époque. Ses résultats portaient essentiellement sur les caractéristiques spatiales (hauteurs et épaisseurs apparentes des flammes) et temporelles (spectres de puissance de la masse volumique fluctuante, le temps de passage du front de flamme instantané et divers échelles temporelles du champs scalaire). Les résultats expérimentaux obtenus sont en bon accord avec les prédictions du modèle **B.M.L** (*Bray Moss Libby*).

Namazian et al (1989) ont effectué des mesure de la masse volumique instantanée en deux points et au même instant, sur le même type de configuration. Cette stratégie de mesure leur a permis de déterminer les fonctions de corrélations spatiales dans les différentes régions de la flamme, sans passer par l'hypothèse de Taylor.

Videtto et Santavicca (1990) ont mis en cause les précédentes investigations expérimentales, concernant les grandeurs de la turbulence, dans les flammes turbulentes prémélangées utilisées dans les brûleurs conventionnels des laboratoires. A cause de plusieurs inconvénients de ces configurations qui sont associés en premier lieu aux mécanismes de stabilisation, une configuration d'une flamme à propagation libre a été proposée pour étudier l'interaction flamme-turbulence. Le caractère du champs d'écoulement non perturbé représente un milieu idéal pour étudier cette interaction. Les différentes mesures effectuées par la technique L.D.A dans une flamme turbulente prémélangée stœchiométrique (propane-air) ont montré des changements importants dans les paramètres de la turbulence à travers la flamme. Leurs résultats ont montré qu'il y a une importante production de la turbulence dans la flamme et qu'elle est de nature anisotrope.

Poinsot et al (1990) ont présenté une nouvelle approche pour la classification des flammes turbulentes prémélangées. Une approche basée sur la simulation numérique directe (**D.N.S**) a été utilisée à partir de l'analyse de l'interaction du front de flamme laminaire avec une pair de

vortex. Leurs résultats ont mené enfin à une construction d'un diagramme spectral avec certaines hypothèses d'une façon à établir un diagramme similaire à celui proposé par **Borghi (1984) et Williams (1985)**. Les auteurs ont montré que le front de flamme est beaucoup plus résistant à la déformation engendrée par le vortex que ce qui est dans la littérature.

Christopher et al (1990) ont étudié numériquement la propagation de la flamme turbulente de prémélange dans un milieu turbulent homogène et isotrope. Ils ont adopté l'hypothèse d'un dégagement de chaleur faible au sein de la flamme, d'un écoulement faiblement compressible et le modèle d'Arrhenius pour la combustion. Dans leur étude, les effets de la turbulence sur la flamme ont été étudiés. Leurs résultats se basent beaucoup plus sur les aspects globaux caractérisés par la vitesse turbulente du prémélange. Les corrélations de la vitesse de la flamme avec la fluctuation de vitesse et le nombre de Reynolds turbulent ont été établies.

Maas et Pope (1992) ont développé une procédure générale pour simplifier la cinétique chimique et son utilisation dans les modèles mathématiques de prédiction des écoulements réactifs, en se basant sur une approche de la dynamique des systèmes. Dans leur étude ils ont montré que cette approche fiable de simplification des schémas cinétiques ne pose pas le problème de détermination de la réaction chimique dans le mécanisme complet, sur laquelle doit se faire l'hypothèse d'équilibre partiel et sur quelle espèce chimique l'état quasi-stationnaire est supposé. Contrairement aux autres méthodes conventionnelles de réduction des mécanismes cinétiques, la procédure de calcul basée sur l'analyse des vecteurs propres locaux peut rendre identifiables les échelles de temps rapides des systèmes de réactions chimiques. La méthode de tabulation introduite a permis une utilisation plus performante dans les codes CFD, ce qui la rend peut être plus attractive.

Dumont et al (1993) ont présenté une étude expérimentale détaillée d'une flamme turbulente prémélangée dans un brûleur bunsen, par des techniques expérimentales particulières. Des mesures du champ de la vitesse moyenne et de la turbulence, de la variable de progrès moyenne et fluctuante et de la longueur de flammelette par unité de surface de la flamme ont été effectuées.

Les auteurs de cette étude ont pu arriver à une identification claire de l'influence de la combustion sur la turbulence bien qu'elle soit insignifiante. Ce qui est original dans leurs résultats est que la mesure de la longueur des flammettes par unité de surface donne directement l'accès à obtenir le taux de réaction moyen dans la flamme. Leurs mesures ont été

comparées avec celles des modèles numériques pour le calcul du taux de réaction moyen comme le modèle **EBU** (*Eddy Break Up*). Elles sont en bon accord mais il reste encore d'étendre la validation pour d'autres modèles de la combustion prémélangée.

Ghenai (1995) a étudié expérimentalement la structure de la dynamique spatio-temporelle des fronts de flammes instantanés en combustion prémélangée pour les flammes laminaires. Son étude avait pour but de fournir les données nécessaires sur l'épaisseur et la vitesse de propagation laminaire utilisée dans l'estimation des paramètres concernant la dynamique temporelle des flammes ainsi que sur l'effet de la gravité. Pour les flammes turbulentes de prémélange l'objectif était de caractériser la structure et la dynamique spatio-temporelle des flammes instantanées et qui concerne la détermination des échelles spatiales et temporelles de la dynamique des flammes, leurs vitesses de propagation normale, la densité surfacique de flamme, ainsi que le taux moyen de production chimique. Ses résultats validés avec le modèle **B.M.L** montraient un accord avec la théorie.

Chen et Hong (1998) dans leur analyse sur la corrélation entre la vitesse de la flamme et l'étirement dans les flammes de prémélange, une simulation numérique directe des flammes turbulentes prémélangées bidimensionnelles et transitoires, sous l'influence des deux paramètres à savoir la courbure et les taux de déformation pour des mélanges riches et stœchiométriques a été faite en utilisant un mécanisme réactionnel détaillé (*C₁Mechanism*) pour la combustion du méthane. Leurs résultats ont montré que les effets de courbure donnent naissance à une relation non-linéaire globale de la vitesse de flamme avec l'étirement.

Dally et al (1998) ont étudié numériquement la structure du champ d'écoulement des jets turbulents et des flammes du type *Bluff-Body*. Leurs résultats obtenus avec les modèles mathématiques standards de la turbulence, comparés avec ceux expérimentaux montrent que le modèle *k-ε* et le modèle **RSM** (*Reynolds Stress Model*) sous-estiment la taille des zones de recirculation qui existent dans le brûleur. Les corrections portées sur les constantes du modèle *k-ε* donnent de meilleures prédictions du champ d'écoulement. Leur étude a démontré la convenance du modèle EBU à simuler le champ de température et du mélange dans la zone de recirculation de la flamme du brûleur du type *Bluff-body*.

Gagnepain (1998) a étudié expérimentalement les changements au sein des flammes turbulentes de prémélange pauvres lorsque l'on modifie la richesse et la turbulence. D'une

part il a présenté une description de la structure de la turbulence, en terme de ses multiples échelles spatiales et temporelles et de son énergie cinétique et d'autre part les modifications au sein du champs scalaire et de la morphologie des flammelettes, en terme d'orientation et de densité de surface de flammes.

Najm et al (1999) ont étudié l'interaction d'une flamme turbulente de prémélange avec une paire de vortex bidimensionnels tournant en deux sens différents pour deux mélanges : l'un stoichiométrique et l'autre riche en utilisant une cinétique chimique détaillée C_1C_2 . La structure de la flamme ainsi que les phénomènes transitoires ont été examinés au niveau des différentes zones de la paire de vortex . La simulation montre que les flammes des mélanges riches ont une réponse plus rapide à des perturbations de taux de déformation instationnaire que les flammes des mélanges stoichiométriques. Leurs résultats numériques ont montré un décalage par rapport à l'expérimental concernant en premier lieu les temps de réponse relatifs à certains radicaux. Ces décalages soulignent la nécessité de recourir à une caractérisation détaillée du temps de réponse des mécanismes chimiques dans les flammes à régime variable par rapport à l'expérimental.

Anne et al (1999) ont calculé numériquement une flamme laminaire (*méthane-air*) dans un brûleur bunsen pour deux mélanges différents (*riche et pauvre*) et pour deux configurations de brûleurs différentes une classique et l'autre accompagnée d'un halo d'une flamme de diffusion, positionné un peu plus loin dans le sens de l'écoulement. La présence des gradients extrêmement larges dans ce type de flammes a obligé les auteurs à utiliser une méthode numérique adaptative plus sophistiquée que celle utilisée dans les flammes de diffusion : Une méthode dite **(L.R.R)** (*Local Rectangular Refinement Solution Adaptive Gridding*). Cette méthode a été utilisée avec une cinétique chimique détaillée et un modèle **(O.T.R)** (*Optically Tin Radiation*) pour les flammes riches et pauvres. L'espacement du maillage a une grande influence sur la position du cône du brûleur qui se stabilise seulement par un raffinement adéquat. Les résultats obtenus par la méthode **(L.R.R)** sont en bon accord avec ceux obtenus par les autres méthodes numériques conventionnelles.

Mulas et Talice (2002) ont développé un modèle mathématique complètement compressible pour la simulation numérique des écoulements réactifs prémélangés turbulents à faibles vitesses. Un modèle des flammelettes de la combustion turbulente prémélangée basé sur la

solution de l'équation de transport pour la variable de progrès a été couplé avec un modèle de turbulence à une équation de *Spalarat-Allmaras*.

De Lagenesto et Pitsh (2002) ont formulé une méthode dite **L.S.M** (*Level Set Method*) basée sur l'équation G , pour la simulation à grand échelle (**L.E.S**) de la combustion turbulente prémélangée. Comme validation du modèle et pour démontrer les avantages de l'approche (**L.E.S**) en matière de simulation de la combustion turbulente prémélangée, deux flammes tirées de la série d'expérience de **Chen et Al (1996)** ont été prises. Une comparaison a été faite entre les résultats numériques obtenus et ceux expérimentaux de **Chen et Al (1996)** sur le jet à froid et avec combustion des deux flammes citées auparavant. Le faible décalage enregistré des résultats numériques par rapport à l'expérience peut être du, selon les auteurs, à la sous-estimation des fluctuations turbulentes du front de flamme et probablement à la présence du terme de courbure dans l'équation G .

Boulahlib et al (2002) ont mené une étude expérimentale sur la combustion turbulente prémélangée d'une flamme bunsen stabilisée par une flamme pilote. Une étude détaillée de la structure du champs dynamique moyen et fluctuant dans les flammes prémélangées méthane-air et devant le front de flamme. Les auteurs ont montré l'importance de l'influence de la richesse et de la turbulence sur les hauteurs de flammes ainsi que sur leur structure globale.

Bell et al (2002) ont étudié le comportement d'une flamme turbulente de prémélange méthane-air. La simulation a été effectuée en utilisant une algorithmique adaptative dépendante du temps à faible nombre de Mach pour la combustion, basée sur une formulation du type (**S.O.P**) (*Second Order Projection*). Le mécanisme cinétique complet pour le méthane a été modélisé en utilisant un schémas (**D.R.M19**) : 20 espèces, 84 réactions dérivé de celui du **GRFM Mech1-2**. Leurs résultats ont indiqué que le plissement dans la flamme est le facteur déterminant menant à l'augmentation de la turbulence de la flamme.

I.3 Objectif du travail:

Le présent travail est une contribution à l'étude de la structure et de la chimie de la flamme turbulente prémélangée du type bunsen. Une étude numérique par la méthode **RANS** (*Reynolds Averaged Navier Stokes equations*) de la flamme turbulente de prémélange méthane-air stabilisée par une flamme pilote sur un brûleur bunsen a été réalisée, en utilisant une version modifiée du code KIVAII, adaptée pour cette configuration.

Le modèle de combustion utilisé est basé sur la chimie à deux étapes de l'oxydation du méthane déduit du mécanisme réactionnel détaillé d'après la théorie de la structure asymptotique des flammes méthane-air proposée par *Peters et Williams (1987)*.

I.4 Contenu du mémoire :

En plus de cette introduction qui constitue le premier chapitre du mémoire, ce dernier contient quatre autres chapitres principaux :

Le deuxième chapitre présente un rappel sur les connaissances théoriques de base concernant la combustion et les écoulements réactifs en général et les flammes prémélangées laminaires et turbulentes, en particulier. Les régimes de combustion turbulente prémélangée sont classés.

Le troisième chapitre comportera une présentation générale du code de calcul KIVAII utilisé comme outil pour la modélisation. Une formulation mathématique des équations de l'aérothermochimie des écoulements réactifs turbulents en générale a été présentée d'une façon similaire à celle utilisée par le code de calcul et les modifications apportés sur les équations mathématiques qui régissent l'aérothermochimie des flammes turbulentes de prémélange ont été discutées.

Le quatrième chapitre sera réservé à la description de la méthode numérique telle qu'elle est utilisée par le code de calcul pour la résolution des équations de l'aérothermochimie turbulente.

Le cinquième chapitre sera composé d'une présentation du problème étudié et de l'ensemble de résultats obtenus et de leur discussion en fin une conclusion générale.

Chapitre II.

Théorie Générale des Ecoulements Réactifs

II.1 Introduction

II.2 Classification des flammes

II.3 Quelques caractéristiques des flammes laminaires prémélangées

II.4 Influence de la turbulence sur la combustion-observations

II.4.1 Flamme turbulente prémélangée mono-dimensionnelle

II.5 Analyse physique – Diagramme de combustion turbulente

II.5.1 Introduction

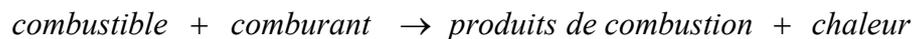
II.5.2 Diagramme de combustion prémélangée

Chapitre.II

Théorie Générale des Ecoulements Réactifs

II.1 Introduction

La combustion est aujourd'hui un des principaux moyens de conversion de l'énergie. Elle est utilisée dans de nombreux systèmes pratiques aussi bien pour produire de **la chaleur** (chaudières ou fours domestiques et industriels), de **l'électricité** (centrales thermiques), que pour **le transport** (moteurs d'automobile, d'avion ou de fusée) ou encore **la destruction des déchets** (incinérateurs). La combustion est caractérisée par une (ou des) réaction(s) irréversible(s) fortement exothermique(s) entre un combustible et un comburant(ou oxydant) selon le schéma global :



Plus précisément, cette réaction :

- **Induit un fort dégagement de chaleur** qui a lieu dans une zone très mince (les flammes les plus courantes ont des épaisseurs δ_L typiques de l'ordre de 0.1 à 1mm) conduisant à des gradients thermiques très élevés (le rapport des températures entre gaz brûlés et gaz frais et celui des masses volumiques sont de l'ordre de 5 à 7).
- **Correspond à un taux de réaction fortement non linéaire** (loi d'Arrhenius).

Différents mécanismes de couplage interviennent en combustion. Les **schémas cinétiques** de la réaction chimique doivent être décrits pour déterminer le taux de consommation du combustible, la formation de produits de combustion et d'espèces polluantes et prédire l'allumage, la stabilisation et l'extinction des flammes. Les **transferts de masse**, par diffusion moléculaire ou transport convectif, des différentes espèces chimiques sont aussi des éléments importants des processus de combustion. Le dégagement d'énergie due à la réaction chimique induit des **transferts thermiques** intenses par conduction, convection et/ou rayonnement, tant au sein de l'écoulement qu'avec son environnement par exemple les parois du brûleur.

La principale difficulté de la combustion turbulente réside dans l'interaction entre l'écoulement turbulent et le dégagement de chaleur. Une large gamme d'échelles caractéristiques apparaît alors comme les échelles turbulentes spatiales intégrales (l_t , de Taylor Λ et de Kolmogorov l_k) et temporelle (τ_t) et les échelles de la réaction chimique spatiale (e.g. épaisseur de flamme δ_l) et temporelle (τ_c). Le régime des flammes turbulentes dépend fortement des rapports de ces échelles.

II.2 Classification des flammes

Deux situations généralement rencontrées sont identifiées selon la procédure utilisée pour introduire les réactifs dans la zone de flamme. Elles sont schématisées sur la figure (II.1).

- **Flammes prémélangées** : Les réactifs sont mélangés avant la zone de réaction.
- **Flammes non-prémélangées** ou **flammes de diffusion** : Les réactifs sont introduits séparément dans la zone de réaction, de part et d'autre de la flamme. Ils sont alors essentiellement entraînés l'un vers l'autre par diffusion moléculaire.

La combustion prémélangée est, à priori, la situation la plus efficace en terme de dégagement d'énergie puisque les réactifs sont déjà en contact avant la zone de flamme. En revanche, une telle flamme est susceptible de se propager dans le mélange *combustible/oxydant* donc de remonter l'écoulement en amont de la chambre, jusqu'à l'endroit où s'effectue le mélange, ce qui pose des problèmes de sécurité. Cela n'est pas le cas pour les flammes de diffusion.

Les écoulements pouvant être laminaires ou turbulents, quatre situations sont possibles, résumées dans la figure (II.2) qui y associe quelques applications pratiques. Si les flammes laminaires semblent n'intervenir que dans quelques applications plutôt anecdotiques (*bougie, flamme de briquet*), la compréhension de la structure de ces flammes est cependant fondamentale pour la description et la modélisation de nombreuses situations industrielles. Notre attention sera focalisée principalement sur les flammes prémélangées considérées dans le présent travail.

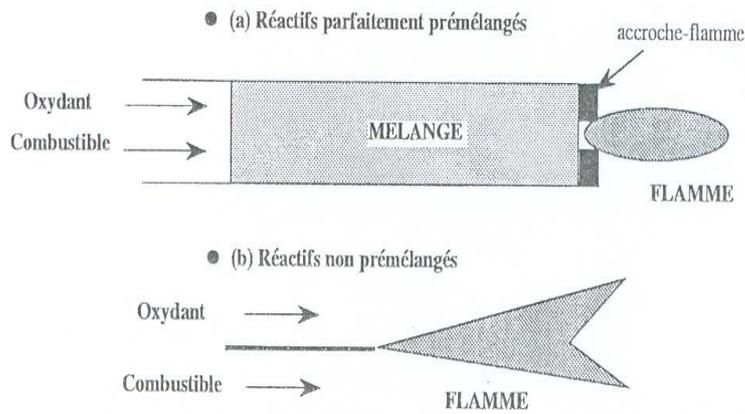


Figure (II.1) : Types de flamme : (a) prémélangée, (b) non prémélangée

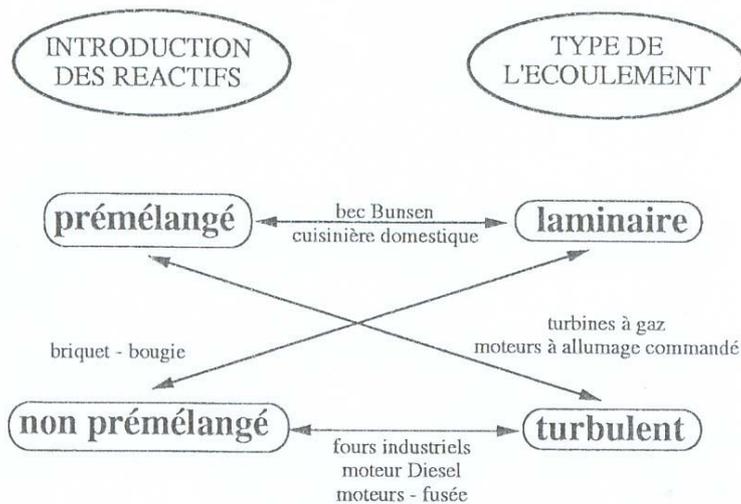


Figure (II.2) : Différents régimes de flammes et applications.

II.3 Quelques caractéristiques des flammes laminaires prémélangées

La structure d'une flamme laminaire de prémélange est présentée sur la figure (II.3). Gaz frais (*mélange combustible/comburant*) et gaz brûlés (produits de combustion) sont séparés par une mince zone de réaction d'épaisseur δ_l , de l'ordre de quelques dixièmes du millimètre à un millimètre. Un fort gradient de température est observé (les rapports typiques entre les températures des gaz brûlés et des gaz frais sont de 5 à 7). La principale caractéristique d'une flamme prémélangée est sa capacité à se propager vers les gaz frais. En raison du flux thermique associé au gradient de température, les gaz frais sont préchauffés et commencent à brûler. La vitesse S_L de propagation d'une flamme laminaire dépend de différents paramètres (*nature des réactifs, richesse du mélange, température des gaz frais*) et est de l'ordre de 0.1 à 1m/s. Signalons une relation intéressante reliant l'épaisseur thermique δ_l , la vitesse de propagation S_L de la flamme et la viscosité cinématique ν des gaz frais :

$$\text{Re}_f = \frac{\delta_l S_L}{\nu} \approx 4$$

Le nombre de Reynolds de la flamme, Re_f , est donc une constante. Cette relation montrée en particulier par la théorie de *Zel'dovich et Frank-Kamenetskii*, voir par exemple *Liñán (1974), Warnatz (1984), Liñán et Rodriguez (1986), Williams (1985)*, ou *Kuo(1986)*, est souvent implicitement utilisée lors de l'établissement de modèles de combustion turbulente prémélangée.

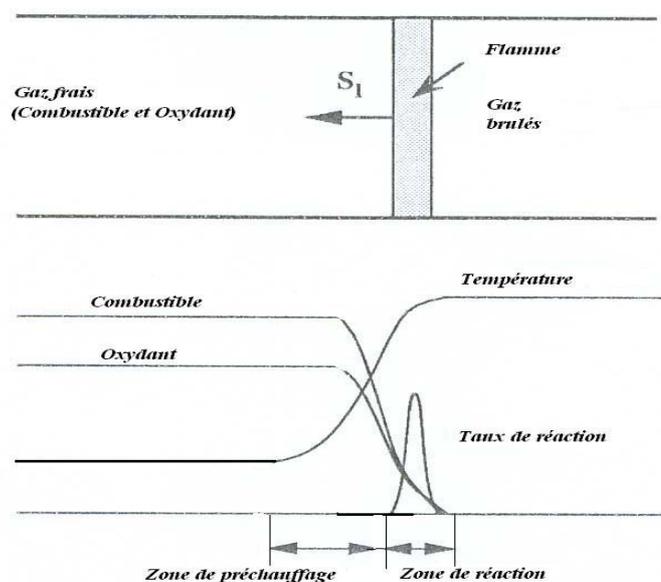


Figure (II.3) : Structure d'une flamme laminaire prémélangée

II.4 Influence de la turbulence sur la combustion-observations

II.4.1 Flamme turbulente prémélangée monodimensionnelle

La configuration étudiée est schématisée sur la figure (II.4). Il s'agit d'une flamme plane, en moyenne, d'épaisseur δ_T se propageant à la vitesse S_T dans un écoulement turbulent. En général, on constate que $S_T \gg S_L$ et $\delta_T \gg \delta_L$ où δ_L , S_L sont respectivement l'épaisseur et la vitesse de la flamme prémélangée laminaire de même caractéristiques chimiques (*combustible, richesse*). De plus, les mesures de la vitesse de flamme turbulente S_T conduisent à la relation empirique, *Abdel-Gayed et al. (1984)*, *Abdel-Gayed et Bradley (1989)*:

$$\frac{S_T}{S_L} = 1 + \alpha \left(\frac{u'}{S_L} \right)^n \quad (\text{II.1})$$

où α et n sont deux constantes de l'ordre de l'unité et u' désigne la fluctuation efficace de vitesse (que l'on peut relier à la racine carrée de l'énergie cinétique turbulente k).

Cette expression est très approximative car la vitesse de flamme turbulente S_T n'est pas une grandeur intrinsèque bien définie et dépend de l'expérience réalisée. Néanmoins, elle permet de constater que la vitesse S_T et par conséquent le taux de réaction global de la flamme sont très sensibles à l'intensité de la turbulence. Pour des intensités de turbulence u' élevées (et en supposant $n=1$), la vitesse de flamme turbulente devient quasiment indépendante de la vitesse de flamme laminaire S_L . Le rôle de la turbulence est, à priori, double :

- Augmentation de la surface de flamme, plissée par la turbulence.
- Augmentation des échanges via l'augmentation de la diffusivité turbulente ν_t .

Damköhler (1940) attribue l'augmentation de la vitesse de flamme turbulente S_T à l'augmentation des plissements de la surface et propose de relier les vitesses de flamme aux surfaces laminaire A_L et turbulente A_T par :

$$\frac{S_T}{S_L} = \frac{A_T}{A_L}, \text{ le rapport } \frac{A_T}{A_L} \text{ décrit en fait le plissement de la flamme turbulente et peut être}$$

estimé comme étant de l'ordre de l'échelle de la turbulence l_t , elle-même proportionnelle à la viscosité turbulente ν_T et donc au nombre de Reynolds turbulent R_{et} défini par :

$$R_{et} = \frac{u' l_t}{\nu} = \frac{\nu_t}{\nu}$$

$$\text{D'où : } \frac{S_T}{S_L} \propto R_{et}$$

Néanmoins, cette théorie, qui corrobore l'expression (II.1), n'est pas valable pour les trop grands nombres de Reynolds. Lorsque la turbulence est trop intense, le front de flamme peut être déchiré et d'autres phénomènes interviennent.

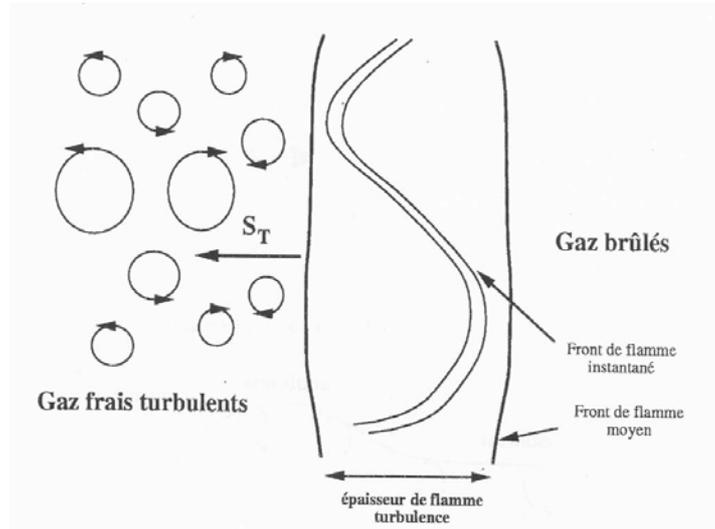


Figure (II.4) : Flamme plane turbulente prémélangée.

II.5 Analyse physique – Diagramme de combustion turbulente

III.5.1 Introduction

Les scientifiques dans le domaine de la combustion, ont cherché toujours à examiner qualitativement les phénomènes intervenant lors de la combustion turbulente pour dégager de nouvelles voies de modélisation. Cela permet d'éviter donc la complexité de l'approche mathématique basée sur le développement de l'expression d'Arrhenius, fortement non linéaire, pour les taux de réactions. Ceux-ci seront présentés ultérieurement dans ce chapitre où seront discutées les tendances actuelles en matière de modélisation de la combustion turbulente et plus particulièrement celle prémélangée.

Cette approche physique est basée principalement sur la comparaison des échelles caractéristiques, temporelles et spatiales, des deux phénomènes principaux : le mélange turbulent et la réaction chimique. Avant de parler de combustion turbulente, il importe d'assurer que l'écoulement est effectivement turbulent en comparant l'intensité de l'agitation turbulente à celle des forces visqueuses avec le nombre de Reynolds turbulent R_{et} défini plus haut.

Le nombre de Damköhler compare le temps caractéristique de la turbulence τ_t et celui de la réaction chimique τ_c :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c}$$

Dans la limite des grands nombres de Damköhler ($Da \gg 1$), le temps chimique est très petit par rapport au temps turbulent. Cela correspond à une très mince zone de réaction déformée par l'écoulement.

La structure interne de la zone de réaction n'est pas perturbée par la turbulence et peut être décrite comme celle d'un écoulement de flamme laminaire, appelé « *flammelette* ». A l'opposé, un très bas nombre de Damköhler ($Da \ll 1$) correspond à une réaction chimique très lente. Réactifs et produits sont mélangés par la turbulence avant de réagir. Dans cette limite du *réacteur parfaitement prémélangé* (ou *well-stirred reactor*), le taux de réaction moyen peut être calculé à partir des valeurs moyennes des fractions massiques et de la température, **Pope (1990)**.

La plupart des applications pratiques correspondent à des valeurs moyennes ou élevées du nombre de Damköhler. Mais il ne faut pas oublier que des temps caractéristiques chimiques très différents peuvent se rencontrer au sein d'une même flamme. Ainsi l'oxydation du combustible a, en général, lieu avec des réactions chimiques rapides ($Da \gg 1$) tandis que la formation, ou la destruction, des espèces polluantes (*oxydation de CO en CO₂, formation des oxydes d'azote NO_x*) est sensiblement plus lente ($Da \approx 1$). Le domaine des faibles nombres de Damköhler relève plutôt du génie chimique, mais il existe quelques réactions très lentes (*oxydation du silane, H₄Si, décomposition en phase vapeur ou CVD utilisée dans l'industrie des semi-conducteurs*) décrites comme des réaction de combustion.

Deux autres cas limites sont, en outre, identifiés, selon que les réactifs arrivent prémélangés ou non dans la zone de réaction.

II.5.2 Diagramme de combustion prémélangée

Il s'agit ici de tenter une classification des flammes de combustion turbulente prémélangée en se basant sur la comparaison des échelles caractéristiques, spatiales et temporelles de la turbulence et de la chimie. Ce type de classification, conduisant aux diagrammes de combustion, c'est-à-dire à une représentation graphique des différents régimes de combustion en fonction des nombres caractéristiques, a été proposé par différents auteurs : **Bray(1980), Borghi(1985, 1995), Borghi et Destriau(1995), Williams(1985), Peters (1986, 1997)** et vise à aider au choix d'un modèle de combustion turbulente en fonction des régimes

considérés. Nous retiendrons ici une présentation qui combine les analyses récentes de **Borghi et Destriau (1995)** et **Peters (1997)**.

Pour les flammes turbulentes prémélangées, le temps caractéristique de la réaction chimique peut être estimé comme le rapport de l'épaisseur δ_L et de la vitesse S_L de flamme laminaire.

Si le temps turbulent τ_t est basé sur l'échelle intégrale de la turbulence ($\tau_t = \frac{l_t}{u'}$), le nombre de Damköhler devient :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t}{\delta_L} \frac{S_L}{u'}$$

Où un rapport de vitesses ($\frac{u'}{S_L}$) et un rapport d'échelles spatiales ($\frac{l_t}{\delta_L}$) sont mis en évidence.

Nous avons déjà signalé que, pour les grandes valeurs du nombre de Damköhler ($Da \gg 1$), le front de flamme est mince et sa structure interne n'est pas affectée par la turbulence qui se contente de le plisser. Ce régime de « *flammelettes* » ou flammes minces plissées (*thin wrinkled flame regime*, voir figure (II.5.a)) subsistera tant que les plus petites échelles de la turbulence, c'est-à-dire l'échelle de Kolmogorov, auront un temps caractéristique τ_k supérieur à τ_c (les structures turbulentes sont alors trop lentes pour affecter le front). Cette transition est caractérisée par le nombre de Karlovitz K_a :

$$K_a = \frac{\tau_c}{\tau_k} = \frac{\delta_L}{l_k} \frac{u_k}{S_L}$$

La taille l_k et la vitesse u_k des tourbillons de Kolmogorov sont données par les relations :

$$l_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{4}}, \quad u_k = (\nu\varepsilon)^{\frac{1}{4}}$$

où ε est le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente. L'échelle intégrale l_t peut aussi s'écrire :

$$l_t = \frac{u'^3}{\varepsilon},$$

il vient :

$$Ka = \left(\frac{u'}{S_L}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{l_t}{\delta_L}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

Où la relation : $\nu = \delta_L S_L$, correspondant à un nombre de Reynolds de flamme unitaire, a été utilisée.

Les nombres de Reynolds R_{et} , de Damköhler Da et de Karlovitz Ka sont reliés par la relation :

$$R_{et} = Da^2 Ka^2$$

Il est facile de montrer que le nombre de Karlovitz compare les échelles spatiales de la flamme et de Kolmogorov :

$$Ka = \left(\frac{\delta_L}{l_k}\right)^2$$

Le nombre de Karlovitz est utilisé comme critère, connu sous le nom de *critère de Klimov-Williams* ($Ka = 1$) pour séparer deux régimes de combustion. Initialement, ce critère était interprété comme séparant le régime des flammelettes ($Ka < 1$), décrit précédemment, de celui de combustion distribuée où la structure de flamme est complètement modifiée par la turbulence au point qu'aucun élément de flamme de type laminaire ne puisse être identifié.

Peters (1997) a récemment affiné cette analyse. Si pour les nombres de *Karlovitz* supérieurs à l'unité ($Ka > 1$), les structures turbulentes sont capables d'affecter la flamme, elles ne sont pas forcément en mesure de perturber la zone de réaction proprement dite. Cette zone de réaction, où se produit le dégagement de chaleur, peut être caractérisée par une épaisseur δ_r sensiblement plus petite que l'épaisseur thermique de flamme δ_L ($\delta_r \approx 0.1 \delta_L$). Le nombre de *Karlovitz* Ka_r , basé sur cette épaisseur de réaction vaut donc :

$$Ka_r = \left(\frac{\delta_r}{l_k}\right)^2 \approx 100 \left(\frac{\delta_L}{l_k}\right)^2 \approx 100 Ka$$

Cela a conduit *Peters* à proposer la classification suivante des régimes de combustion turbulente prémélangée :

- ($Ka < 1$) : **Régime de «flammelette» ou de flamme mince plissée** (voir figure.II.5.a).

On peut éventuellement distinguer deux sous régimes, selon que le rapport $\frac{u'}{S_L}$ est, ou non, inférieur à l'unité :

$\frac{u'}{S_L} < 1$: *Flamme plissée*. u' qui peut être interprétée comme la vitesse de rotation des plus

grosses structures, ne peut plisser le front suffisamment pour provoquer des interactions entre flammes. La propagation laminaire de la flamme prédomine et l'interaction avec la turbulence reste faible, permettant les analyses asymptotiques dans le cas des fortes énergies d'activation.

$\frac{u'}{S_L} \gtrsim 1$: Flamme plissée avec poches (corrugated flames). Cette fois, les plus gros tourbillons sont alors suffisamment énergétiques pour plisser substantiellement la flamme au point de provoquer des interactions de fronts voisins.

- $Ka = 1$: C'est le critère de **Klimov-Williams** qui correspond à une épaisseur de flamme égale à l'échelle de **Kolmogorov**.
- $1 < Ka < 100$: **Régime de flammes « plissées-épaissies »** (*wrinkled-thickened flame regime*). Dans cette situation, les structures turbulentes sont capables de pénétrer dans la zone de préchauffage et de l'épaissir mais ne peuvent affecter la zone de réaction, qui reste mince et proche de celle d'une flamme laminaire (figure II.5.b).
- $Ka \gtrsim 100$: **Régime de « flamme épaissie »** (*thickened flame regime*) ou de réacteur homogène (*well-stirred reactor*). Cette fois, zones de préchauffage et de réaction sont perturbées par la turbulence et aucune structure de flamme laminaire ne peut être identifiée (figure II.5.c).

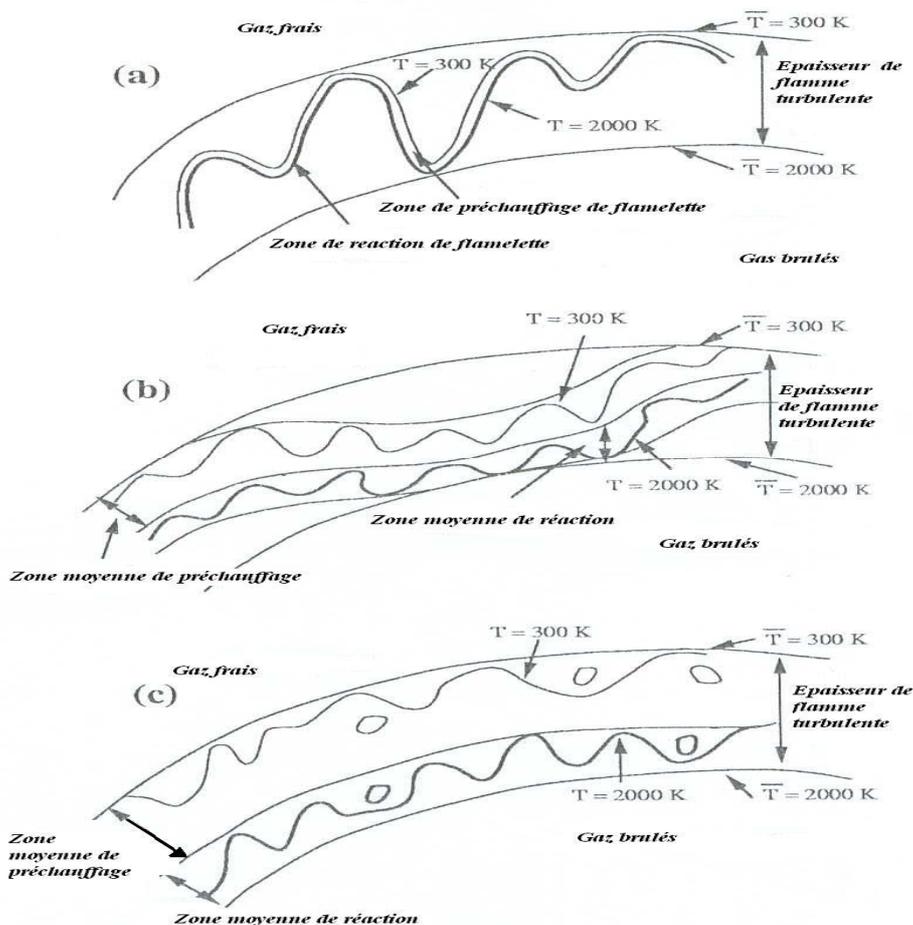


Figure (II.5) : Régimes de combustion turbulente prémélangée: (a) flamme mince plissée (flammelette), (b) flamme plissée-épaissie, (c) flamme épaissie.

Ces différents régimes de combustion sont traditionnellement représentés sur un diagramme logarithmique en fonction des rapports de longueurs ($\frac{l_t}{\delta_L}$) et de vitesses ($\frac{u'}{S_L}$) comme celui de la figure (II.6).

L'analyse présentée ici permet de classer sommairement les régimes de combustion turbulente prémélangée en fonction de différents nombres caractéristiques, afin d'aider au choix et à la conception d'un modèle. Au vu de ce diagramme, la plupart des systèmes pratiques utilisant la combustion turbulente prémélangée relèvent du domaine de flammelettes ou des flammes minces-épaissies. Néanmoins, il ne faut pas oublier que cette analyse repose sur des considérations intuitives et qualitatives et ne peut fournir que des ordres de grandeur. En aucun cas, ce diagramme ne doit être considéré très précis pour déterminer le fonctionnement d'un foyer.

Sur la lumière de ces remarques et dans une précédente version de son diagramme, **Peters (1986)** avait introduit une échelle supplémentaire, l'échelle de Gibson l_G , sensée définir la taille du tourbillon le plus petit susceptible d'interagir avec le front de flamme (et définie comme la taille du tourbillon dont la vitesse est égale à la vitesse de flamme laminaire S_L). **Peters (1997)** rejette aujourd'hui cette notion que la décomposition de la flamme en deux zones de préchauffage et de réaction a rendu obsolète.

Poinsot et al. (1991) ont repris ce type de classification à partir de simulations numériques directes de l'interaction flamme/tourbillon. Sans entrer dans les détails de cette analyse, notons que ces résultats montrent que l'hypothèse de « *flammelettes* », zone de réaction mince continue, est valable dans un domaine beaucoup plus large que ne le laisse supposer le critère de *Klimov-Williams* qui s'avère trop restrictif (voir figure II.6). En effet, les tourbillons de Kolmogorov se révèlent, à cause des effets visqueux et de leur petite taille, incapable d'affecter de manière appréciable le front de flamme. **Roberts et al. (1993)** ont confirmé expérimentalement ces résultats. Remarquons d'ailleurs que le critère de *Peters* ($Ka = 100$) correspond relativement bien à la limite définie par **Poinsot et al. (1991)**, au moins tant que le rapport $\frac{l_t}{\delta_L}$ n'est pas trop petit.

Enfin, toutes ces analyses reposent implicitement sur l'étude d'une réaction simple, à une étape. La réalité fait intervenir un nombre élevé d'espèces et de réactions chimiques (quelques centaines d'espèces et milliers de réactions pour la combustion du propane dans

l'air) qui peuvent avoir des temps caractéristiques extrêmement différents. Ainsi le temps caractéristique de l'oxydation du propane est très petit devant celui de la turbulence, alors que la réaction de formation du dioxyde du carbone CO_2 à partir du CO et du radical OH , qui a lieu dans les gaz brûlés, est sensiblement plus lente, avec des temps comparables aux temps turbulents.

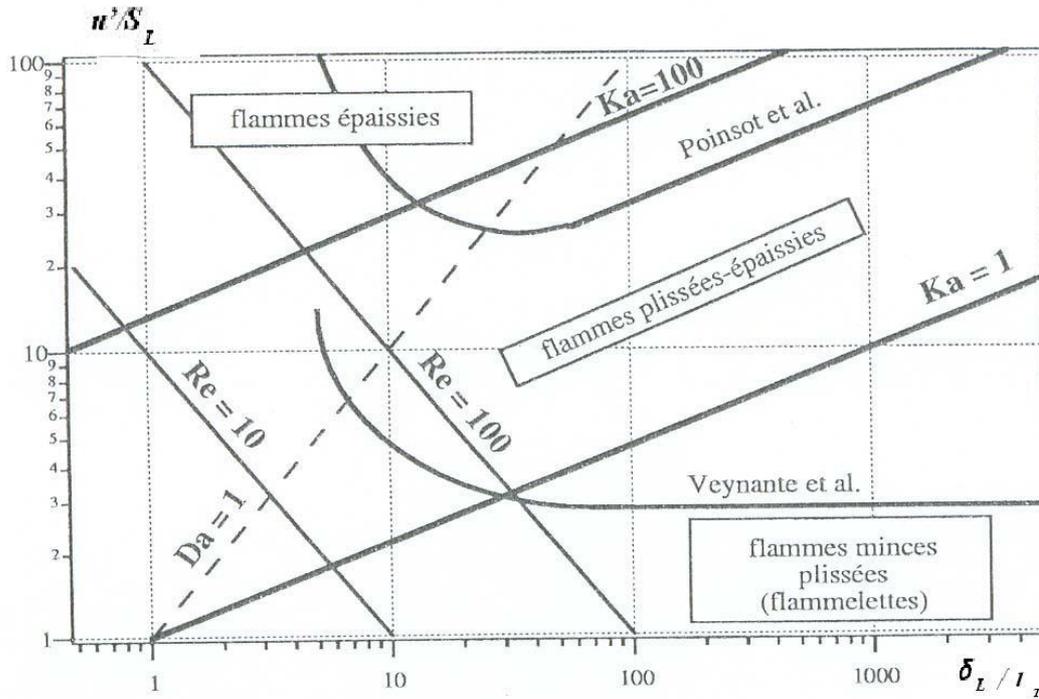


Figure (II.6) : Diagramme de combustion turbulente prémélangée (Peters 1997).

Chapitre III.

Le Code de Calcul KivaII et Formulation Mathématique

III.1 Présentation générale du code KivaII

III.2 Equations de l'aérothermochimie turbulente

III.2.1 Equations de l'aérodynamique

III.2.1.1 Equation de continuité pour l'espèce m

III.2.1.2 Equation de continuité pour le mélange

III.2.1.3 Equation de conservation de quantité de mouvement

III.2.1.4 Equation de conservation de l'énergie

III.2.1.5 Equation de transport de l'énergie cinétique turbulente

III.2.1.6 Equation de transport du taux de dissipation de l'énergie

cinétique turbulente

III.2.2 Equations d'état

III.2.3 Réactions chimiques

III.2.3.1 Les réactions d'équilibre

III.2.3.2 Les réactions cinétiques

Chapitre.III

Le Code de Calcul KIVAII et Formulation Mathématique

III.1 Présentation générale du code KIVA II

Le programme KIVA II (1989) a été développé aux laboratoires de *Los Alamos* (USA) et est présenté comme le successeur et remplaçant de *Kiva I (1985)* qui est lui même une version modifiée de *Conchas-Spray (1982)*. La philosophie générale et la structure sont restées les mêmes pour l'élaboration des différentes versions. C'est un code de calcul qui permet la simulation des écoulements réactifs turbulents, multidimensionnels et instationnaires. Il est particulièrement destiné à la simulation de la combustion dans les moteurs. Cependant, sa structure reste générale et peut être utilisée pour d'autres applications sans de lourdes modifications.

Les différentes équations ont, comme dans le code *Kiva I*, été discrétisées suivant un schéma aux différences finies utilisées sous forme intégrale (*forme conservative*) ce qui permet de raisonner essentiellement sur le volume des mailles et de transformer toutes les intégrales volumiques des termes en divergence en intégrales surfaciques. Le maillage utilisé, dit **ALE** (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*) permet une représentation plus aisée de frontières courbées et mobiles. Cela est particulièrement important dans l'optique d'une application à la combustion dans les moteurs à piston où des parois sont susceptibles de bouger (piston, soupapes).

Le code Kiva II peut traiter un nombre arbitraire d'espèces et de réactions chimiques. Ces dernières sont décrites sous forme d'équilibres chimiques lorsqu'on les considère comme rapides vis-à-vis du pas de temps de calcul ou sous forme d'équations cinétiques lorsqu'elles sont considérées comme lentes.

Les conditions aux limites aux parois sont modélisées sous forme de lois de paroi dont la fonction est de reproduire au mieux la couche limite turbulente et son action sur les transferts thermiques aux parois. Ce code s'applique à un domaine tridimensionnel de section circulaire ou carrée, avec une restriction possible à un domaine bidimensionnel. Une autre possibilité, particulièrement adaptée au moteur Diesel à injection directe multi-jets, permet une représentation sous la forme de secteurs cylindriques aux conditions limites périodiques.

Temporellement, Kiva II utilise une méthode dite *Sous-cycle* qui permet d'effectuer le calcul de manière explicite dans la phase eulérienne et implicite dans la phase lagrangienne. Le

pas de temps est choisi d'une manière systématique par le code sur le critère de précision et non pas de stabilité, ce pas de temps est choisi comme étant le minimum de différents temps qui caractérisent des phénomènes tels que la diffusion, la convection, la chimie...etc. Le modèle de turbulence utilisé est le modèle $k - \varepsilon$ standard.

III.2 Equations de l'aérothermochimie turbulente

Les équations mathématiques qui régissent l'aérothermochimie du mélange de gaz dans la flamme, traduisent les bilans de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Il est à noter que le lecteur peut se référer au manuel du code pour une présentation relativement détaillée de la plupart des relations utilisées le long des chapitres III et IV.

III.2.1 Equations de l'aérodynamique

III.2.1.1 Equation de continuité pour l'espèce m

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \underbrace{\text{div}(\rho_m \vec{u})}_{\text{transport convectif}} = \underbrace{\text{div} \left[\rho D \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \right]}_{\text{transport diffusif}} + \dot{\rho}_m^c \quad (\text{III.1})$$

Où

ρ_m est la masse volumique de l'espèce m .

ρ est la masse volumique du mélange.

\vec{u} est la vitesse du mélange.

D est la diffusivité massique de l'espèce dans le reste du mélange (*loi de Fick*).

$\dot{\rho}_m^c$ regroupe les termes sources d'origine chimique.

III.2.1.2 Equation de continuité pour le mélange

L'équation de continuité pour le mélange est déduite en sommant l'équation (III.1) sur toutes les espèces et en tenant compte du fait que la masse est conservé au cours des réactions chimiques.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u}) = 0 \quad (\text{III.2})$$

IV.2.1.3 Equation de conservation de quantité de mouvement

$$\frac{\partial(\rho\bar{u})}{\partial t} + \underbrace{\text{div}(\rho\bar{u}\bar{u})}_{\text{transport convectif}} = - \underbrace{\frac{1}{a^2}\nabla p}_{\text{forces dues au pression}} - \underbrace{\nabla\left(\frac{2}{3}\rho k\right)}_{\text{forces g n r es par la turbulence}} + \underbrace{\text{div}\sigma}_{\text{forces de viscosit }} + \rho\bar{g} \quad (\text{III.3})$$

Avec

$$\sigma = \mu[\nabla\bar{u} + (\nabla\bar{u})^T] + \lambda\text{div}\bar{u}Id_3 \quad (\text{III.4})$$

O  :

p est la pression du m lange.

a est une quantit  sans dimension utilis e conjointement avec la m thode PGS (*Pressure Gradient Scaling*). Cette derni re permet d'am liorer la pr cision du calcul dans le cas des  coulements   faible nombre de Mach.

k est l' nergie cin tique turbulente.

σ est le tenseur newtonien des contraintes visqueuses.

λ, μ sont les coefficients de viscosit .

Id_3 repr sente la matrice identit .

\bar{g} est l'acc l ration due   la gravit .

III.2.1.4 Equation de conservation de l' nergie

$$\frac{\partial(\rho I)}{\partial t} + \underbrace{\text{div}(\rho\bar{u}I)}_{\text{transport convectif}} = - \underbrace{p\text{div}\bar{u}}_{\text{effet de la pression}} + \underbrace{\rho\varepsilon}_{\text{dissipation visqueuse}} - \underbrace{\text{div}\bar{J}}_{\text{transport diffusif}} + \dot{Q}^c \quad (\text{III.5})$$

Avec

$$\bar{J} = -K\nabla T - \rho D \sum_m h_m \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \quad (\text{III.6})$$

O  :

I est l' nergie interne sp cifique du m lange.

\bar{J} est le vecteur densit  de flux de chaleur d    la conduction et   la diffusion d'enthalpie (*effet de Duffour*).

ε est le taux de dissipation de l' nergie cin tique turbulente.

T est la temp rature du m lange.

K est la conductivit  du m lange.

h_m est l'enthalpie sp cifique de l'esp ce m .

\dot{Q}^c représente l'énergie produite ou consommée par les réactions chimiques.

III.2.1.5 Equation de transport de l'énergie cinétique turbulente

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \underbrace{\text{div}(\rho \bar{u} k)}_{\text{transport convectif}} = \underbrace{-\frac{2}{3} \rho k \text{div} \bar{u}}_{\text{terme source dû à la compressibilité}} + \underbrace{\sigma : \nabla \bar{u}}_{\text{taux de production}} + \underbrace{\text{div}\left(\frac{\mu}{Pr_k} \nabla k\right)}_{\text{transport diffusif}} - \underbrace{\rho \varepsilon}_{\text{taux de destruction}} \quad (\text{III.7})$$

Pr_k : est le nombre de Prandtl associé à l'énergie cinétique turbulente k .

III.2.1.6 Equation de transport du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \underbrace{\text{div}(\rho \bar{u} \varepsilon)}_{\text{transport convectif}} = & \underbrace{-\left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3}\right) \rho \varepsilon \text{div} \bar{u}}_{\text{terme source dû à la compressibilité}} + \underbrace{\text{div}\left(\frac{\mu}{Pr_\varepsilon} \nabla \varepsilon\right)}_{\text{transport diffusif}} \\ & + \underbrace{\frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} \sigma : \nabla \bar{u} - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon)}_{\text{terme source}} \end{aligned} \quad (\text{III.8})$$

Pr_ε : est le nombre de Prandtl associé au taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ε .

$C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, C_{\varepsilon 3}, Pr_k, Pr_\varepsilon$: sont les constantes usuelles du modèle de turbulence $k - \varepsilon$ standard,

données comme suit :

$$\begin{aligned} C_{\varepsilon 1} &= 1.44 & Pr_k &= 1.0 \\ C_{\varepsilon 2} &= 1.92 & Pr_\varepsilon &= 1.3 \\ C_{\varepsilon 3} &= -1.0 & C_s &= 1.5 \end{aligned}$$

Les coefficients de transport sont donnés par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu = \mu_{air} + \rho C_{\mu} \frac{k^2}{\varepsilon} \\ \lambda = A_3 \mu \\ K = \frac{\mu C_p}{Pr} \\ D = \frac{\mu}{\rho Sc} \end{array} \right. \quad (III.10)$$

Avec :

C_{μ} est une constante empirique qui a une valeur standard égale à 0.09.

μ_{air} est donnée par la formule de Sutherland :

$$\mu_{air} = \frac{A_1 T^{3/2}}{T + A_2} \quad (III.11)$$

Où A_1 et A_2 sont des constantes valant respectivement 1.457×10^{-5} et 110, **Yang (2000)**

et la constante A_3 est prise égale à (-2/3).

Les nombres de Prandtl et Schmidt (Pr et Sc) sont des constantes données.

III.2.2 Equations d'état

On suppose que le fluide est un mélange homogène de gaz parfaits. Ainsi, on peut écrire les relations suivantes :

$$p = R_0 T \sum_m \frac{\rho_m}{W_m} \quad (III.12)$$

$$I = I(T) = \sum_m \frac{\rho_m}{\rho} I_m(T) \quad (III.13)$$

$$C_p = C_p(T) = \sum_m \frac{\rho_m}{\rho} C_{p_m}(T) \quad (III.14)$$

$$h_m = h_m(T) = I_m(T) + R_0 \frac{T}{W_m} \quad (III.15)$$

Où

R_0 est la constante universelle des gaz parfaits.

W_m est la masse molaire de l'espèce m .

I_m est l'énergie interne de l'espèce m .

C_p est la chaleur spécifique du mélange à pression constante.

C_{pm} est la chaleur spécifique de l'espèce m à pression constante.

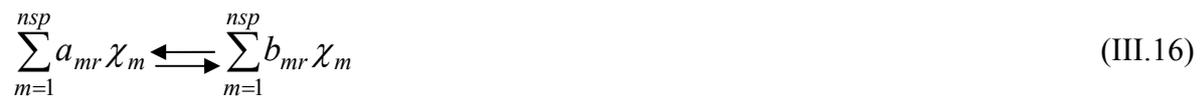
III.2.3 Réactions chimiques

Le code *Kiva II* est doté de traitements permettant des réactions chimiques entre les divers constituants du mélange gazeux. On peut donc simuler la combustion, ainsi que les divers processus chimiques dans la mesure des possibilités offertes. Pour cela, l'utilisateur dispose d'une palette de constituants chimiques, de tableaux permettant de définir les réactions chimiques (coefficients stœchiométriques, cinétiques, constantes d'équilibre) et d'un choix de modèles à activer.

La palette des constituants chimiques disponibles dans le code est représentée par le tableau III.1.

On choisit un hydrocarbure (et un seul) parmi les 12 disponibles, et d'autres constituants nécessaires parmi ceux proposés (tableau *idsp* du fichier de données). L'ordre de déclaration des constituants est indifférent, sauf pour l'hydrocarbure qui est obligatoirement le premier.

Les réactions chimiques ayant lieu au cœur de l'écoulement sont symbolisées par les relations :



Où :

χ_m représente une mole de l'espèce m .

a_{mr}, b_{mr} représentent les coefficients stœchiométriques de la réaction n° r .

nsp représente le nombre total de constituants dans le mélange gazeux.

<i>Hydrocarbures</i>		<i>Autres constituants</i>	
CH ₄	<i>méthane</i>	O ₂	<i>oxygène</i>
C ₃ H ₈	<i>propane</i>	N ₂	<i>azote</i>
C ₇ H ₁₆	<i>heptane</i>	CO ₂	<i>dioxyde de carbone.</i>
C ₈ H ₁₈	<i>iso-octane</i>	H ₂ O	<i>eau</i>
C ₁₂ H ₂₆	<i>dodécane</i>	CO	<i>monoxyde de carbone</i>
C ₁₃ H ₂₈	<i>tridécane</i>	H ₂	<i>hydrogène</i>
C ₁₄ H ₃₀	<i>tétradécane</i>	NO	<i>monoxyde d'azote</i>
C ₁₆ H ₃₄	<i>hexadécane</i>	H	<i>radical libre d'hydrogène</i>
C ₂ H ₂	<i>acetylene</i>	O	<i>radical libre d'oxygène</i>
C ₂ H ₄	<i>éthylène</i>	N	<i>radical libre d'azote</i>
C ₆ H ₆	<i>benzène</i>	OH	<i>radical libre</i>
Df2	<i>diesel 2</i>	R	<i>radical libre d'hydrocarbure</i>

Tableau III.1 : Constituants chimiques disponibles dans le code KIVA II

Les coefficients stœchiométriques doivent respecter la condition de conservation de la masse :

$$\sum_{m=1}^{nsp} (a_{mr} - b_{mr}) W_m = 0 \quad (\text{III.17})$$

On distingue dans *Kiva II* deux types de réactions chimiques: les réactions dites « *d'équilibre* » et les réactions dites « *cinétiques* ».

III.2.3.1 Les réactions d'équilibre

Pour ce type de réactions, on suppose que l'équilibre est atteint instantanément, sans tenir compte d'une cinétique. Dans ce cas, les masses volumiques de chaque constituant obéissent à la loi d'action de masse :

$$\prod_{m=1}^{nsp} \left(\frac{\rho_m}{W_m} \right)^{b_{mr} - a_{mr}} = K_r(T) \quad (\text{III.18})$$

Où $K_r(T)$ est la constante d'équilibre de la réaction n°r, supposée ne dépendre que de la température :

$$K_r = \exp\left(A_r \ln T_A + \frac{B_r}{T_A} + C_r + D_r T_A + E_r T_A^2\right) \quad (\text{III.19})$$

Avec A_r, B_r, C_r et D_r sont des constantes, et $T_A = T/1000$.

III.2.3.2 Les réactions cinétiques

Pour ce type de réactions, on prend en compte la cinétique de la réaction vers l'équilibre par un taux de réaction $\dot{\omega}_r$ qui est donné par la loi d'Arrhénius (*cinétique chimique pure*)

- Selon la loi d'Arrhénius, $\dot{\omega}_r$ est de la forme :

$$\dot{\omega}_r = k_{fr} \prod_{m=1}^{nsp} \left(\frac{\rho_m}{W_m}\right)^{a'_{mr}} - k_{br} \prod_{m=1}^{nsp} \left(\frac{\rho_m}{W_m}\right)^{b'_{mr}} \quad (\text{III.20})$$

Avec

$$k_{fr} = A_{fr} T^{\xi_{fr}} \exp(-E_{fr}/T) \quad (\text{III.21})$$

$$k_{br} = A_{br} T^{\xi_{br}} \exp(-E_{br}/T) \quad (\text{III.22})$$

Où E_{fr}, E_{br} sont les températures d'activation.

Dans l'équation (III.20), les exposants a'_{mr} et b'_{mr} (*ordres partiels de la réaction*) ne sont pas forcément égaux aux coefficients stœchiométriques, de façon à pouvoir prendre en compte des ordres de réactions empiriques.

En pratique, pour appliquer ce modèle de cinétique chimique, la procédure générale à suivre est la suivante :

- Déclarer $modmh=0$.
- Définir les réactions cinétiques par leurs coefficients stœchiométriques.
- Définir les ordres partiels des réactions cinétiques.
- Définir les constantes de la loi d'Arrhénius.
- Ajuster la température de coupure $tcut$ en dessous de laquelle aucune cinétique chimique n'est calculée.

Pour appliquer ce modèle de combustion, la méthode est la suivante :

Les termes sources d'origine chimique des équations (III.1) et (III.5) sont exprimés par :

$$\dot{\rho}_m^c = W_m \sum_r (b_{mr} - a_{mr}) \dot{\omega}_r \quad (\text{III.23})$$

$$\dot{Q}^c = \sum_r Q_r \dot{\omega}_r \quad (\text{III.24})$$

Où Q_r est la chaleur de la réaction n° r . Celle-ci s'exprime par :

$$Q_r = \sum_{m=1}^{nsp} (a_{mr} - b_{mr}) (\Delta h_f^0)_m \quad (\text{III.25})$$

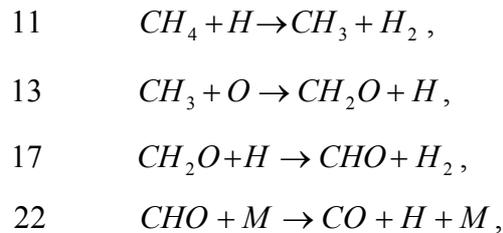
$(\Delta h_f^0)_m$ étant l'enthalpie de formation de l'espèce m au zéro absolu.

Dans la version KivaII modifiée à une configuration du type brûleur bunsen, une chimie détaillée réduite à un mécanisme réactionnel à deux étapes de *Peters et Williams (1987)* a été adoptée pour en fait décrire le mécanisme réactionnel du méthane, *Warnatz (1984)*, *Dixon-Lewis et al (1985)*, *Liñán et Rodriguez (1986)*.

L'ensemble des réactions élémentaires qui décrivent le mécanisme réactionnel détaillé de l'oxydation du méthane est présenté dans ce qui suit :

- 1 $O_2 + H \rightarrow OH + O$
- 1b $OH + O \rightarrow O_2 + H$
- 2 $O + H_2 \rightarrow H + OH$
- 2b $H + OH \rightarrow O + H_2$
- 3 $OH + H_2 \rightarrow H + H_2O$
- 3b $H + H_2O \rightarrow OH + H_2$
- 4 $OH + OH \rightarrow H_2O + O$
- 4b $H_2O + O \rightarrow OH + OH$
- 5 $H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$
- 6 $HO_2 + H \rightarrow OH + OH$
- 7 $HO_2 + H \rightarrow H_2 + O_2$
- 8 $HO_2 + H \rightarrow H_2O + O$
- 9 $HO_2 + OH \rightarrow H_2O + O_2$
- 10 $CO + OH \rightarrow CO_2 + H$
- 10b $CO_2 + H \rightarrow CO + OH$
- 11 $CH_4 + H \rightarrow H_2 + CH_3$
- 11b $H_2 + CH_3 \rightarrow CH_4 + H$
- 12 $CH_4 + OH \rightarrow H_2O + CH_3$
- 13 $CH_3 + O \rightarrow CH_2O + H$
- 14 $CH_3 + OH \rightarrow CH_2O + H + H$
- 15 $CH_3 + OH \rightarrow CH_2O + H_2$
- 16 $CH_3 + H \rightarrow CH_4$
- 17 $CH_2O + H \rightarrow CHO + H_2$
- 18 $CH_2O + OH \rightarrow CHO + H_2O$
- 19 $CHO + H \rightarrow CO + H_2$
- 20 $CHO + OH \rightarrow CO + H_2O$
- 21 $CHO + O_2 \rightarrow CO + HO_2$
- 22 $CHO + M \rightarrow CO + H + M$
- 23 $CH_3 + H \rightarrow CH_2 + H_2$
- 24 $CH_2 + O_2 \rightarrow CO_2 + H + H$
- 25 $CH_2 + O_2 \rightarrow CO + OH + H$
- 26 $CH_2 + H \rightarrow CH + H_2$
- 27 $CH + O_2 \rightarrow CHO + O$
- 28 $CH_3 + OH \rightarrow CH_2 + H_2O$
- 29 $CH_2 + OH \rightarrow CH_2O + H$
- 30 $CH_2 + OH \rightarrow CH + H_2O$
- 31 $CH + OH \rightarrow CHO + H$

Peters et Williams et par un ensemble adéquat de réactions 1-22 du mécanisme réactionnel précédant. L'hypothèse de l'état quasi-stationnaire pour les espèces : $O, OH, HO_2, CH_3, CH_2O, CHO$ a été introduite et pour une commodité de calcul algébrique, un postulat additionnel d'équilibre partiel pour les réactions 2,3 a été considéré. Un mécanisme réactionnel à 4 étapes de la combustion du méthane qui a été analysé précédemment, **Peters (1985)** peut être obtenu. Ce mécanisme simplifié est présenté comme suit :



Le taux de réaction pour chacune des réactions chimiques du schéma à 4 étapes, peut être écrit en fonction des constantes des taux de réaction k_i de quelques réactions élémentaires cinétiques et des constantes d'équilibre de quelques réactions d'équilibre :

$$\begin{aligned}
 w_I &= k_{11} [CH_4] [H], \\
 w_{II} &= \frac{k_{10} [H]}{K_3 [H_2]} ([CO][H_2O] - [CO_2][H_2] / K_{II}), \\
 w_{III} &= k_5 [O_2] [H] [M] = k_{III} p [O_2] [H], \\
 w_{IV} &= k_1 [H] \left([O_2] - \frac{[H]^2 [H_2O]^2}{[H_2]^3 K_{IV}} \right),
 \end{aligned} \tag{III.26}$$

Où les résultats suivant de l'hypothèse de l'équilibre partiel on été introduits :

$$\begin{aligned}
 [OH] &= [H][H_2O] / ([H_2] K_3), \\
 [O] &= [H][OH] / ([H_2] K_2),
 \end{aligned} \tag{III.27}$$

Les constantes d'équilibre sont données par :

$$\begin{aligned}
 K_2 &= 2.23 \exp(-1112/T), \quad K_3 = 0.216 \exp(7658/T), \\
 K_{II} &= 0.035 \exp(6652/T), \quad K_{IV} = 1.48 \exp(6133/T).
 \end{aligned} \tag{III.28}$$

La température T est exprimée en Kelvin.

De ce mécanisme réactionnel à 4 étapes, et à des pressions relativement élevées (typiquement supérieures à 1 atm), la dépendance en pression de la réaction III cause une réduction de la concentration de l'atome H est telle que son bilan quasi-stationnaire mène à la relation suivante entre ces taux de réaction:

$$w_{IV} = w_I + w_{III} \tag{III.29}$$

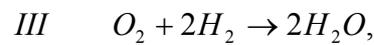
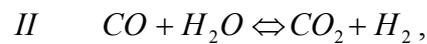
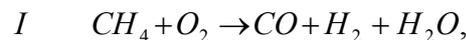
Des équations (III.26) et (III.29), l'expression :

$$[H] = F^{\frac{1}{2}} K^{\frac{1}{2}} [O_2]^{\frac{1}{2}} [H_2]^{\frac{3}{2}} / [H_2O] \quad (\text{III.30})$$

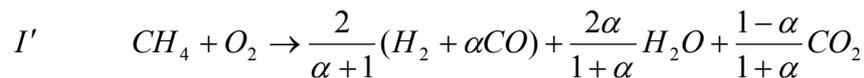
est obtenue, où :

$$F = 1 - \frac{k_{III} P}{k_1} - \frac{k_{11} [CH_4]}{k_1 [O_2]} \quad (\text{III.31})$$

Comme conséquence, de cette approximation additionnelle de l'état quasi-stationnaire de l'atome H, le mécanisme réactionnel à quatre étapes, se réduit à un mécanisme à trois étapes :



Une chimie réduite à 2 étapes peut être déduite du mécanisme réactionnel à 3 étapes, sous la forme :



Où : α est telle que: $x_{CO} = \alpha x_{H_2}$ (III.32)

$$x_i = \frac{X_i}{L_i} \quad (\text{III.33})$$

Ici X_i : représente la fraction molaire de l'espèce divisée par la fraction molaire initiale de la même espèce et L_i sont les nombres de Lewis définis, pour chaque espèce i , comme :

$$L_i = \frac{\lambda}{(\rho c_p D_i)}.$$

α Peut être pris comme une fonction de température seulement, mais une meilleure compréhension de la structure de la flamme, peut laisser prétendre que α est constant.

Les taux de réaction de ces deux réactions restent égaux à ceux des réactions (I) et (III) dans le mécanisme à trois étapes, *Peters and Williams (1987)*, et ils sont donnés par *Borghi et Champion (2000)*:

$$W_{I'} = k_{11}(T)[CH_4]K^{\frac{1}{2}}(T)\frac{[O_2]^{\frac{1}{2}}[H_2]^{\frac{3}{2}}}{[H_2O]}\left[1 - \frac{k_{11}(T)[CH_4]}{k_1(T)[O_2]}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$W_{III'} = k_5(T)[O_2][M]K_{IV}(T)^{\frac{1}{2}}\frac{[O_2]^{\frac{1}{2}}[H_2]^{\frac{3}{2}}}{[H_2O]}\left(1 - \frac{k_5(T)[M]}{k_1(T)}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Dans ce mécanisme cinétique à deux étapes, la somme $(H_2 + \alpha CO)$ joue clairement le rôle des espèces intermédiaires ; si la combinaison entière, du côté droit de I'' , est écrite :

$3X$ (Puisque elle englobe 3 molécules), alors le mécanisme est écrit sous la forme : $CH_4 + O_2 \rightarrow 3X$, $3X + O_2 \rightarrow 2H_2O + CO_2$. La première étape est bi moléculaire et la deuxième est ter moléculaire.

La structure de base de la flamme de prémélange méthane-air est schématisée sur la figure (III.2), *Peters et Williams (1987)*, elle se compose d'une zone de préchauffage chimiquement inerte, suivie par une autre zone mince où s'effectuent la totalité de la réaction de la consommation du combustible.

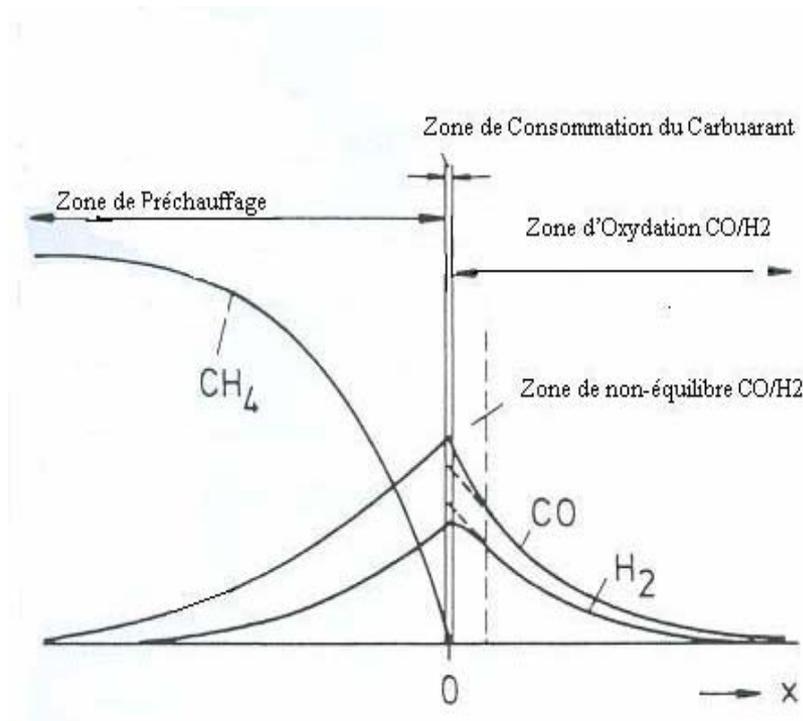


Figure (III.2) : Illustration schématique de la structure d'une flamme de prémélange méthane-air.

Donc toute la chimie de l'hydrocarbure voit le jour, en aval de cette zone. Il y a une autre zone périphérique qui reste dans la plupart du temps mince où la réaction d'oxydation de CO, H_2 s'effectue, qui est divisée en deux parties, une en amont où la réaction : $CO + H_2O \Leftrightarrow CO_2 + H_2$ se trouve en déséquilibre chimique et l'autre en aval, où la réaction précédente, finit son équilibre.

Chapitre IV.

Méthode Numérique de Résolution

IV.1 Introduction

IV.2 Méthode de résolution (A.L.E)

IV.2.1 La phase lagrangienne

IV.2.2 Phase de rezonning (Phase C)

IV.3 Maillage et topologie dans de calcul dans KIVAI

IV.3.1 Cellule de base

IV.3.2 Cellule auxiliaire

IV.3.3 Autres cellules auxiliaires

IV.4 Description de la phase lagrangienne (phase A et B)

IV.4.1 Phase A (explicite)

IV.4.2 Phase B (implicite)

IV.4.3 Algorithme SIMPLE

IV.5 Phase C (explicite)

IV.5.1 Calcul des variables positionnées aux centres des cellules de base

IV.5.2 Calcul des variables positionnées aux sommets des cellules de base

IV.6 Traitement de la convection

IV.6.1 Schémas « Partiel Donor Cell »

IV.6.1.1 Schéma centré

IV.6.1.2 Schéma donneur pur

IV.6.1.3 Autres schémas

IV.6.2 Schémas « Q.S.O.U »

IV.7 Conditions aux limites

IV.8 Organigramme du code de calcul KIVAI

Chapitre.IV

Méthode Numérique de Résolution

IV.1 Introduction

Les équations présentées dans le chapitre précédent traduisant l'écoulement monophasique sont des équations différentielles non ordinaires et non linéaires que nous ne savons pas résoudre de façon analytique pour des écoulements complexes. On a alors recours aux méthodes numériques.

IV.2 Méthode de résolution (ALE)

Comme dans la version originale de la méthode (ALE), un cycle de calcul KIVA est effectué en deux étapes : une phase lagrangienne et une phase de rezonning (ou *phase eulérienne*).

IV.2.1 Phase lagrangienne

Pendant la phase lagrangienne, les nœuds du maillage se déplacent à la même vitesse que le fluide. Il n'y a donc aucune convection au travers des frontières des cellules du maillage. Ainsi, pendant cette première phase aucun des termes convectifs des équations de l'aérodynamique n'est pris en compte.

Dans le code KIVA II, l'étape lagrangienne est elle-même scindée en deux phases. La première, dite phase A, prend en compte de façon totalement explicite une partie des termes sources. La seconde, dite phase B, tient compte de façon plus ou moins implicite du transport diffusif des termes sources restants.

IV.2.2 Phase de rezonning

Pendant la phase de rezonning, l'écoulement est « *gelé* » et les nœuds du maillage sont ramenés aux nouvelles positions prescrites par l'utilisateur (les anciennes positions si le domaine de calcul n'a pas changé ou de nouvelles positions si le maillage a suivi le déplacement de certaines parois). Ce remaillage est réalisé en transportant par convection les différentes quantités au travers des frontières des volumes de contrôle lorsque ceux-ci sont déplacés vers leurs nouvelles positions.

Les schémas numériques employés pour la phase de rezonning sont de nature explicite (paragraphe IV.6). Ces schémas se traduisent donc par des contraintes de stabilité de type CFL « *Courant-Friedrichs-Lewy* » sur le pas de temps de calcul. Pour ne pas avoir à modifier le pas de temps utilisé pour la phase lagrangienne, la phase C est réalisée en plusieurs sous- cycles avec un pas temps sous-multiple du pas de temps de la phase lagrangienne et vérifiant les contraintes CFL.

IV.3 Maillage et topologie

Les discrétisations spatiales des différentes équations résolues dans KIVA II sont construites par l'application de la méthode des volumes finis. Pour ce faire, le domaine de calcul est découpé en un certain nombre de cellules hexaédriques. L'ensemble de ces cellules constitue le maillage qui est supposé structuré. Toute cellule du maillage peut donc être repérée par la donnée des trois entiers (i,j,k) .

Les quantités thermodynamiques, ainsi que les variables k et ε sont positionnées aux centres des cellules.

$$Q_{ijk} = Q(x_{ijk}^c, y_{ijk}^c, z_{ijk}^c) \quad (IV.1)$$

Où

$$Q = p, \rho, T, I, \rho_m, k, \varepsilon$$

$x_{ijk}^c, y_{ijk}^c, z_{ijk}^c$ sont les coordonnées du centre de la cellule (i,j,k) .

Les vitesses quant à elles sont localisées aux sommets des cellules :

$$\bar{u}_{ijk} = \bar{u}(x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk}) \quad (IV.2)$$

Où $x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk}$ sont les coordonnées du sommet n°4 de la cellule (i,j,k) (figure IV.1).

Toutes les informations pratiques (calcul des volumes des cellules, des vecteurs surfaces, estimation des flux,...etc.) nécessaires à l'application de la méthode des volumes finis sont proposées maintenant dans les paragraphes suivants.

IV.3.1 Cellule de base

La figure (IV.1) représente une cellule de base du maillage. La numérotation des sommets étant celle réellement utilisée dans le code.

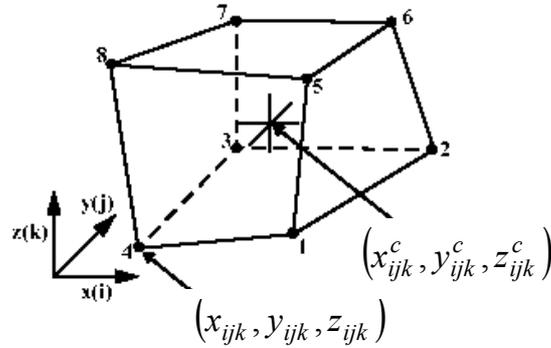


Figure IV.1 : Cellule de base du maillage

Le centre de la cellule (i,j,k) est le point de coordonnées $x_{ijk}^c, y_{ijk}^c, z_{ijk}^c$:

$$\begin{cases} x_{ijk}^c = \frac{1}{8} \sum_{v=1}^{v=8} x_v \\ y_{ijk}^c = \frac{1}{8} \sum_{v=1}^{v=8} y_v \\ z_{ijk}^c = \frac{1}{8} \sum_{v=1}^{v=8} z_v \end{cases} \quad (\text{IV.3})$$

Où (x_v, y_v, z_v) désignant les coordonnées du sommets n° v de la cellule (i,j,k) .

Le volume de la cellule (i,j,k) est obtenu à l'aide de la formule:

$$V_{ijk} = \frac{1}{12} \sum_{v=1}^{v=8} x_v \cdot C_v \quad (\text{IV.4})$$

Où

$$C_1 = -(y_2 z_3 + y_2 z_4 - y_2 z_5 - y_2 z_6 - y_3 z_2 + y_3 z_4 - y_4 z_2 - y_4 z_3 + y_4 z_5 + y_4 z_8 + y_5 z_2 - y_5 z_4 + y_5 z_6 - y_5 z_8 + y_6 z_2 - y_6 z_5 - y_8 z_4 + y_8 z_5)$$

$$C_2 = (y_1z_3 + y_1z_4 - y_1z_5 - y_1z_6 - y_3z_1 - y_3z_4 + y_3z_6 + y_3z_7 - y_4z_1 + y_4z_3 + y_5z_1 - y_5z_6 + y_6z_1 - y_6z_3 + y_6z_5 - y_6z_7 - y_7z_3 + y_7z_6)$$

$$C_3 = -(y_1z_2 - y_1z_4 - y_2z_1 - y_2z_4 + y_2z_6 + y_2z_7 + y_4z_1 + y_4z_2 - y_4z_7 - y_4z_8 - y_6z_2 + y_6z_7 - y_7z_2 + y_7z_4 - y_7z_6 + y_7z_8 + y_8z_4 - y_8z_7)$$

$$C_4 = -(y_1z_2 + y_1z_3 - y_1z_5 - y_1z_8 - y_2z_1 + y_2z_3 - y_3z_1 - y_3z_2 + y_3z_7 + y_3z_8 + y_5z_1 - y_5z_8 - y_7z_3 + y_7z_8 + y_8z_1 - y_8z_3 + y_8z_5 - y_8z_7)$$

$$C_5 = (y_1z_2 - y_1z_4 + y_1z_6 - y_1z_8 - y_2z_1 + y_2z_6 + y_4z_1 - y_4z_8 - y_6z_1 - y_6z_2 + y_6z_7 + y_6z_6 - y_7z_6 + y_7z_8 + y_8z_1 + y_8z_4 - y_8z_6 - y_8z_7)$$

$$C_6 = (y_1z_2 - y_1z_5 - y_2z_1 + y_2z_3 - y_2z_5 + y_2z_7 - y_3z_2 + y_3z_7 + y_5z_1 + y_5z_2 - y_5z_7 - y_5z_8 - y_7z_2 - y_7z_3 + y_7z_5 + y_7z_8 + y_8z_5 - y_8z_7)$$

$$C_7 = (y_2z_3 - y_2z_6 - y_3z_2 + y_3z_4 - y_3z_6 + y_3z_8 - y_4z_3 + y_4z_8 + y_5z_6 - y_5z_8 + y_6z_2 + y_6z_3 - y_6z_5 - y_6z_8 - y_8z_3 - y_8z_4 + y_8z_5 + y_8z_6)$$

$$C_8 = -(y_1z_4 - y_1z_5 - y_3z_4 + y_3z_7 - y_4z_1 + y_4z_3 - y_4z_5 + y_4z_7 + y_5z_1 + y_5z_4 - y_5z_6 - y_5z_7 + y_6z_5 - y_6z_7 - y_7z_3 - y_7z_4 + y_7z_5 + y_7z_6)$$

Pour l'application de la méthode des volumes finis, il est également nécessaire de connaître les projections suivant x , y et z des aires des facettes de chaque cellule. Celles-ci intervenant dans le calcul des flux. Puisqu'une facette est commune à deux cellules adjacentes, il est par exemple suffisant de considérer les facettes « **LEFT** », « **FRONT** » et « **BOTTOM** ». Les vecteurs surfaces sont conventionnellement dirigés vers l'extérieur de la cellule, voir figure (IV.2).

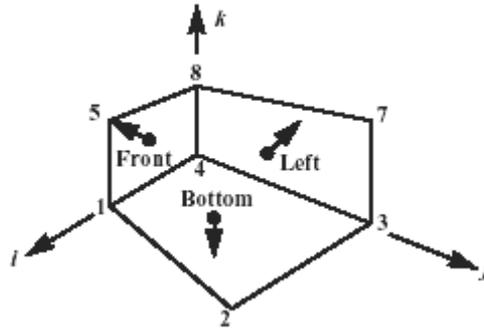


Figure IV.2 : Les faces de la cellule (i,j,k) .

Le vecteur surface \vec{A}_l de la facette *LEFT* s'obtient à l'aide de la formule:

$$\vec{A}_l = \left\{ \begin{array}{l} A_{lx} = 0.5[(z_4 - z_7)(y_3 - y_8) - (z_3 - z_8)(y_4 - y_7)] \\ A_{ly} = 0.5[(x_4 - x_7)(z_3 - z_8) - (x_3 - x_8)(z_4 - z_7)] \\ A_{lz} = 0.5[(y_4 - y_7)(x_3 - x_8) - (y_3 - y_8)(x_4 - x_7)] \end{array} \right\} \quad (\text{IV.5})$$

Le vecteur \vec{A}_f de la facette *FRONT* se calcule par:

$$\vec{A}_f = \left\{ \begin{array}{l} A_{fx} = 0.5[(z_5 - z_4)(y_1 - y_8) - (z_1 - z_8)(y_5 - y_4)] \\ A_{fy} = 0.5[(x_5 - x_4)(z_1 - z_8) - (x_1 - x_8)(z_5 - z_4)] \\ A_{fz} = 0.5[(y_5 - y_4)(x_1 - x_8) - (y_1 - y_8)(x_5 - x_4)] \end{array} \right\} \quad (\text{IV.6})$$

Et le vecteur \vec{A}_b de la facette *BOTTOM* par:

$$\vec{A}_b = \left\{ \begin{array}{l} A_{bx} = 0.5[(z_4 - z_2)(y_1 - y_3) - (z_1 - z_3)(y_4 - y_2)] \\ A_{by} = 0.5[(x_4 - x_2)(z_1 - z_3) - (x_1 - x_3)(z_4 - z_2)] \\ A_{bz} = 0.5[(y_4 - y_2)(x_1 - x_3) - (y_1 - y_3)(x_4 - x_2)] \end{array} \right\} \quad (\text{IV.7})$$

D'une manière générale, on notera \vec{A}_a le vecteur surface de la face a , où :

$$a = \begin{cases} l & (\text{LEFT}) \\ r & (\text{RIGHT}) \\ f & (\text{FRONT}) \\ d & (\text{DERRIERE}) \\ b & (\text{BOTTOM}) \\ t & (\text{TOP}) \end{cases} \quad (\text{IV.8})$$

Le calcul des flux diffusifs d'une variable centrée Q nécessite l'estimation de la quantité $(\nabla Q)_a \cdot \vec{A}_a$ sur n'importe quelle facette a . Pour cela, on fait intervenir les quatre points $\vec{x}_t, \vec{x}_b, \vec{x}_d, \vec{x}_f$, milieux des arêtes de la facette a et les deux points \vec{x}_l, \vec{x}_r , centres des deux cellules adjacentes à la facette a (voir figure IV.3).

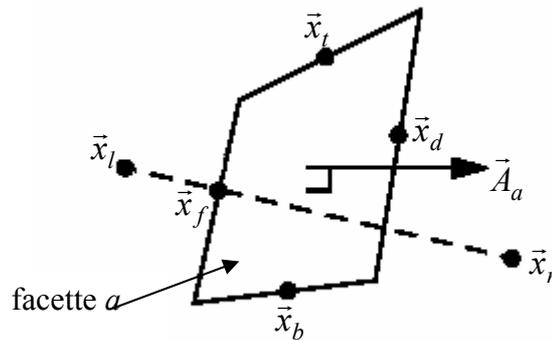


Figure IV.3 : Les six points utilisés pour le calcul du gradient d'une variable centrée

On cherche alors les coefficients a_{lr}, a_{tb} et a_{fd} vérifiant la relation:

$$a_{lr}(\vec{x}_l - \vec{x}_r) + a_{tb}(\vec{x}_t - \vec{x}_b) + a_{fd}(\vec{x}_f - \vec{x}_d) = \vec{A}_a \quad (\text{IV.9})$$

Les coefficients a_{tb} et a_{fd} dans l'équation (IV.9) étant nuls si le vecteur $(\vec{x}_l - \vec{x}_r)$ est parallèle au vecteur surface \vec{A}_a .

La quantité $(\nabla Q)_a \cdot \vec{A}_a$ est alors estimée par:

$$a_{lr}(Q_l - Q_r) + a_{tb}(Q_t - Q_b) + a_{fd}(Q_f - Q_d) = (\nabla Q)_a \cdot \vec{A}_a \quad (\text{IV.10})$$

Où Q_t, Q_b, Q_f et Q_d sont obtenus en faisant la moyenne des valeurs de Q dans les quatre cellules entourant respectivement les arêtes t, b, f et d de la facette a .

La masse M_{ijk} contenue dans la cellule (i, j, k) est estimée par :

$$M_{ijk} = \rho_{ijk} \cdot V_{ijk} \quad (\text{IV.11})$$

Il est également nécessaire de définir des cellules auxiliaires centrées sur les sommets du maillage. Ces cellules sont utilisées lors de la discrétisation de l'équation de conservation de la quantité de mouvement. La description de ces cellules complémentaires fait l'objet du paragraphe suivant.

IV.3.2 Cellules auxiliaires

Une cellule auxiliaire centrée sur un sommet du maillage est faite de l'assemblage de huit petits hexaèdres. Chaque hexaèdre appartenant à l'une des huit cellules de base possédant le sommet en question (figure IV.4).

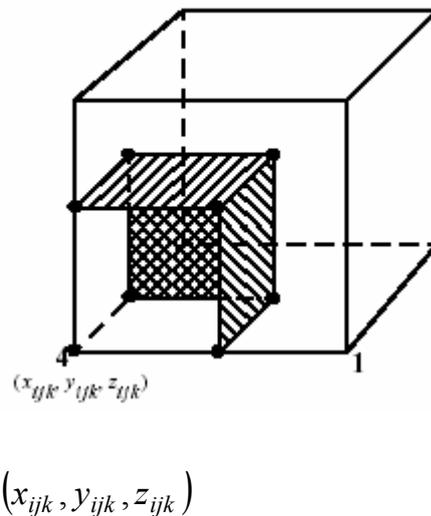


Figure IV.4 : Partie de la cellule auxiliaire centrée au nœud $(x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk})$ appartenant à la cellule (i,j,k) . Les trois facettes hachurées font partie des 24 facettes constituant la cellule auxiliaire

Chaque petit hexaèdre est construit de telle façon que :

- son volume représente $1/8$ du volume de la cellule de base à laquelle il appartient.
- les aires des trois facettes reposant sur les faces de la cellule de base représentent respectivement $1/4$ des aires de ces faces.

Il est donc facile, connaissant le volume des cellules de base, de calculer le volume des cellules auxiliaires de quantité de mouvement.

De plus, il n'est pas utile de calculer explicitement les vecteurs surfaces \vec{A}'_a des 24 facettes des cellules auxiliaires. En effet, considérons l'intégrale surfacique $\int Q d\vec{A}$ sur trois de ces facettes appartenant à un même petit hexaèdre. Notons \vec{A}'_1, \vec{A}'_2 et \vec{A}'_3 les trois vecteurs surfaces de ces facettes et \vec{A}_1, \vec{A}_2 et \vec{A}_3 , les trois autres vecteurs surfaces de la cellule de base. On a alors par construction :

$$\vec{A}'_1 + \vec{A}'_2 + \vec{A}'_3 = -\frac{1}{4}(\vec{A}_1 + \vec{A}_2 + \vec{A}_3) \quad (\text{IV.12})$$

Ainsi, l'intégrale $\int Q d\vec{A}$ sur les trois facettes en question peut être estimée par :

$$\int Q d\vec{A} = Q_{ijk}(\vec{A}'_1 + \vec{A}'_2 + \vec{A}'_3) = -\frac{1}{4}Q_{ijk}(\vec{A}_1 + \vec{A}_2 + \vec{A}_3) \quad (\text{IV.13})$$

La masse M'_{ijk} contenue dans la cellule auxiliaire de quantité de mouvement (i,j,k) est estimée par la moyenne des masses contenues dans les cellules de base adjacentes :

$$M'_{ijk} = \frac{1}{8}(M_{i,j,k} + M_{i-1,j,k} + M_{i-1,j-1,k} + M_{i,j-1,k} + M_{i,j,k-1} + M_{i-1,j,k-1} + M_{i-1,j-1,k-1} + M_{i,j-1,k-1}) \quad (\text{IV.14})$$

IV.3.3 Autres cellules auxiliaires

En plus des vitesses inconnues positionnées aux sommets des cellules de base du maillage, on introduit, au cours de la phase B, les vitesses normales des faces des cellules (vitesses définies aux centres des faces). Un volume de contrôle est alors associé à chacune de ces vitesses (figure IV.5). Celui-ci est fait de l'assemblage de huit petits hexaèdres appartenant aux deux cellules situées de part et d'autre de la face où est positionnée la vitesse inconnue en question.

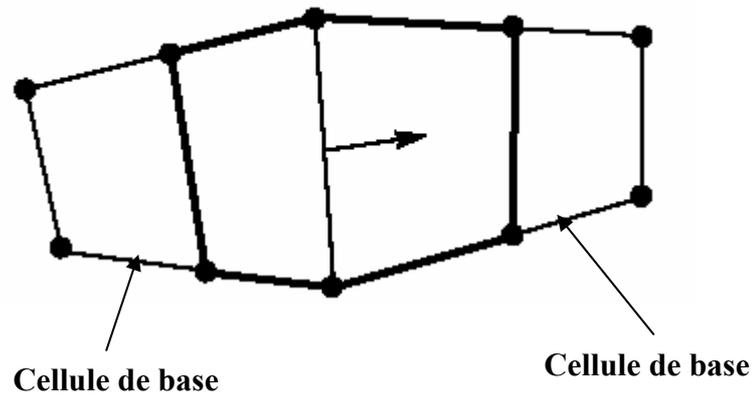


Figure IV.5 : Volume de contrôle utilisé pour le calcul des vitesses normales des faces

Ces nouvelles cellules auxiliaires sont utilisées pour le calcul de l'accélération des vitesses normales des faces dues aux termes de pression p et $2\rho k/3$. Cette topologie permet en outre de réduire de façon très significative les problèmes d'oscillation parasite sur la vitesse.

Les volumes V_{ijk}'' de ces cellules se déduisent facilement des volumes V_{ijk} des cellules de base. D'autre part, la masse contenue dans ces nouvelles cellules est estimée par la moyenne des masses des deux cellules de base adjacentes :

$$\begin{cases} M_l'' = 0.5[M_{i,j,k} + M_{i-1,j,k}] \\ M_f'' = 0.5[M_{i,j,k} + M_{i,j-1,k}] \\ M_b'' = 0.5[M_{i,j,k} + M_{i,j,k-1}] \end{cases} \quad (\text{IV.15})$$

IV.4 Description de la phase lagrangienne (phase A et B)

On décrit l'application de la phase lagrangienne aux équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie, ainsi qu'aux équations de transport de modèle de turbulence $k - \varepsilon$.

On commence par rappeler toutes ces équations dans lesquelles on a volontairement omis d'écrire les termes convectifs qui ne sont pas pris en compte au cours de la phase lagrangienne.

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} = \text{div} \left[\rho D \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \right] + \dot{\rho}_m^c \quad (\text{IV.16})$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{u})}{\partial t} = -\frac{1}{a^2} \nabla p - + \text{div} \sigma + \rho \bar{g} \quad (\text{IV.17})$$

$$\sigma = \mu \left[\nabla \bar{u} + (\nabla \bar{u})^T \right] + \lambda \text{div} \bar{u} Id_3 \quad (\text{IV.18})$$

$$\frac{\partial(\rho I)}{\partial t} = -p \text{div} \bar{u} + \rho \varepsilon - \text{div} \bar{J} + \dot{Q}^c \quad (\text{IV.19})$$

$$\bar{J} = -K \nabla T - \rho D \sum_m h_m \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \quad (\text{IV.20})$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} = -\frac{2}{3} \rho k \text{div} \bar{u} + \sigma : \nabla \bar{u} + \text{div} \left(\frac{\mu}{Pr_k} \nabla k \right) - \rho \varepsilon \quad (\text{IV.21})$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} = -\left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3} \right) \rho \varepsilon \text{div} \bar{u} + \text{div} \left(\frac{\mu}{Pr_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} \sigma : \nabla \bar{u} - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (\text{IV.22})$$

IV.4.1 Phase A (explicite)

- **Equation de conservation de la masse**

On ne tient compte que des termes sources issus des réactions chimiques. On cherche donc pour toutes les cellules (i, j, k) du maillage, la masse volumique $(\rho_m^A)_{ijk}$ solution explicite du système:

$$\frac{(\rho_m^A)_{ijk} - (\rho_m^n)_{ijk}}{\Delta t} = (\dot{\rho}_m^c)_{ijk} \quad (\text{IV.23})$$

- **Equation de conservation de la quantité de mouvement**

On ne tient compte que des termes sources de quantité de mouvement apportées par les forces gravitationnelles et du coupleur de nœuds ANC_{ijk} « **Alternate Node Coupler** ». Cette

dernière sert à amortir les vitesses transverses parasites dues à la discrétisation décalée (vitesses aux nœuds- pressions aux centres).

On cherche donc pour toutes les cellules (i,j,k) du maillage, la vitesse \vec{u}_{ijk}^A , solution explicite du système :

$$\frac{[(M')_{ijk}^A] \vec{u}_{ijk}^A - (M')_{ijk}^n \vec{u}_{ijk}^n}{\Delta t} = (M')_{ijk}^n \vec{g} - (M')_{ijk}^n \frac{ANC_{ijk}}{\Delta t} \quad (\text{IV.24})$$

On renvoie à l'annexe C de la référence [40] pour l'évaluation de ces deux quantités pour le détail du calcul du coupleur de nœuds.

- **Equation de conservation de l'énergie**

On ne tient compte que des termes sources \dot{Q}^c provenant des réactions chimiques. On cherche donc pour toutes les cellules (i,j,k) du maillage, l'énergie interne I_{ijk}^A , solution explicite du système :

$$\frac{M_{ijk}^A I_{ijk}^A - M_{ijk}^n I_{ijk}^n}{\Delta t} = V_{ijk}^n (\dot{Q}_{ijk}^c) \quad (\text{IV.25})$$

- **Equations du modèle de turbulence k-ε**

Dans la version originale du code KIVAIL, on ne tient compte que des termes sources issus de l'interaction gaz/spray. Dans le présent travail pour toutes les cellules (i,j,k) du maillage, l'énergie cinétique turbulente k_{ijk}^A et son taux de dissipation ε_{ijk}^A , sont des solutions explicites des systèmes :

$$\frac{M_{ijk}^A k_{ijk}^A - M_{ijk}^n k_{ijk}^n}{\Delta t} = 0 \quad (\text{IV.26})$$

$$\frac{M_{ijk}^A \varepsilon_{ijk}^A - M_{ijk}^n \varepsilon_{ijk}^n}{\Delta t} = 0 \quad (\text{IV.27})$$

IV.4.2 Phase B (*implicite*)

On tient compte dans cette phase de tous les termes qui n'ont pas été résolus au cours de la phase A et en particulier tous les termes diffusifs.

Les équations fournissant Y_m^B, k^B et ε^B étant faiblement couplées aux équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie, elles sont traitées à part. En effet, l'équation de conservation de la masse est résolue en premier, puis suivent les équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie. Celles-ci sont traitées de façon couplée à l'aide d'un algorithme itératif *prédicteur- correcteur* de type *SIMPLE*. On traite en dernier les équations de transport du modèle de turbulence $k-\varepsilon$.

- **Equation de conservation de la masse**

On tient compte des termes de diffusion et on cherche donc pour toutes les cellules (i,j,k) du maillage, la fraction massique $(Y_m^B)_{ijk}$, solution implicite du système :

$$M_{ijk}^B \frac{(Y_m^B)_{ijk} - (Y_m^A)_{ijk}}{\Delta t} = \sum_{\text{faces } a} (\rho D)_a^n \nabla [\phi_D Y_m^B + (1 - \phi_D) Y_m^A]_a \cdot \vec{A}_a \quad (\text{IV.28})$$

Où

$$\begin{cases} (Y_m^A)_{ijk} = (\rho_m^A)_{ijk} / (\rho^A)_{ijk} \\ (Y_m^B)_{ijk} = (\rho_m^B)_{ijk} / (\rho^B)_{ijk} \end{cases} \quad (\text{IV.29})$$

On note dans l'équation (IV.28) la présence du *paramètre d'implicitation* ϕ_D au niveau du terme diffusif. Ce paramètre, défini aux centres des cellules, varie dans le temps et dans l'espace. La valeur prise par ϕ_D dans une cellule est donnée par :

$$\phi_D = \begin{cases} 1 - \frac{1}{4FC_d} & \text{si } C_d > 1/4 \\ 0 & \text{si } C_d \leq 1/4 \end{cases} \quad (\text{IV.30})$$

Où C_d est le coefficient local de diffusion de la cellule considérée. Ce coefficient est du style :

$$C_d = \frac{\mu}{\rho} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (\text{IV.31})$$

Δx représentant la taille caractéristique de la cellule.

Lorsque le coefficient C_d est petit devant 1, ϕ_D est proche de 0 et le système (IV.28) devient quasiment explicite. En revanche, lorsque C_d est grand devant 1, ϕ_D est proche de 1 et le système (IV.28) devient fortement implicite. On note aussi que le paramètre ϕ_D tel qu'il a été défini reste toujours compris entre 0 et 1.

Le coefficient F apparaissant dans la formule (IV.30) est un facteur de sécurité réglable dans le jeu de données. Celui-ci permet de jouer sur le degré d'implicitation de la résolution des termes diffusifs apparaissant dans les divers systèmes dans le but d'en renforcer la stabilité. Sa valeur par défaut est 1.0.

- **Equation de conservation de la quantité de mouvement**

On cherche pour toutes les cellules (i,j,k) du maillage, la vitesse \vec{u}_{ijk}^B , solution implicite du système:

$$\begin{aligned} \frac{(M')_{ijk}^B \vec{u}_{ijk}^B - (M')_{ijk}^n \vec{u}_{ijk}^n}{\Delta t} = & -\frac{1}{(a^n)^2} \sum_{faces \beta} [\phi_p p^B + (1-\phi_p) p^n]_{\beta} \cdot (\vec{A}')_{\beta}^n - \sum_{faces \beta} \frac{2}{3} \rho_{\beta}^A k_{\beta}^A \cdot (\vec{A}')_{\beta}^n \\ & + \sum_{faces \beta} [\phi_D \sigma(\vec{u}^B) + (1-\phi_D) \sigma(\vec{u}^n)]_{\beta} \cdot (\vec{A}')_{\beta}^n + (M')_{ijk}^n \vec{g} - (M')_{ijk}^n \frac{ANC_{ijk}}{\Delta t} \end{aligned} \quad (IV.32)$$

Où les indices β font références aux faces des cellules auxiliaires de quantité de mouvement. Le calcul de la vitesse \vec{u}_{ijk}^B est assuré par le sous programme **VSOLVE**.

On note dans l'équation (IV.32) la présence du paramètre d'implicitation ϕ_p dans le terme de gradient de pression. Celui-ci est calculé pour chaque cellule (i,j,k) du maillage par la relation :

$$\phi_p = \begin{cases} 0 & si \quad (C_s)_{ijk}^n \leq \frac{1}{f} \\ 1 - \frac{1}{f(C_s)_{ijk}^n} & si \quad (C_s)_{ijk}^n > \frac{1}{f} \end{cases} \quad (IV.33)$$

Où

$$(C_s)_{ijk}^n = \sqrt{\frac{Y_{ijk}^n P_{ijk}^n}{(a^n)^2 \rho_{ijk}^n} \frac{\Delta t}{\Delta x}} \quad (\text{IV.34})$$

Et où f est un coefficient empirique de sécurité réglable dans le jeu de données (l'analyse sur un modèle simplifié mono- dimensionnel impose $f \geq 1$ comme condition suffisante de stabilité). Sa valeur par défaut est 2.5.

- **Calcul des vitesses normales des faces des cellules de base**

Par définition, on a :

$$(uA)_a = \vec{u}_a \cdot \vec{A}_a \quad (\text{IV.35})$$

Où \vec{u}_a est la vitesse normale de la face a .

Considérons le bilan de quantité de mouvement d'un volume de contrôle V'' qui se déplace avec le fluide :

$$\frac{D}{Dt} \int_{V''} \rho \vec{u} dV'' = \vec{F} \quad (\text{IV.36})$$

Où \vec{F} est la somme de toutes les forces appliquées sur le volume V'' .

En multipliant l'équation (IV.36) par \vec{A} , on obtient:

$$\frac{D}{Dt} \int \rho \vec{u} \cdot \vec{A} dV'' = \vec{F} \cdot \vec{A} + \frac{D\vec{A}}{Dt} \cdot \int \rho \vec{u} dV'' \quad (\text{IV.37})$$

Où le dernier terme de cette équation représente les forces de Coriolis et centrifuges dans le cas du maillage courbé.

La discrétisation de l'équation (IV.37) nous donne :

$$\begin{aligned} [(M'')_a^B] \frac{(uA)_a^B - (uA)_a^t}{\Delta t} = & - \sum_{\text{faces } \gamma} \left\{ [\phi_p p^B + (1 - \phi_p) p^n] / (a^n)^2 + \frac{2}{3} \rho^A k^A \right\} (\vec{A}'')_\gamma^n \cdot \vec{A}_a \\ & + \frac{\vec{A}_a^t - \vec{A}_a^n}{\Delta t} \cdot \frac{\vec{u}_a^n + \vec{u}_b^n + \vec{u}_c^n + \vec{u}_d^n}{4} [(M'')_a^B + S_a''] \end{aligned} \quad (\text{IV.38})$$

Où les indices γ font références aux faces du volume de contrôle entourant la face a de la cellule de base.

a, b, c et d désignent les quatre sommets de la face a .

La quantité $(uA)_a^t$ est déterminée par la relation :

$$(uA)_a^t = \frac{1}{4} (\bar{u}_a^n + \bar{u}_b^n + \bar{u}_c^n + \bar{u}_d^n) \cdot \bar{A}_a^n \quad (\text{IV.39})$$

Et la vitesse \bar{u}^t peut être obtenue par l'équation (IV.32) en considérant seulement les termes de la pression :

$$\left[(M')_{ijk}^n \right] \frac{\bar{u}_{ijk}^B - \bar{u}_{ijk}^t}{\Delta t} = - \frac{1}{(a^n)^2} \sum_{\text{faces } \beta} [\phi_p p^B + (1 - \phi_p) p^n]_{\beta} \cdot (\bar{A}')_{\beta}^n - \sum_{\text{faces } \beta} \frac{2}{3} \rho_{\beta}^A k_{\beta}^A \cdot (\bar{A}')_{\beta}^n \quad (\text{IV.40})$$

Ou bien :

$$\left[(M')_{ijk}^n + S'_{ijk} \right] \frac{\bar{u}_{ijk}^t - \bar{u}_{ijk}^A}{\Delta t} = \sum_{\text{faces } \beta} [\phi_D \sigma(\bar{u}^B) + (1 - \phi_D) \sigma(\bar{u}^n)]_{\beta} \cdot (\bar{A}')_{\beta}^n \quad (\text{IV.41})$$

Le vecteur surface \bar{A}_a^t est donné par :

$$\bar{A}_a^t = \bar{A}_a (\bar{x}^n + \bar{u}^n \Delta t) \quad (\text{IV.42})$$

- **Equation de changement de volume**

Le changement de volume de la cellule de calcul dans la phase lagrangienne est donné par la relation:

$$V_{ijk}^B = V_{ijk}^n + \Delta t \sum_{\text{faces } a} (uA)_a^B \quad (\text{IV.43})$$

- **Equation de conservation de l'énergie**

La discrétisation de l'équation d'énergie dans la phase lagrangienne nous donne :

$$\begin{aligned} \frac{M_{ijk}^B I_{ijk}^B - M_{ijk}^n I_{ijk}^n}{\Delta t} &= - \frac{p_{ijk}^n + p_{ijk}^B}{2} \frac{V_{ijk}^B - V_{ijk}^n}{\Delta t} + \sum_{\text{faces } a} K_a^n \nabla [\phi_D T^B + (1 - \phi_D) \bar{T}]_a \cdot (\bar{A}')_a^n \\ &+ \sum_{\text{faces } a} (\rho D)_a^n \left\{ \sum_m h_m (T_a^n) \mathcal{N} [\phi_D Y_m^B + (1 - \phi_D) Y_m^A]_a \right\} \cdot (\bar{A}')_a^n + M_{ijk}^B \varepsilon_{ijk}^A + V_{ijk}^n (\dot{Q}_{ijk}^c) \end{aligned} \quad (\text{IV.44})$$

- **Détermination de \tilde{T}**

a)- On détermine l'énergie interne (I^t) due à la diffusion d'enthalpie et à la dissipation turbulente :

$$M_{ijk}^B \frac{I_{ijk}^t - I_{ijk}^A}{\Delta t} = M_{ijk}^B \varepsilon_{ijk}^B + \sum_{faces a} (\rho D)_a^n \left\{ \sum_m h_m(T_a^n) \nabla [\phi_D Y_m^B + (1 - \phi_D) Y_m^A] \right\} \cdot (\vec{A})_a^n \quad (IV.45)$$

b)- A pression constante, on peut écrire :

$$\Delta h = (C_p)_{ijk}^n (\tilde{T}_{ijk} - T_{ijk}^n) \quad (IV.46)$$

Où

$$\Delta h = h_{ijk}^t - h_{ijk}^n \quad (IV.47)$$

c)- Par définition, on a :

$$h_{ijk}^n = I_{ijk}^n + \frac{p_{ijk}^n}{\rho_{ijk}^n} \quad (IV.48)$$

d)- En faisant la combinaison des équations (IV.47)- (IV.49), on obtient :

$$\tilde{T}_{ijk} = T_{ijk}^n + \frac{1}{(C_p)_{ijk}^n} \left[I_{ijk}^t - I_{ijk}^n + p_{ijk}^n \left(\frac{1}{\rho_{ijk}^A} - \frac{1}{\rho_{ijk}^n} \right) \right] \quad (IV.49)$$

Le calcul de \tilde{T} est assuré par le sous-programme **EXDIF**.

La forme finale de l'équation d'énergie utilisée dans la phase B est obtenue en utilisant les équations (IV.25),(IV.46) et (IV.50) :

$$M_{ijk}^B \frac{I_{ijk}^B - I_{ijk}^t}{\Delta t} = -\frac{p_{ijk}^n + p_{ijk}^B}{2} \frac{V_{ijk}^B - V_{ijk}^n}{\Delta t} + \sum_{faces a} K_a^n \nabla [\phi_D T^B + (1 - \phi_D) \tilde{T}] \cdot (\vec{A})_a^n \quad (IV.50)$$

- **Equations du modèle de turbulence $k-\varepsilon$:**

On cherche pour chaque cellule (i,j,k) du maillage, l'énergie cinétique turbulente k_{ijk}^B et son taux de dissipation ε_{ijk}^B , solutions implicites des systèmes :

$$\begin{aligned}
\frac{M_{ijk}^B k_{ijk}^B - M_{ijk}^A k_{ijk}^A}{\Delta t} &= -\frac{2}{3} \rho_{ijk}^B \frac{V_{ijk}^B - V_{ijk}^n}{\Delta t} \left[(1 - f_{ijk}) k_{ijk}^n + f_{ijk} k_{ijk}^B \right] \\
&+ V_{ijk}^n \left[\phi_D \sigma(\bar{u}^B) : \nabla \bar{u}^B + (1 - \phi_D) \sigma(\bar{u}^n) : \nabla \bar{u}^n \right]_{ijk} \\
&+ \sum_{faces a} \frac{\mu_a^n}{Pr_k} \nabla \left[\phi_D k^B + (1 - \phi_D) k^A \right]_a \cdot \bar{A}_a - M_{ijk}^B \frac{\varepsilon_{ijk}^n}{k_{ijk}^n} k_{ijk}^B
\end{aligned} \tag{IV.51}$$

et :

$$\begin{aligned}
\frac{M_{ijk}^B \varepsilon_{ijk}^B - M_{ijk}^A \varepsilon_{ijk}^A}{\Delta t} &= -\left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3} \right) \rho_{ijk}^B \frac{V_{ijk}^B - V_{ijk}^n}{\Delta t} \left[(1 - f_{ijk}) \varepsilon_{ijk}^n + f_{ijk} \varepsilon_{ijk}^B \right] \\
&+ \sum_{faces a} \frac{\mu_a^n}{Pr_\varepsilon} \nabla \left[\phi_D \varepsilon^B + (1 - \phi_D) \varepsilon^A \right]_a \cdot \bar{A}_a \\
&+ C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon_{ijk}^n}{k_{ijk}^n} V_{ijk}^n \left[\phi_D \sigma(\bar{u}^B) : \nabla \bar{u}^B + (1 - \phi_D) \sigma(\bar{u}^n) : \nabla \bar{u}^n \right]_{ijk} \\
&- C_{\varepsilon 2} M_{ijk}^B \frac{\varepsilon_{ijk}^n}{k_{ijk}^n} \varepsilon_{ijk}^B
\end{aligned} \tag{IV.52}$$

où le paramètre f_{ijk} est donné par :

$$f_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{si } V_{ijk}^B - V_{ijk}^n > 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{IV.53}$$

Il permet d'éviter l'apparition de valeurs négatives pour k et ε lors de fortes variations de volume au cours de la phase lagrangienne.

• Equations d'état

Les équations d'état (III.12) et (III.13) sont approximées par les relations suivantes :

$$P_{ijk}^B = \frac{M_{ijk}^B}{V_{ijk}^B} R_0 \left[\sum_m (Y_m)_{ijk}^B / W_m \right] T_{ijk}^B \tag{IV.54}$$

$$I_{ijk}^B = I_{ijk}^t + (C_v)_{ijk}^t \left[T_{ijk}^B - T_{ijk}^t \right] \tag{IV.55}$$

Où :

I_{ijk}^t est déterminée par l'équation (IV.45).

T_{ijk}^t et $(C_v)_{ijk}^t$ doivent satisfaire les relations suivantes :

$$I_{ijk}^t = \sum_m (Y_m)_{ijk}^B I_m(T_{ijk}^t) \quad (IV.56)$$

$$(C_v)_{ijk}^t = \sum_m (Y_m)_{ijk}^B C_{vm}(T_{ijk}^t) \quad (IV.57)$$

IV.4.3 Algorithme *SIMPLE*

Un algorithme itératif de type *SIMPLE* est utilisé pour la résolution du système couplé associant vitesse, pression et température dans les équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie.

- **Phase d'initialisation**

On commence par prédire la pression p_{ijk}^p dans chaque cellule (i,j,k) à l'aide d'une extrapolation linéaire utilisant les pressions $(p_{ijk}^B)^{n-1}$ et $(p_{ijk}^B)^{n-2}$ des deux pas de temps précédents :

$$p_{ijk}^p = (p_{ijk}^B)^{n-1} + \frac{\Delta t^n}{\Delta t^{n-1}} \left[(p_{ijk}^B)^{n-1} - (p_{ijk}^B)^{n-2} \right] \quad (IV.58)$$

Le calcul de p_{ijk}^p est assuré par le sous-programme *PINIT*.

- **Phase itérative**

1) La pression p_{ijk}^p est fixée et on calcule la vitesse \vec{u}_{ijk}^p à l'aide de l'équation (IV.32). Le calcul de la vitesse \vec{u}_{ijk}^p est assuré par le sous programme *VSOLVE*.

2) On calcule la température T_{ijk}^p qui peut être obtenue en faisant la combinaison des équations (IV.51), (IV.55) et (IV.56). Celle-ci est déterminée dans le sous-programme *TSOLVE*.

$$T_{ijk}^p = \left\{ T_{ijk}^t + \frac{p_{ijk}^n + p_{ijk}^p}{2(C_v)_{ijk}^t} \frac{V^n}{M_{ijk}^B} + \frac{\Delta t}{M_{ijk}^B (C_v)_{ijk}^t} \left[\sum_{\text{faces } a} K_a^n \nabla [\phi_D T^B + (1 - \phi_D) \tilde{T}]_a \cdot (\vec{A})_a^n \right] \right\} \quad (\text{IV.59})$$

$$/ \left\{ 1.0 + \frac{p_{ijk}^n + p_{ijk}^p}{2(C_v)_{ijk}^t p_{ijk}^p} R_0 \left[\sum_m (Y_m)_{ijk}^B / W_m \right] \right\}$$

3) On calcule les volumes V_{ijk}^p des cellules à l'aide de l'équation :

$$V_{ijk}^p = \frac{M_{ijk}^B}{p_{ijk}^p} R_0 \left[\sum_m (Y_m)_{ijk}^B / W_m \right] T_{ijk}^p \quad (\text{IV.60})$$

4) On calcule une pression corrigée p_{ijk}^{cor} , tenant compte des nouvelles valeurs \vec{u}_{ijk}^p , T_{ijk}^p et V_{ijk}^p .

Le calcul de p_{ijk}^{cor} est assuré par le sous programme **PSOLVE**.

5) On revient à l'étape 1 tant que la pression n'a pas convergé.

Les résolutions des systèmes implicites rencontrés tout au long de la phase B sont effectuées à l'aide d'une méthode itérative du type « *résidus conjugués* », **Yang (2000)**.

IV.5 Phase C (*explicite*)

On tient compte dans cette phase de tous les termes convectifs qui n'ont pas été résolus au cours de la phase lagrangienne.

IV.5.1 Calcul des variables positionnées au centre des cellules de base

Le transport convectif des variables positionnées aux centres des cellules est calculé de manière explicite à l'aide du volume δV_a balayé dehors par la face a de la cellule de base chaque sous cycle convectif.

Le nombre des sous cycles convectifs est donné par :

$$NS = \frac{\Delta t}{\Delta t_c} \quad (\text{IV.61})$$

Où Δt_c est l'incrément de temps du sous cycle convectif.

- *Calcul du δV_a*

δV_a est déterminé en fonction des vitesses normales des faces, des anciennes positions du maillage (au temps t^n) et des nouvelles positions du maillage (au temps t^{n+1}) :

$$\delta V_a = \delta V_a^G \frac{\Delta t}{\Delta t_c} - (uA)_a^B \Delta t_c \quad (\text{IV.62})$$

Où δV_a^G est le volume balayé dehors par la face a lorsque les quatre sommets définissant cette face sont déplacés de leurs anciennes positions (au temps t^n) à leurs nouvelles positions (au temps t^{n+1}).

A partir de l'équation (IV.44), on peut montrer que δV_a satisfait :

$$V_{ijk}^{n+1} = V_{ijk}^B + NS \sum_{faces a} \delta V_a \quad (\text{IV.63})$$

- Calcul des densités des espèces $(\rho_m)_{ijk}^\nu$ après ν sous cycles convectifs

$$(\rho_m)_{ijk}^\nu V_{ijk}^\nu = (\rho_m)_{ijk}^{\nu-1} V_{ijk}^{\nu-1} + \sum_{faces a} (\rho_m)_a^{\nu-1} \delta V_a \quad (\text{IV.64})$$

Avec

$$- (\rho_m)_{ijk}^0 = (\rho_m)_{ijk}^B \quad (\text{IV.65})$$

$$- V_{ijk}^\nu = \left[\nu V_{ijk}^{n+1} + (NS - \nu) V_{ijk}^B \right] / NS \quad (\text{IV.66})$$

-la masse volumique $(\rho_m)_{ijk}^\nu$ peut être obtenue par l'un des schémas convectifs : « *Quasi Second Order Up Wind* » : **(QSOU)**, ou « *Parcial Donor Cell* » : **(PDC)**, sur lesquels nous reviendrons au paragraphe (IV.6).

La densité totale après ν sous cycles convectifs est donnée par :

$$\rho_{ijk}^\nu = \sum_{m=1}^{m=ns} (\rho_m)_{ijk}^\nu \quad (\text{IV.67})$$

La masse de la cellule de base après ν sous cycles convectifs est déterminée par :

$$M_{ijk}^\nu = \rho_{ijk}^\nu V_{ijk}^\nu \quad (\text{IV.68})$$

La masse de la cellule de quantité de mouvement est donnée par :

$$(M'_{ijk})^\nu = \frac{1}{8} (M_{i,j,k}^\nu + M_{i-1,j,k}^\nu + M_{i-1,j-1,k}^\nu + M_{i,j-1,k}^\nu + M_{i,j,k-1}^\nu + M_{i-1,j,k-1}^\nu + M_{i-1,j-1,k-1}^\nu + M_{i,j-1,k-1}^\nu) \quad (\text{IV.69})$$

- Calcul de l'énergie interne I_{ijk}^ν

$$\rho_{ijk}^\nu V_{ijk}^\nu I_{ijk}^\nu = \rho_{ijk}^{\nu-1} V_{ijk}^{\nu-1} I_{ijk}^{\nu-1} + \sum_{\text{faces } a} (\rho I)_a^{\nu-1} \delta V_a \quad (\text{IV.70})$$

Où la quantité $(\rho I)_a^{\nu-1}$ peut être obtenue par le schéma (QSOU) ou par (PDC).

- Calcul des quantités turbulentes

$$\rho_{ijk}^\nu V_{ijk}^\nu q_{ijk}^\nu = \rho_{ijk}^{\nu-1} V_{ijk}^{\nu-1} q_{ijk}^{\nu-1} + \sum_{\text{faces } a} (\rho q)_a^{\nu-1} \delta V_a \quad (\text{IV.71})$$

Où $q = k$, ou $q = l_t$.

Pour éviter des valeurs négatives de k et l_t , on utilise seulement le schéma monotone QSOU pour le calcul de la quantité $(\rho q)_a^{\nu-1}$.

- Calcul de la température et de la pression

La température est obtenue en faisant l'inverse de la formule :

$$I(T) = \sum_m \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) I_m(T) \quad (\text{IV.72})$$

Et la pression est donnée par :

$$P_{ijk}^{n+1} = R_0 T_{ijk}^{n+1} \sum_m \frac{(\rho_m)_{ijk}^{n+1}}{W_m} \quad (\text{IV.73})$$

IV.5.2 Calcul des variables positionnées aux sommets des cellules de base

Le transport convectif de la quantité de mouvement dans un sous cycle ν est calculé en fonction des accroissements de la masse à travers les faces des cellules de quantité de

mouvement, qui sont liés avec les accroissements de la masse à travers les faces des cellules de base.

Le flux de quantité de mouvement est calculé par :

$$(M')_{ijk}^{\nu} \bar{u}_{ijk}^{\nu} = (M')_{ijk}^{\nu-1} \bar{u}_{ijk}^{\nu-1} + \sum_{\text{faces } \beta} (\delta M_{\beta}^C)^{\nu-1} \bar{u}_{\beta}^{\nu-1} \quad (\text{IV.74})$$

Où

$\bar{u}_{\beta}^{\nu-1}$ est calculée par l'un des deux schémas convectifs : (QSOU) ou (PDC).

δM_{β}^C est le flux de masse total.

Et la masse $(M')_{ijk}^{\nu}$ est donnée par :

$$(M')_{ijk}^{\nu} = (M')_{ijk}^{\nu-1} + \sum_{\text{faces } \beta} (\delta M'_{\beta})^{\nu-1} \quad (\text{IV.75})$$

$(\delta M'_{\beta})^{\nu-1}$ est l'accroissement de la masse à travers la face β .

IV.6 Traitement de la convection

IV.6.1 Schéma « *Partial Donor Cell* »

Lorsque la variable *pardon* du fichier de données vaut 1, un schéma de type « *Partial Donor Cell* » est employé dans la phase de rezonning pour l'estimation des flux convectifs des quantités $\rho_m, \rho I, \rho q, \dots$ etc.

Plus précisément, soient les deux cellules voisines 1 et 2, adjacentes à une même face a . On cherche à évaluer la quantité Q_a^{ν} sur la face a à l'aide d'une moyenne pondérée amont des quantités respectives Q_1^{ν} et Q_2^{ν} des deux cellules 1 et 2. La première étape consiste donc à déterminer quelle est la cellule amont (ou cellule donneuse) et quelle est la cellule aval (ou cellule accepteuse). Ceci est classiquement déterminé par le signe du flux de volume δV_a associé à la face a .

Par convention, on considère que lorsque $\delta V_a > 0$, donc la cellule 2 est la cellule donneuse et la cellule 1 est la cellule accepteuse et vice versa.

On définit donc les quantités :

$$Q_D^v = \begin{cases} Q_2^v & \text{si } \delta V_a > 0 \\ Q_1^v & \text{si } \delta V_a < 0 \end{cases} \quad (\text{IV.76})$$

Et

$$Q_A^v = \begin{cases} Q_1^v & \text{si } \delta V_a > 0 \\ Q_2^v & \text{si } \delta V_a < 0 \end{cases} \quad (\text{IV.77})$$

Avec 'D' pour donneur et 'A' pour accepteur.

Finalement, le schéma (PDC) est donné par :

$$Q_a^v = \frac{1}{2} Q_D^v (1 + \alpha_0 + \beta_0 C) + \frac{1}{2} Q_A^v (1 - \alpha_0 - \beta_0 C) \quad (\text{IV.78})$$

Où C est le nombre de courant basé sur la vitesse relative du fluide par rapport au maillage :

$$C = \frac{2|\delta V_a|}{V_1 + V_2} \quad (\text{IV.79})$$

Et où les coefficients α_0 et β_0 , spécifiés par l'utilisateur, vérifient :

$$0 \leq \alpha_0 + \beta_0 C \leq 1 \quad (\text{IV.80})$$

IV.6.1.1 Schéma centré

Si $\alpha_0 = \beta_0 = 0$, le schéma (IV.78) se réduit à un schéma centré qui est inconditionnellement instable.

IV.6.1.2 Schéma donneur pur

Si $\alpha_0 = 1$ et $\beta_0 = 0$, le schéma (IV.79) se réduit à un schéma donneur pur. Celui-ci est stable sous condition CFL mais en général bien trop dissipatif pour la plupart des applications. En effet, la diffusivité numérique locale introduite par ce schéma est de l'ordre de :

$$\frac{1}{2} |u| \Delta x \text{ dans la direction } x.$$

$$\frac{1}{2} |v| \Delta y \text{ dans la direction } y.$$

$$\frac{1}{2} |w| \Delta z \text{ dans la direction } z.$$

Où :

(u, v, w) désignent les composantes de la vitesse \vec{u} .

$(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ sont les dimensions caractéristiques de la cellule dans les directions x, y et z .

IV.6.1.3 Autres schémas

Si $\alpha_0=0$ et $\beta_0 = 1$, le schéma (IV.78) se réduit à une moyenne pondérée des schémas centré et donneur pur. Ces schémas sont moins diffusifs que le schéma donneur pur, mais ne vérifient pas la condition de monotonie. On n'est donc pas à l'abri de phénomènes de type « overshoot » ou « undershoot » pouvant conduire à des résultats aberrants (densités négatives, énergie cinétique turbulente négative,... etc.)

Pour éviter l'apparition de quantités turbulentes négatives, le code emploie systématiquement un schéma donneur pur pour le calcul du transport convectif des quantités ρk et $\rho \varepsilon$ lorsque ρdon vaut 1.

L'évaluation de la vitesse \vec{u}_β sur la face d'une cellule auxiliaire de quantité de mouvement se fait de manière analogue en se basant sur le flux de masse δM_β^C .

On définit :

$$\vec{u}_D^v = \begin{cases} \vec{u}_2^v & \text{si } (\delta M_\beta^C)^v > 0 \\ \vec{u}_1^v & \text{si } (\delta M_\beta^C)^v < 0 \end{cases} \quad (\text{IV.81})$$

et

$$\vec{u}_A^v = \begin{cases} \vec{u}_1^v & \text{si } (\delta M_\beta^C)^v > 0 \\ \vec{u}_2^v & \text{si } (\delta M_\beta^C)^v < 0 \end{cases} \quad (\text{IV.82})$$

Le schéma s'écrit alors :

$$\vec{u}_a^v = \frac{1}{2} \vec{u}_D^v (1 + \alpha_0 + \beta_0 C') + \frac{1}{2} \vec{u}_A^v (1 - \alpha_0 - \beta_0 C') \quad (\text{IV.83})$$

Avec

$$C' = \frac{4 \left| (\delta M_\beta^C)^v \right|}{M_N + M_S + M_E + M_W} \quad (\text{IV.84})$$

M_N, M_S, M_E et M_W représentant les masses des quatre cellules de base entourant le segment joignant les sommets 1 et 2.

IV.6.2 Schéma « QSOU »

Dans le but de simplifier la description du schéma «QSOU», nous le présentons en dimension 1.

On considère que la quantité Q varie de façon linéaire à l'intérieur de la cellule, la pente étant obtenue par :

$$\left(\frac{\partial Q}{\partial x}\right)_i = \begin{cases} \text{signe}(\Delta Q_i) \cdot \text{Min}\left\{\frac{|\Delta Q_i|}{\Delta x_i}, \frac{|\Delta Q_{i-1}|}{\Delta x_{i-1}}\right\} & \text{si } \Delta Q_i \cdot \Delta Q_{i-1} > 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{IV.85})$$

Où $\Delta Q_i = Q_{i+1} - Q_i$ et $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$.

La valeur $Q_{i+\frac{1}{2}}$ utilisée pour le calcul des flux convectifs au travers de la face entre les cellules i et $i+1$ est alors donnée par :

$$Q_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} Q_i + \left(\frac{\partial Q}{\partial x}\right)_i (x_{i+\frac{1}{2}} - x_i) \left(1 - \frac{\delta V_{i+\frac{1}{2}}}{|V_i|}\right) & \text{si } \delta V_{i+\frac{1}{2}} > 0 \\ Q_{i+1} - \left(\frac{\partial Q}{\partial x}\right)_{i+1} (x_{i+1} - x_{i+\frac{1}{2}}) \left(1 + \frac{\delta V_{i+\frac{1}{2}}}{|V_{i+1}|}\right) & \text{si } \delta V_{i+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (\text{IV.86})$$

Où :

$\delta V_{i+\frac{1}{2}}$ est le flux de volume.

V_i est le volume de la cellule i .

Ce schéma vérifie la propriété de monotonie. On est donc à l'abri des phénomènes d'oscillations et d'undershoot à l'origine de l'apparition des cellules de masses négatives. Le schéma est en outre plus précis et moins dissipatif que les schémas «PDC», mais évidemment plus coûteux.

Amsden et Al (1989) ont exposé toutes les précisions complémentaires nécessaires à l'application du schéma «QSOU» en dimension 3.

VI.7 Conditions aux limites : Amsden et al (1989)

Etant donné que c'est la méthode des volumes finis qui est utilisée, les conditions aux limites des variables dépendantes sont prescrites sous forme de flux à travers la face de la cellule qui est située sur la frontière.

Considérons une cellule adjacente à la paroi (voir figure IV.6). Les points e, f, g et h sont situés sur la paroi, et les points a, b, c et d sont situés dans le fluide.

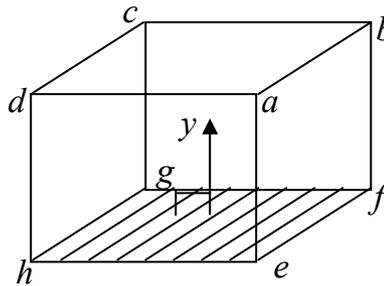


Figure IV.6 : Cellule adjacente à la paroi

La distance y de la paroi est donnée par :

$$y = \left\{ \frac{1}{4} [(\bar{x}_a - \bar{x}_e) + (\bar{x}_b - \bar{x}_f) + (\bar{x}_c - \bar{x}_g) + (\bar{x}_d - \bar{x}_h)] \cdot \frac{\vec{A}_a}{|\vec{A}_a|} \right\} \quad (\text{IV.87})$$

- *Condition pour la vitesse*

La condition pour la vitesse est imposée sous forme d'un flux de quantité de mouvement à travers la face durant un temps Δt : $\tau_{paroi} \times \text{surface} \times \text{l'incrément de temps}$.

Où

$$\tau_{paroi} = \rho_w (u^*)^2 \quad (\text{IV.88})$$

u^* est la vitesse de cisaillement qui peut être déterminée par la relation :

$$\frac{u}{u^*} = \begin{cases} \frac{1}{\kappa} \ln \left[C_{lw} \left(\frac{yu}{\nu_l} \right)^{7/8} \right] + B & \frac{yu}{\nu_l} \geq R_c \\ \left(\frac{yu}{\nu_l} \right)^{1/2} & \frac{yu}{\nu_l} \leq R_c \end{cases} \quad (\text{IV.89})$$

Avec

$$C_{lw} = 0.15, \kappa = 0.4327, B = 5.5 \text{ et } R_c = 11.4$$

ν_l est la viscosité cinématique laminaire.

u est la vitesse tangentielle à la paroi, donnée par:

$$u = \left[\frac{1}{4} (u_a + u_b + u_c + u_d) \right] \quad (\text{IV.90})$$

- *Condition pour la température*

Là aussi, la condition pour la température est imposée sous forme d'un flux de chaleur durant un temps Δt : $J_w \times \text{surface} \times \text{l'incrément de temps}$.

Où J_w peut être déterminé par la relation:

$$\begin{cases} \frac{T}{T_w} = 1 + \frac{J_w Pr u^*}{C_p \tau_w T_w} \left[\frac{u}{u^*} + R_c^{1/2} \left(\frac{Pr_l}{Pr} - 1 \right) \right] & \frac{yu}{\nu_l} > R_c \\ \frac{T}{T_w} = 1 + \frac{J_w}{K_l T_w} y = 1 + \frac{J_w Pr u^*}{C_p \tau_w T_w} \frac{u}{u^*} & \frac{yu}{\nu_l} \leq R_c \end{cases} \quad (\text{IV.91})$$

Avec

K_l et Pr_l sont respectivement le coefficient de diffusion de la chaleur et le nombre de Prandtl laminaire.

- Condition pour k

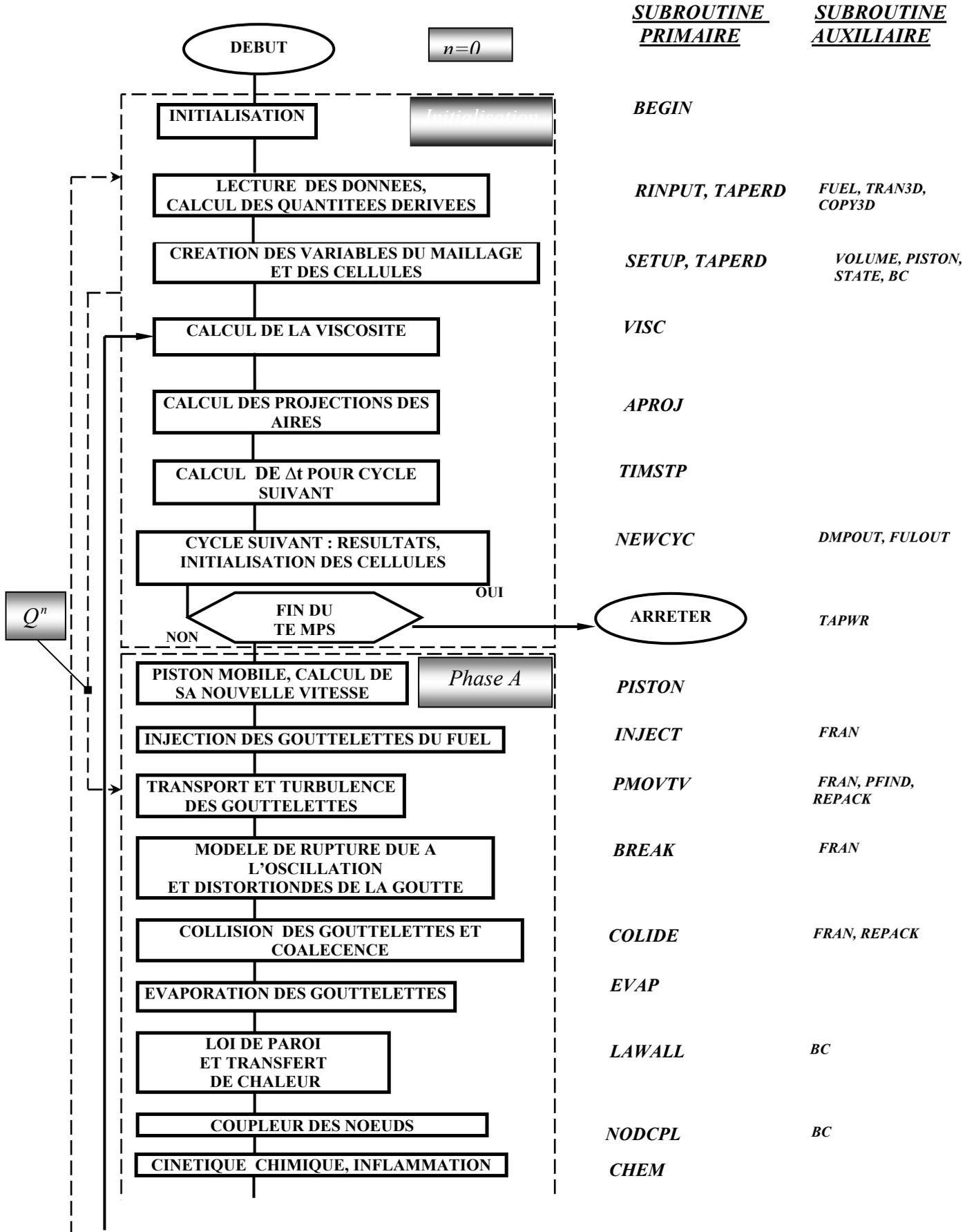
$$\frac{\partial k}{\partial y} = 0 \quad (\text{IV.92})$$

- Condition pour ε

$$\varepsilon = \frac{1}{\kappa} \frac{(u^*)^3}{y} = \frac{C_\mu^{3/4}}{\kappa} \frac{k^{3/2}}{y} \quad (\text{IV.93})$$

IV.8 Organigramme du code de calcul KIVA II

On propose ci-après l'organigramme du code KIVA II. On trouvera dans l'ordre de gauche à droite : les différentes actions effectuées, les sous programmes qui ont en charges ces actions et la liste des sous programmes ou fonctions auxiliairement utilisées :



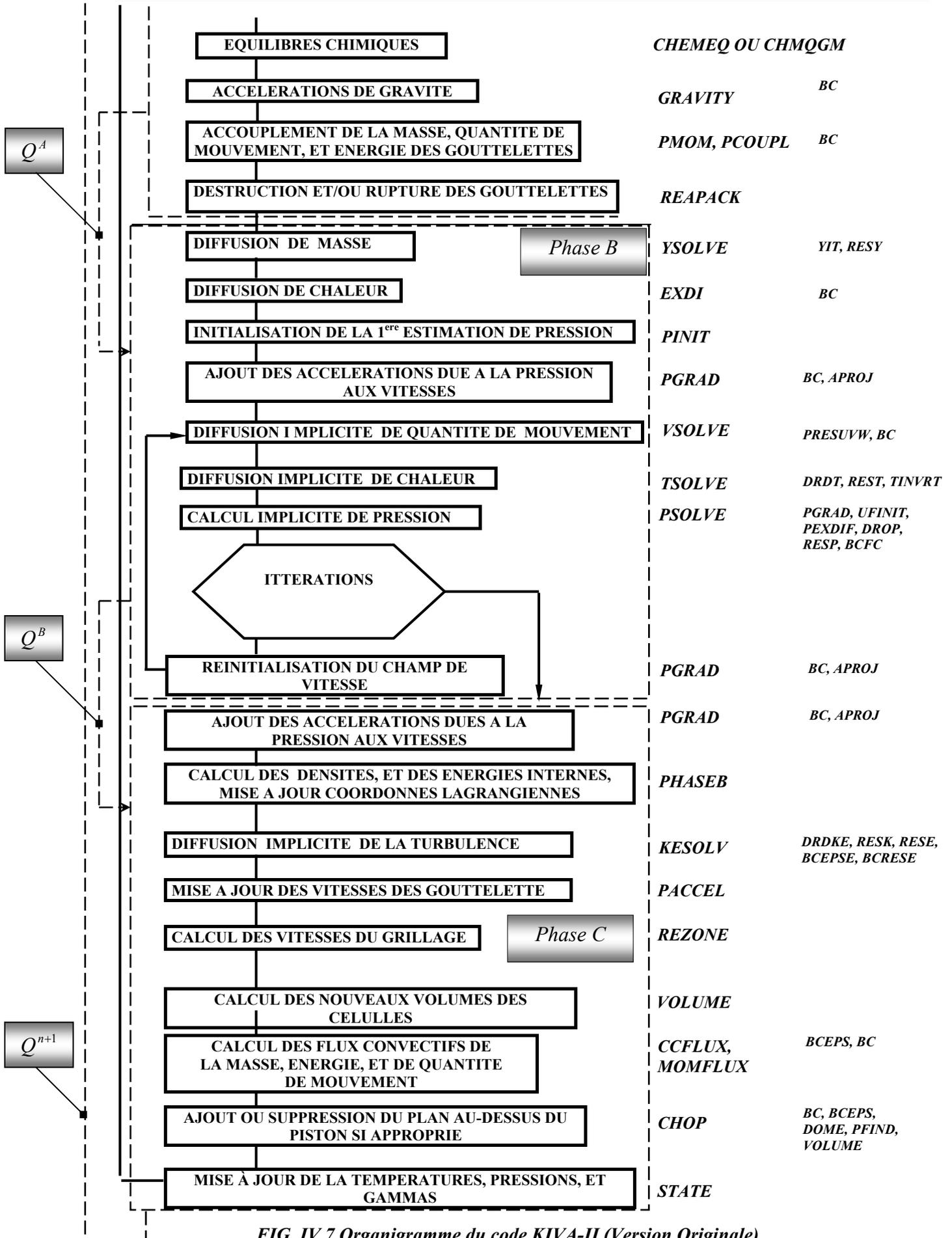


FIG. IV.7 Organigramme du code KIVA-II (Version Originale)

Chapitre.V

Résultats et Discussion

V.1 Introduction

V.2 Géométrie du problème et données

V.3 Génération du maillage

V.4 Discussion des résultats

V.5 Résultats

V.5.1 Maillage utilisé

V.5.2 Le jet non-réactif

V.5.3 Le jet réactif

V.5.4 Effets de quelques paramètres sur l'aérothermochimie de la flamme

V.5.4.1 Effet du nombre de Reynolds

V.5.4.2 Effet de l'intensité de turbulence à l'entrée

V.5.4.3 Effet de l'intensité de turbulence à l'entrée et de la richesse sur la hauteur de la flamme

Chapitre.V

Résultats et Discussion

V.1 Introduction

Le brûleur Bunsen constitue un outil communément utilisé pour l'étude des propriétés des flammes laminaires et turbulentes : *Stevens (1998)*, *Kalt (1998)*, *Pavé (2002)*. Toutes les investigations expérimentales ou numériques réalisées sur ce type de brûleur ont porté essentiellement et dans leur globalité sur la compréhension des phénomènes aérothermochimiques fondamentaux de base. Cet outil a permis la constitution d'une excellente banque de donnée sur les flammes prémélangées, d'une grande importance quant à la maîtrise des processus physiques et chimiques prépondérants au sein des systèmes de combustion. La stabilité de la flamme, l'interaction entre la turbulence et les réactions chimiques et le comportement dynamique des flammes représentent les problèmes majeurs rencontrés dans la quasi-totalité des applications de la combustion prémélangée.

V.2 Géométrie du problème et données

Le code KIVAII, modifié en version brûleur a été appliqué pour simuler l'écoulement et la chimie dans un brûleur de type bunsen. La configuration géométrique considérée dans le présent travail est illustrée sur la figure (V.1) et cela pour les deux jets réactif et non réactif.

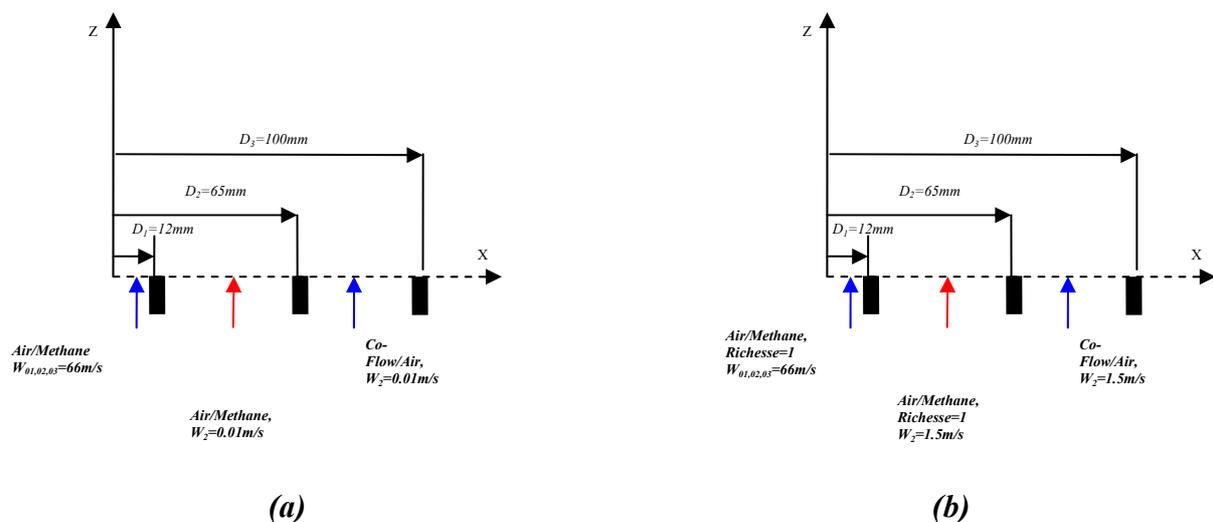


Fig. (V.1) : Géométrie du problème pour les deux jets étudiés: (a) Cas non réactif et (b) réactif.

Les dimensions de la configuration géométrique considérée du brûleur bunsen et les caractéristiques de l'écoulement pour les deux jets réactif et non réactif étudiés sont résumées dans le tableau (V.2) :

Concernant les profils imposés à l'entrée du brûleur et qui concerne en premier lieu le profil initial de la composante axiale de la vitesse ainsi que l'énergie cinétique turbulente utilisées lors de notre étude, il nous est très important de mentionner le fait qu'elle vont porter essentiellement sur des données expérimentales pures remises par **M. Gorokhovski (INSA de Rouen, France)** tirées à partir de l'expérience de Peters.

Données	Le cas non réactif	Le cas réactif
Température initiale du mélange CH_4/Air	300K	300K
Température de la flamme pilote (Un mélange stoechiométrique CH_4/Air)	300K	2400K
Température de l'air dans le Co-flow	300K	300K
Température ambiante	300K	300K
Vitesse initiale du jet	66m/s	66m/s
Vitesse de la flamme pilote et celle de l'air dans le Co-Flow	0.01m/s	1.5m/s
Diamètre intérieur	12mm	12mm
Diamètre extérieur (Flamme Pilote)	65mm	65mm
Diamètre du Co-Flow	100mm	100mm
Viscosité Cinématique du Mélange à l'entrée	$1,5 \cdot 10^{-5} m^2/s$	$1,5 \cdot 10^{-5} m^2/s$
Nombre de Reynolds du jet	52800	52800
Intensités de turbulence à l'entrée	7.3, 10.4, 12.5%	7.3, 10.4, 12.5%
Intensité de turbulence dans la Flamme Pilote et le Co-Flow	1%	1%
La turbulence ambiante, Tke_{amb}	$10^{-4} m^2/s^2$	$10^{-4} m^2/s^2$
Echelle de Longueur ambiante, l_{amb}	$6 \cdot 10^{-3} m$	$6 \cdot 10^{-3} m$
Pression Ambiante, P_{amb}	1.013bar	1.013bar

Tableau (V.2) : Caractéristiques de la géométrie et de l'écoulement étudié pour les deux jets réactif et non réactif.

Les enthalpies de formation au zéro absolu des espèces chimiques considérées sont représentées dans le tableau suivant :

Espèce Chimique	CH ₄	O ₂	N ₂	CO ₂	H ₂ O	SIT
Enthalpie de formation au zéro absolu (kcal/mol)	-17.909	0.0	0.0	-93.965	-57.103	0.0

V.3 Génération du maillage

La génération du maillage est réalisée par le biais d'un générateur de maillage automatique que contient le sous-programme *SETUP*. Il permet de créer des maillages bidimensionnels et tridimensionnels (*cartésiens ou cylindriques*) et il nécessite une introduction des données caractérisant les nœuds du maillage sur les frontières du domaine, dans le fichier de données appelé *ITAPE* du code.

Dans la présente simulation, les maillages utilisés pour chaque cas étudié sont orthogonaux et non-uniformes. Un raffinement au niveau du diamètre de chacun des deux cas étudiés a été effectué afin de capter les différents phénomènes qui peuvent intervenir dans cette zone où les gradients des variables dépendantes sont importants.

Le tableau suivant donne le nombre de nœuds utilisés pour les deux cas du jet étudiés :

<i>Le jet étudié</i>	<i>La direction radiale</i>	<i>La direction axiale</i>	<i>La direction azimutale</i>
<i>Le jet non-réactif</i>	20	40	1
<i>Le jet réactif</i>	20	40	1

Tableau (V.3) : Nombre de nœuds utilisés pour les deux jets étudiés.

Il est à noter qu'un test de dépendance du maillage utilisé sur le comportement général de la solution a été effectué pour un nombre de nœuds total de $(30 \times 40 \times 1)$. Les résultats obtenus concernant l'évolution le long de l'axe de la composante axiale de la vitesse donnent une légère différence de l'ordre de 2.33% par rapport à ceux que donne un maillage de $(20 \times 40 \times 1)$.

V.4 Discussion des résultats

V.4.1 Le jet non-réactif

V.4.1.1 Les vitesses moyennes

Les profils de vitesse imposés à l'entrée sont illustrés sur la figure (V.2). Ce sont des profils presque uniformes dans la région centrale du jet. La vitesse chute brusquement à zéro juste en aval de la paroi du tube d'où sort le jet.

La figure (V.3) montre la variation de la vitesse, le long de l'axe du jet, normalisée par la vitesse sur l'axe à $Z/D=0$. On observe une légère augmentation d'abord de la vitesse axiale. Elle atteint une valeur maximale d'environ 1.1 fois la valeur initiale puis décroît et tend vers zéro à l'infini. La petite accélération dans la partie amont du jet a aussi été rapportée par quelques travaux expérimentaux qu'on cite parmi eux : *Compte Bellot (2003)*. Elle pourrait être due au terme source des contraintes de Reynolds dans l'équation de transport de quantité de mouvement.

La figure (V.4) présente l'évolution de profil de la composante longitudinale de la vitesse normalisée par la vitesse sur l'axe locale, en fonction de r/D . La décélération au centre est compensée par l'accélération du fluide entraîné sur la périphérie de sorte qu'il y a conservation du flux de quantité de mouvement à travers chaque section du jet. C'est la raison pour laquelle on note aussi un épaississement du jet. L'échange étant dû essentiellement à la turbulence, l'effet de la viscosité est largement dominé.

Les profils en différentes positions dans le jet, de la composante radiale de la vitesse normalisée par la vitesse sur l'axe sur l'axe sont montrés sur la figure (V.5). Juste à la sortie du jet cette composante est nulle sur la partie centrale. On note des valeurs négatives sur la périphérie du jet. Cela s'explique probablement par l'aspiration de l'air environnant par le jet principal. En allant vers l'aval, les faibles valeurs de la vitesse V deviennent positives. Cela est imposé par le principe de conservation de la masse puisque dans le centre du jet la vitesse axiale diminue. La composante radiale est typiquement 1 à 2 ordres de grandeur inférieure (5% à 10%) par rapport à la composante axiale, un résultat typique dans ce genre d'écoulement parabolique.

V.4.1.2 Les paramètres de la turbulence

Les profils de l'énergie cinétique turbulente imposé à l'entrée sont présentés sur la figure (V.6), pour trois intensités de turbulence. Dans les trois cas, l'intensité de turbulence est relativement faible dans la région centrale du jet. Elle atteint un maximum sur la

périphérie du jet en aval du tube représentant la paroi du brûleur. C'est une zone de forte production de la turbulence vu les gradients de vitesse moyenne importants qui y existent.

L'allure des profils du taux de dissipation ε donnés à l'entrée pour les trois intensités de turbulence est très similaire à celle de l'énergie cinétique turbulente, figure (V.7). Cela est plutôt prévisible du fait que l'expression donnant ε à l'entrée basée sur la supposition de l'état d'équilibre local de la turbulence montre que ε est proportionnel à $k^{\frac{3}{2}}$.

Les figures (V.8) et (V.9) illustrent l'évolution le long de l'axe du jet, de l'énergie cinétique turbulente et son taux de dissipation respectivement, pour les trois intensités de turbulence à l'entrée. La similarité entre les comportements de k et de ε peut s'expliquer par le fait que là où il y a une turbulence intense dans le jet, il y a aussi un taux de dissipation important.

Ces deux caractéristiques de la turbulence augmentent d'abord sur une distance d'environ trois fois le diamètre où elles atteignent des valeurs maximales puis décroissent pour tendre vers zéro à l'infini. Il est clair que sur l'axe, le gradient de la vitesse moyenne $\frac{\partial U}{\partial x}$ est nul et donc le mécanisme de production de la turbulence sur l'axe est pratiquement négligeable. Les valeurs maximales enregistrées sur l'axe à quelques diamètres de la sortie représentent en fait une énergie turbulente transportée à partir d'une autre région de forte production, notamment en aval du bord du brûleur, caractérisée par un fort gradient de vitesse moyenne $\frac{\partial U}{\partial x}$. La décroissance de la turbulence plus loin en aval est due à l'effet de la viscosité qui dissipe l'énergie sous forme de chaleur.

La figure (V.10) montre l'évolution sur l'axe du temps caractéristique des tourbillons $\frac{k}{\varepsilon}$ pour les trois intensités de turbulence à l'entrée. Ce temps diminue d'abord, atteint un minimum à quelques diamètres de la sortie puis augmente de façon presque linéaire avec la distance axiale. C'est un comportement pratiquement inverse par rapport à celui de l'énergie turbulente puisque un temps caractéristique court correspond à une turbulence intense (la rotation des tourbillons est plus rapide).

En s'éloignant plus vers l'aval, la variation linéaire du temps caractéristique peut s'expliquer par le fait que l'échelle de longueur des tourbillons (proportionnelle à l'épaisseur du jet) augmente de façon linéaire avec la distance axiale.

Les figures (V.11), (V.12) font paraître les profils des fluctuations axiales et radiales de vitesse respectivement, en fonction de la distance radiale. Il est rappelé que ces paramètres sont obtenus de manière explicite, du concept de Boussinesque :

$$u'_i u'_j = \gamma_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k \delta_{ij}$$

L'allure des courbes des composantes axiales et radiales $\frac{\sqrt{u'^2}}{U_{axe}}$ et $\frac{\sqrt{v'^2}}{U_{axe}}$ de la vitesse fluctuante est presque identique. Juste à la sortie, les intensités de turbulence sont maximales en aval du bord du brûleur, c'est-à-dire dans la même région où l'énergie cinétique turbulente est maximale. C'est grâce à l'équation de transport de k que « l'effet mémoire » est pris en compte : ce qui est produit comme énergie turbulente à l'amont est transporté vers l'aval. Les valeurs importantes de $\frac{u'}{U_{axe}}$ et $\frac{v'}{U_{axe}}$ en aval sont dues essentiellement au terme contenant k dans le concept de Boussinesque.

V.4.2 Le jet réactif

V.4.2.1 Les vitesses moyennes

La figure (V.13) montre la variation de la vitesse axiale en fonction de la distance le long de l'axe du jet. Dans la zone du cône potentiel, le comportement est presque identique dans les deux cas du jet réactif et non réactif, étant donné que le cône potentiel est une zone inerte. Cependant, à partir de la zone de réaction, il est clair que la vitesse axiale dans le jet réactif est sensiblement plus élevée que celle du jet non réactif. C'est dû à la dilatation des gaz qui ont subi une grande augmentation de température. Ce résultat est aussi confirmé par les profils radiaux, à une position donnée, $Z/D=16.23$ en aval du front de flamme montrés sur la figure (V.14) qui laissent apparaître que les valeurs de la vitesse axiale du jet réactif sont nettement supérieures à celles du jet non réactif.

L'expansion des gaz entraîne aussi des valeurs relativement importantes de la composante radiale de vitesse. Cela est mis en évidence par les profils radiaux de la figure (V.15) à la position $Z/D=16.23$. En effet, les gaz dilatés tendent non seulement à accélérer le jet dans la direction axiale mais aussi à épaissir le jet dans le sens radial.

V.4.2.2 Les paramètres de la turbulence

La variation de l'énergie cinétique turbulente et son taux de dissipation en fonction de la distance axiale est illustrée sur les figures (V.16), (V.17) respectivement, le résultat fait paraître un effet appréciable de la combustion sur la turbulence. En fait, la dilatation des gaz résultant de la combustion entraîne une stabilisation des fluctuations de la vitesse. A l'amont du front de flamme, dans la zone inerte, k et ε ont des valeurs pratiquement égales à celles correspondantes du jet à froid. En aval du front de flamme c'est une décroissance asymptotique de ces variables tendant vers zéro.

Concernant l'échelle caractéristique du temps de la turbulence, $\frac{k}{\varepsilon}$, la figure (V.18) montre clairement que les réactions chimiques exothermiques ont pour effet de l'augmenter dans un premier temps, ce qui est consistant avec le résultat précédent de l'amortissement de la turbulence. En effet, la dilatation des gaz signifie des tailles des structures tourbillonnaires plus grandes (amorties) et donc un temps caractéristique plus long.

Le comportement de la composante axiale de la fluctuation de vitesse est similaire à celui de l'énergie cinétique turbulente, ce qui est confirmé sur la figure (V.19), montrant l'évolution de $\frac{u'}{U_0}$ en fonction de Z/D .

La figure (V.19) montrant un profil radial de $\frac{u'^2}{U_{axe}^2}$ dans une station $Z/D=16.23$, pour les deux jets réactifs et non réactifs révèle, à notre avis, un résultat intéressant : alors que sur l'axe du jet la combustion a pour effet de réduire l'intensité de turbulence, sur la périphérie du jet c'est plutôt l'inverse qui se passe. $\frac{u'^2}{U_{axe}^2}$ dans le jet réactif atteint des valeurs maximales beaucoup plus élevées par rapport à celle du jet non réactif. Cela est probablement dû à des gradients de vitesse moyenne sur la périphérie du jet beaucoup plus importants dans l'écoulement réactif engendrés par le cisaillement plus grand entre les gaz dilatés dans le centre du jet et l'air environnant.

V.4.2.3 Le champs thermique dans la flamme

Les champs des températures est présenté sur sous forme de profils radiaux en différentes stations Z/D , figure (V.21), aussi sous forme d'isothermes, figure (V.22). Au niveau de la section de sortie du jet on observe une température maximale au niveau de la flamme pilote et la température de l'ambiance dans la région centrale (prémélange des gaz

frais) et sur la périphérie (air environnant). En allant vers l'aval la température est maximale à un rayon qui diminue progressivement de sorte qu'à une distance sur l'axe $20D$ de l'entrée, la position de la température maximale se situe sur l'axe du jet. Le front de flamme peut être considéré comme la frontière entre les gaz frais et les gaz brûlés où la température augmente rapidement vers sa valeur maximale.

V.4.2.4 Le champs de fractions massique de certaines espèces dans la flamme

Le champ de la fraction massique du méthane est représenté sur la figure (V.23) sous forme de profils radiaux en différentes positions Z/D , (normalisée par la fraction massique du méthane dans le prémélange à la sortie du jet, CH_{4_0}) et sur la figure (V.24) sous forme de contours. La consommation du combustible est clairement illustrée. En effet, la fraction massique diminue de la valeur initiale à la sortie du jet et est pratiquement totalement brûlée juste en aval du front de flamme.

Parmi les espèces produites, la fraction massique de H_2O est montrée aussi sous forme de profils radiaux en différentes positions Z/D , figure (V.25) et sous forme d'iso-valeurs, figure (V.26). Le comportement du CO_2 est similaire à celui de H_2O . La valeur maximale de la fraction massique pour les deux espèces se trouve dans la zone de la flamme pilote au niveau de la sortie du jet alors qu'elle est pratiquement nulle dans le prémélange des gaz frais. En traversant le front de flamme, il y a augmentation de la fraction massique jusqu'à atteindre des valeurs maximales. En aval du front de flamme, la concentration de ces espèces diminue puisqu'elles se mélangent avec l'air environnant.

L'espèce intermédiaire combinant CO et H_2 , telle que définie dans le mécanisme réactionnel réduit à deux étapes de Peters et Williams (voir chapitre III) est illustrée sur la figure (V.27) où sont montrés des profils radiaux en différentes stations Z/D et sur la figure (V.28) pour les iso-valeurs. La fraction massique de ce composant est nulle dans les gaz frais et dans les gaz brûlés. Elle est maximale dans le front de flamme, d'où sa caractéristique d'espèce intermédiaire : quand les gaz frais traversent le front de flamme, il y a d'abord une production de l'espèce intermédiaire (donc de CO et H_2) suivie immédiatement de sa consommation pour donner CO_2 et H_2O .

Dans les flammes turbulentes prémélangées, la variable de progrès c est très souvent utilisée pour délimiter la zone des gaz frais (où $c = 0$) de celle des gaz brûlés (où $c = 1$).

Elle est généralement définie sur la base d'un paramètre dont la valeur passe d'un extrême (par exemple température minimale ou concentration minimale ou maximale) dans les gaz frais à l'autre extrême (Température maximale ou concentration minimale ou maximale) dans les gaz brûlés. Les figures (V.29), (V.30) montrent les profils de la variable de progrès basée sur la température et la concentration du combustible respectivement. On remarque qu'elle est pratiquement nulle dans les gaz frais. D'après les présents résultats, la définition de c basée sur la concentration est meilleure puisque la variable de progrès augmente à la traversée du front de flamme à la valeur un. Cela n'est pas vraiment le cas avec c basée sur la température.

V.4.3. Effets de quelques paramètres sur l'aérothermochimie de la flamme

V.4.3.1 Effet du nombre de Reynolds

- **Sur l'évolution de la vitesse axiale**

Les figures (V.31), (V.32) montrent l'évolution de la vitesse longitudinale le long de l'axe du jet pour deux valeurs de la vitesse du jet à la sortie : $U_0=30\text{m/s}$, donnant $\text{Re}=24000$ et $U_0=66\text{m/s}$ donnant $\text{Re}=52800$.

Le résultat est qu'une diminution du nombre de Reynolds entraîne une décélération plus importante de la vitesse sur l'axe. Cela est du probablement au rôle plus important joué par les forces visqueuses sur les forces d'inertie. En effet pour $U_0=66\text{m/s}$ la vitesse axiale est à 80% de sa valeur à l'entrée après une distance d'environ 10 fois le diamètre ($10D$) alors que pour $U_0=30\text{m/s}$, cette même valeur est atteinte à seulement $3D$.

- **Sur l'évolution de l'énergie cinétique turbulente**

Les figures (V.33), (V.34) montrant l'évolution de k le long de l'axe du jet pour $U_0=30\text{m/s}$ et $U_0=66\text{m/s}$, respectivement, mettent en évidence l'effet du nombre de Reynolds sur l'énergie cinétique turbulente. En fait, l'intensité de turbulence déjà diminuée par la réaction chimique à cause de la dilatation est réduite encore plus que Re diminue. La raison est que la turbulence produite sur la périphérie au niveau du bord du brûleur et ramenée vers le centre du jet est elle-même diminuée : Le passage de $U_0=66\text{m/s}$ à $U_0=30\text{m/s}$ entraîne des gradients de vitesse moins importants sur les bords et donc moins de production de l'énergie turbulente.

- **Sur la température**

La variation de la température le long de l'axe du jet est illustrée sur les figures (V.35) et (V.36) pour $U_0=30\text{m/s}$ et $U_0=66\text{m/s}$, respectivement et celle représentant le champ thermique est représentée sur les figures (V.37), (V.38). La comparaison des deux évolutions laisse apparaître deux résultats : Le premier est que la température maximale atteinte est restée pratiquement constante pour les différents nombres de Reynolds ; la position sur l'axe à laquelle la température est augmentée brusquement à sa valeur maximale est plus rapprochée du bord du brûleur pour le nombre de Reynolds plus faible. On en déduit que quand on augmente la vitesse du jet à la sortie, le front de flamme a tendance à s'éloigner du brûleur(mais reste toujours accroché grâce à la flamme pilote).

- **Sur la fraction massique du méthane**

Les figures (V.39), (V.40) montrent l'évolution de la quantité du méthane existante le long de l'axe du jet par unité de masse du méthane à la sortie, pour $U_0=30\text{m/s}$ et $U_0=66\text{m/s}$, respectivement et aussi sous forme d'iso-valeurs sur les figures (V.41), (V.42). Les résultats obtenus sont très consistants avec ceux discutés précédemment : L'augmentation du nombre de Reynolds entraîne une consommation du combustible à une distance plus éloignée du brûleur, ce qui confirme que la flamme est plus allongée.

V.4.3.2 Effet de l'intensité de turbulence à l'entrée

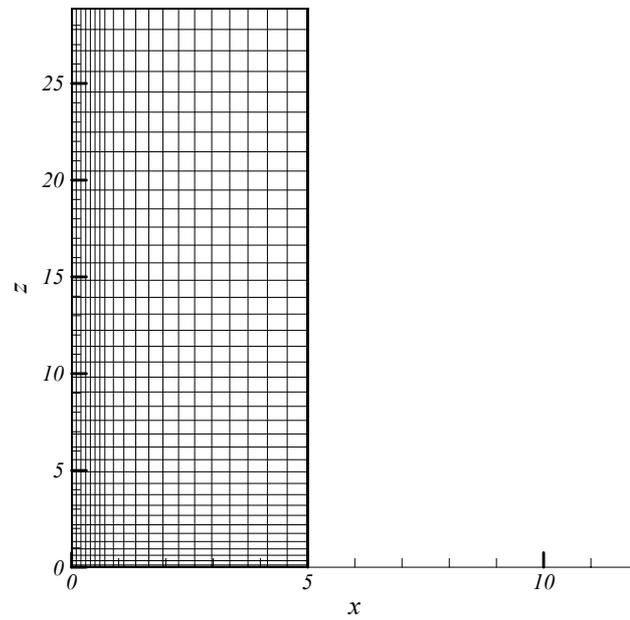
L'effet de l'intensité de la turbulence à l'entrée du domaine s'est avéré non négligeable sur le comportement de la flamme. La figure (V.43) compare l'évolution de la température sur l'axe pour deux valeurs de l'intensité de turbulence à l'entrée. On remarque qu'une turbulence plus intense à l'entrée a pour effet de raccourcir légèrement la hauteur de la flamme. Cela confirme le résultat qu'une turbulence plus intense entraîne une augmentation de la vitesse de propagation du front de flamme et donc une flamme moins allongée.

V.4.3.3 Effet de l'intensité de turbulence à l'entrée et de la richesse sur la hauteur de la flamme

En fait, la figure (V.44) illustre, en même temps l'effet de la richesse et aussi de l'intensité de la turbulence sur la hauteur de la flamme. Il est clair que pour un mélange stoechiométrique la hauteur de flamme est minimale. Plus la turbulence est intense à l'entrée, plus la flamme est raccourcie. Pour des mélanges très pauvres ou très riches, on observe des hauteurs de flammes relativement grandes.

V.5. Résultats et graphes

V.5.1 Maillage utilisé



(V.1) : Maillage utilisé pour les deux jets étudiés : non- réactif et réactif.

V.5.2 Le jet non-réactif

- Les vitesses moyennes

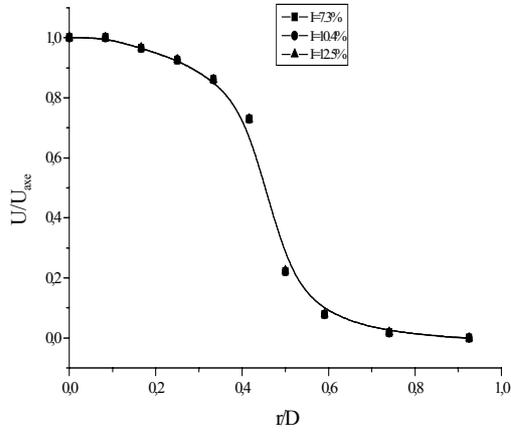


Fig. (V.2) : Profil radial de la composante axiale de la vitesse normalisée par la vitesse sur l'axe pour les trois intensités de turbulence.

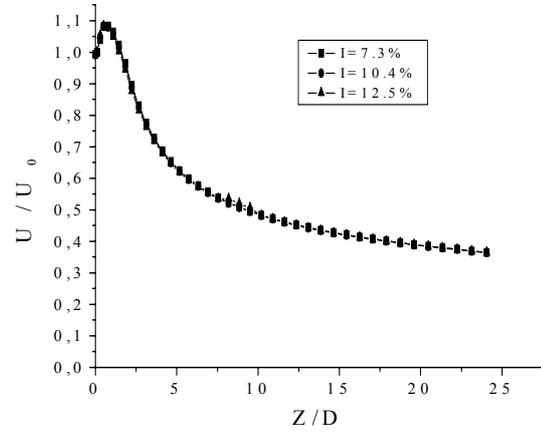


Fig. (V.3) : Profil axial de la composante axiale de la vitesse normalisée par la vitesse à l'entrée pour les trois intensités de turbulence.

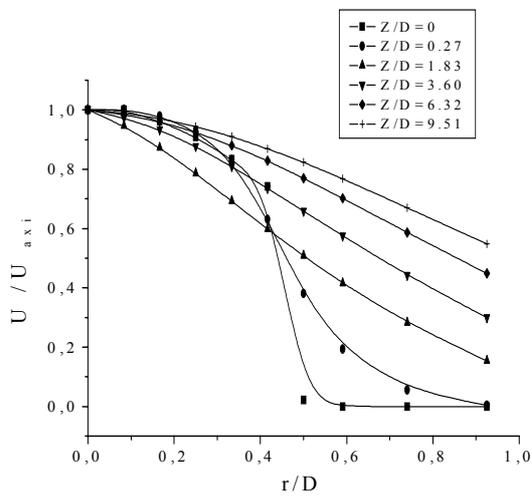


Fig. (V.4) : Profil radial de la vitesse axiale normalisée par la vitesse sur l'axe pour une intensité de turbulence: $I=7.3\%$.

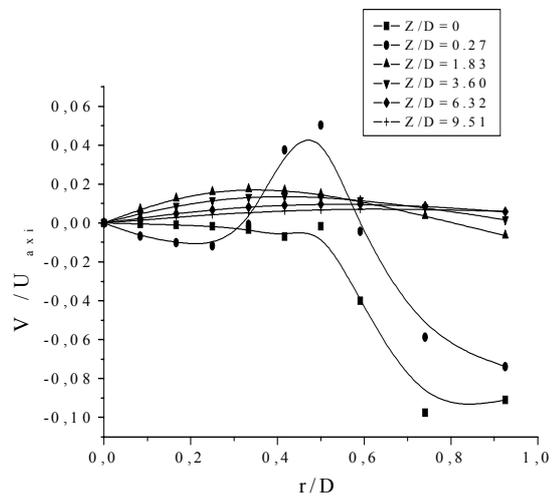


Fig. (V.5) : Profil radial de la composante radiale de la vitesse normalisée par la vitesse sur l'axe, pour une intensité de turbulence : $I=7.3\%$.

• Les paramètres de la turbulence

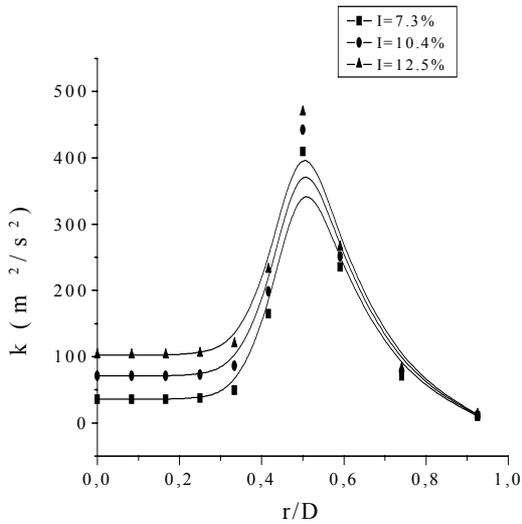


Fig. (V.6) : Profil radial de l'énergie cinétique turbulente à l'entrée du brûleur pour les trois intensités de turbulence: 7.3%,10.4%,12.5%.

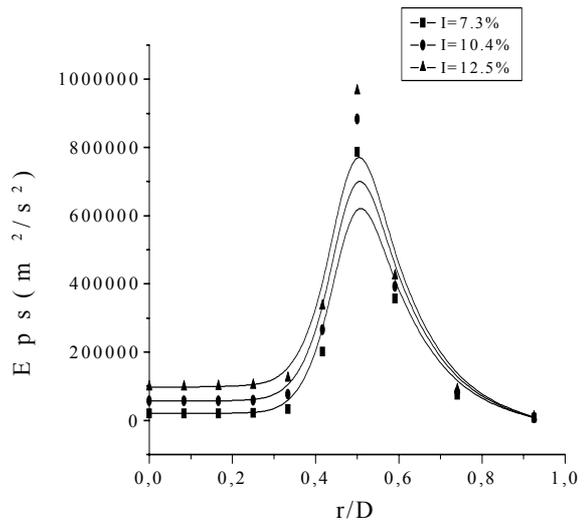


Fig. (V.7) : Profil radial du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente à l'entrée du brûleur pour les trois intensités de turbulence: 7.3%,10.4%,12.5%.

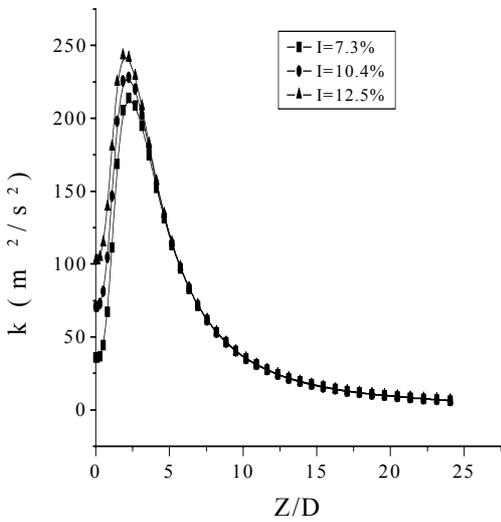


Fig. (V.8) : Profil axial de l'énergie cinétique turbulente pour les trois intensités de turbulence: 7.3%,10.4%,12.5%

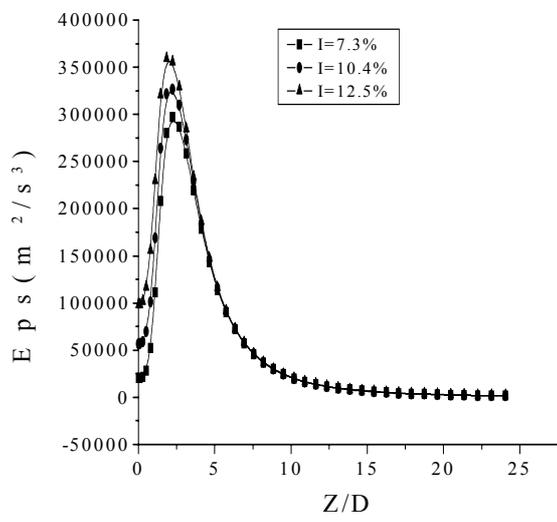


Fig. (V.9) : Profil axial du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente pour les trois intensités de turbulence: 7.3%,10.4%,12.5%

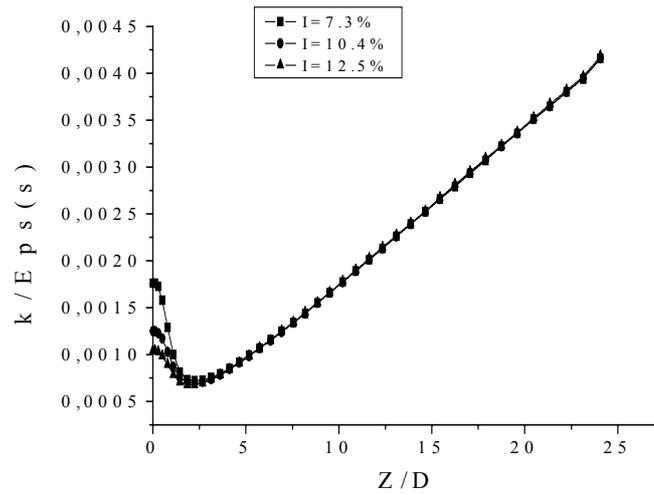


Fig. (V.10) : Profil axial de l'échelle caractéristique du temps de la turbulence pour les trois intensités de turbulence: 7.3%,10.4%,12.5%

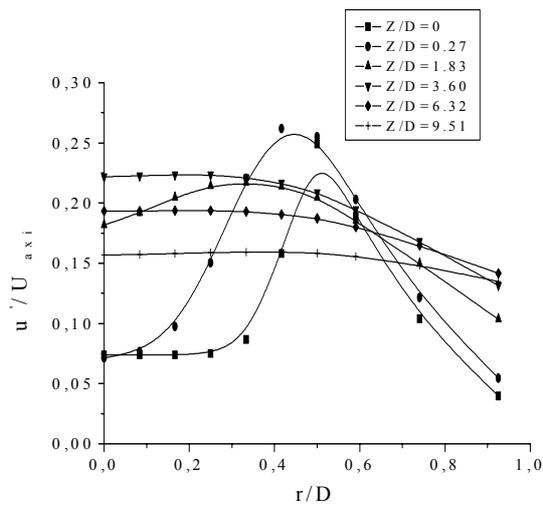


Fig. (V.11) : Profil radial de la fluctuation axiale de la vitesse normalisée par la vitesse sur l'axe pour une intensité de turbulence $I=7.3\%$.

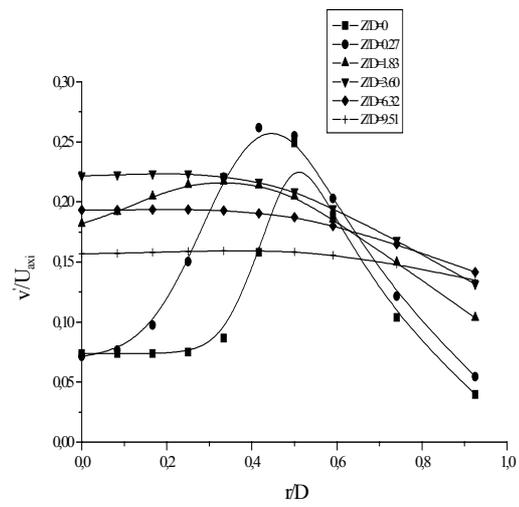


Fig. (V.12) : Profil radial de la fluctuation radiale de la vitesse normalisée par la vitesse sur l'axe pour une intensité de turbulence $I=7.3\%$.

V.5.3 Le jet réactif

- Les vitesses moyennes

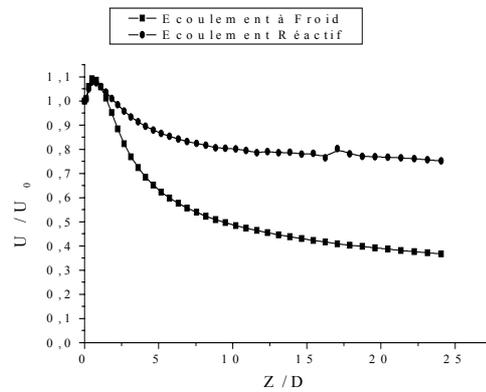


Fig. (V.13) : Profil axial de la de la composante axiale de la vitesse normalisée par la vitesse à l'entrée du brûleur : Cas de l'écoulement à froid et de l'écoulement réactif pour une intensité de turbulence $I=12.5\%$.

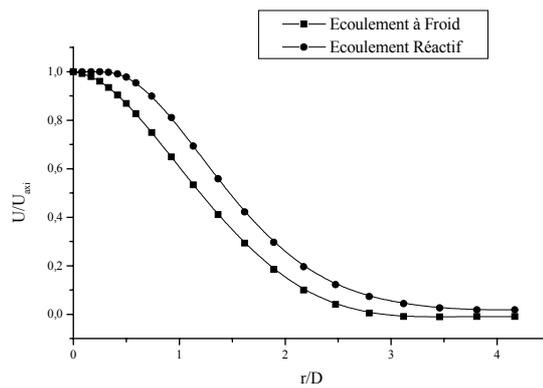


Fig. (V.14) : Profil radial de la composante axiale de la vitesse normalisée par la vitesse sur l'axe à une station $Z/D=16.23$: Cas de l'écoulement à froid et de l'écoulement réactif pour une intensité de turbulence $I=12.5\%$.

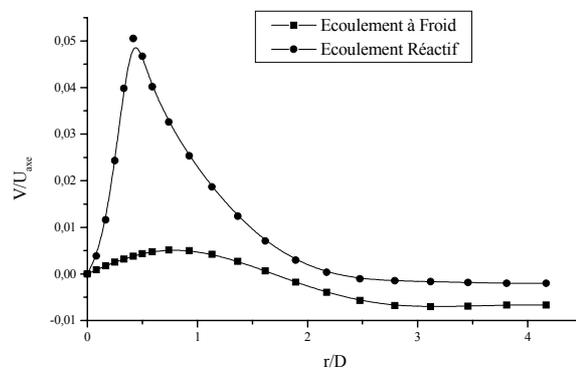


Fig. (V.15) : Profil radial de la composante radiale de la vitesse normalisée par la vitesse sur l'axe dans une station $Z/D=16.23$: Cas de l'écoulement à froid et de l'écoulement réactif, pour une intensité de turbulence $I=12.5\%$

• Les paramètres de la turbulence

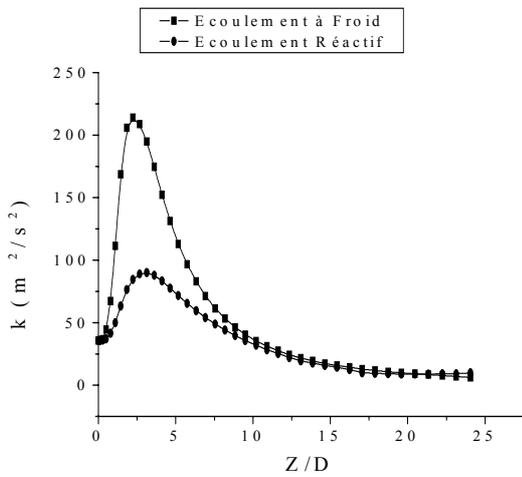


Fig. (V.16) : Profil axial de l'énergie cinétique turbulente : Cas de l'écoulement à froid et de l'écoulement réactif pour une intensité de turbulence I=7.3%.

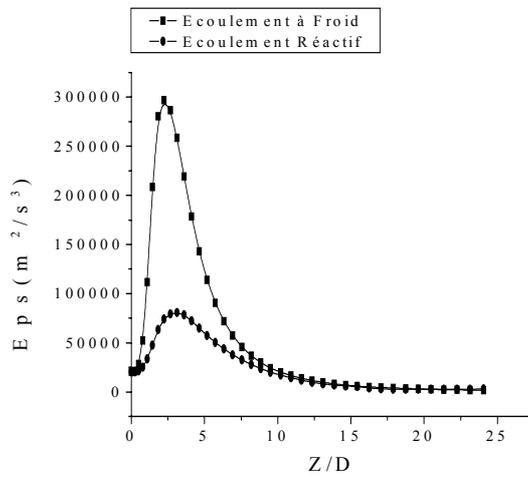


Fig. (V.17) : Profil axial du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente : Cas de l'écoulement à froid et de l'écoulement réactif pour une intensité de turbulence I=7.3%.

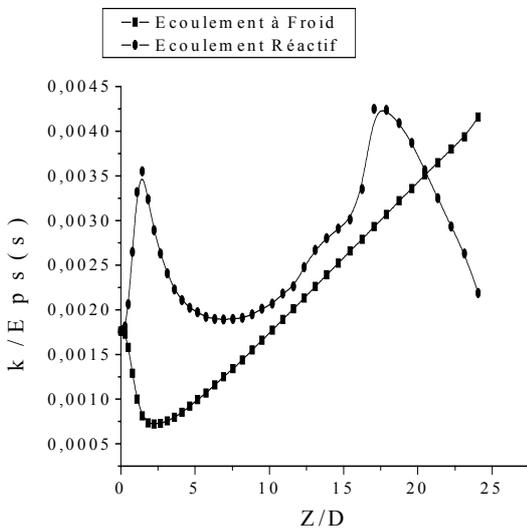


Fig. (V.18) : Profil axial de l'échelle caractéristique du temps de la turbulence: Cas de l'écoulement à froid et de l'écoulement réactif pour une intensité de turbulence I=7.3%.

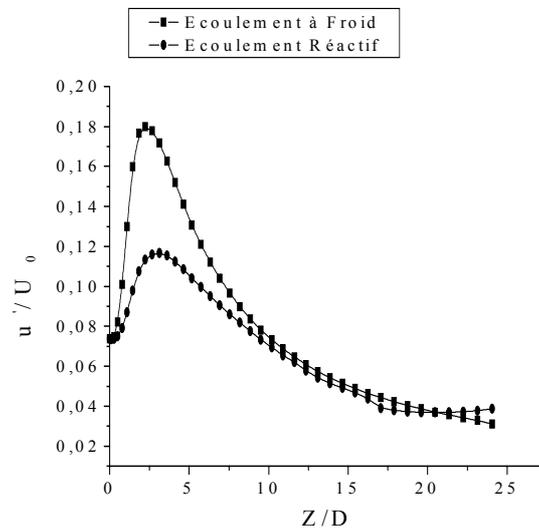


Fig. (V.19) : Profil axial de la fluctuation axiale de la vitesse normalisée par la vitesse à l'entrée du brûleur : Cas de l'écoulement à froid et de l'écoulement réactif pour une intensité de turbulence I=7.3%

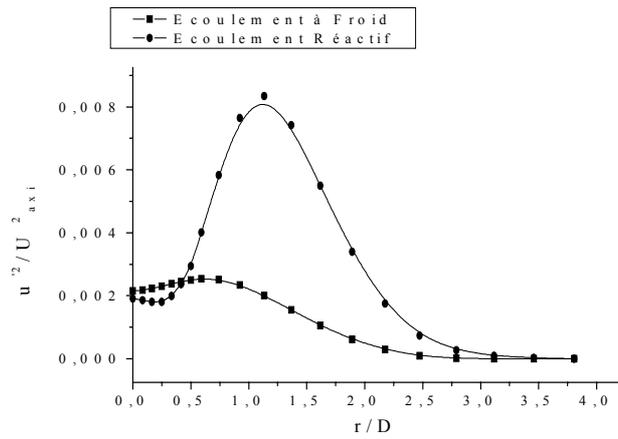


Fig. (V.20) : Profil radial de la fluctuation axiale au carré normalisée par la vitesse au carrée sur l'axe dans une station $Z/D= 16.23$: Cas de l'écoulement à froid et de l'écoulement réactif pour une intensité de turbulence $I=7.3\%$.

• Le champ de température dans la flamme

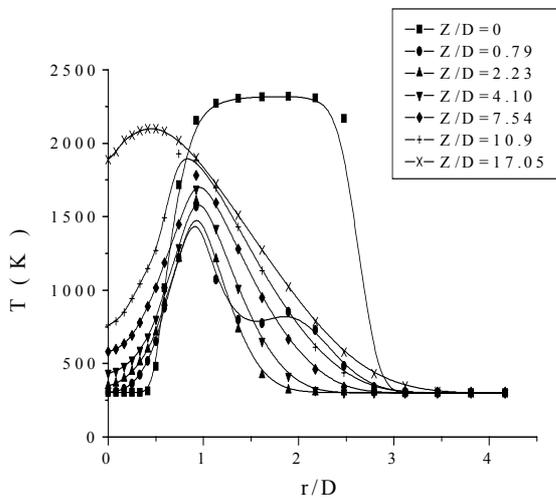


Fig. (V.21) : Profil radial de la température pour différentes stations dans le brûleur : Cas réactif, pour une intensité de turbulence $I=7.3\%$.

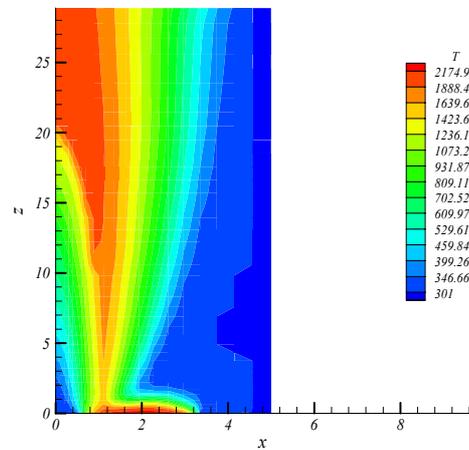


Fig. (V.22) : Contour de distribution de température dans la flamme pour une intensité de turbulence $I=7.3\%$.

• Le champ de la fraction massique du méthane

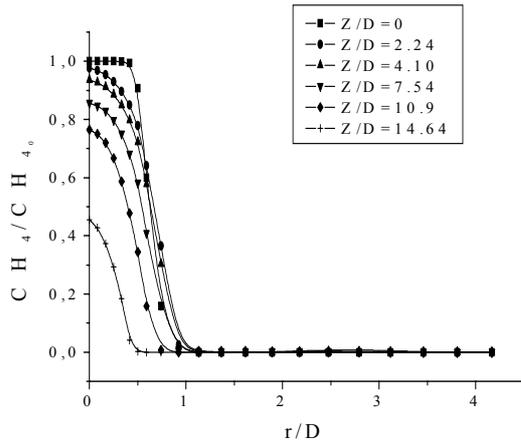


Fig. (V.23) : Profil radial de la fraction massique du méthane normalisée par la fraction massique du méthane à l'entrée du brûleur, pour différentes stations dans le brûleur pour une intensité de turbulence $I=7.3\%$.

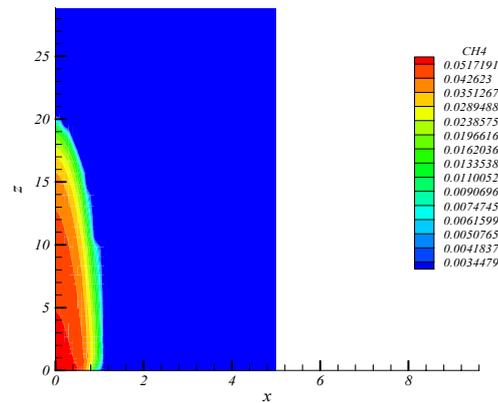


Fig. (V.24) : Contour de distribution de la fraction massique du méthane dans la flamme pour une intensité de turbulence $I=7.3\%$.

• Le champ de la fraction massique de l'eau

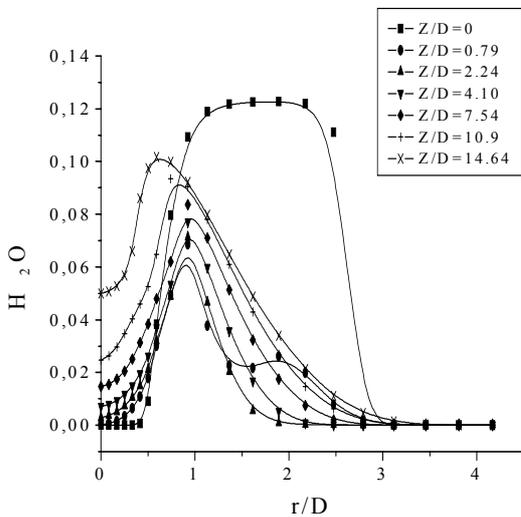


Fig. (V.25) : Profil radial de la fraction massique de l'eau pour différentes stations dans le brûleur pour une intensité de turbulence $I=7.3\%$.

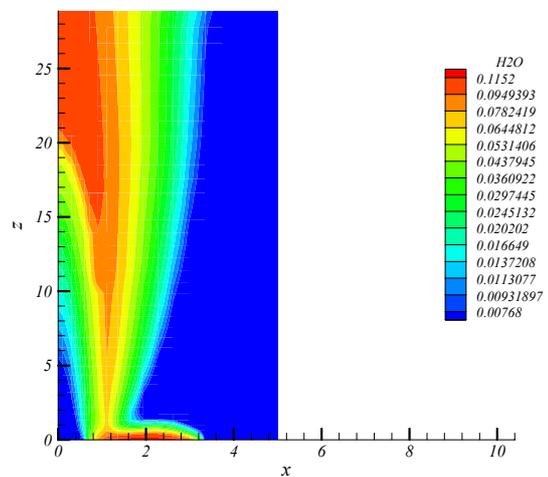


Fig. (V.26) : Contour de distribution de la fraction massique de l'eau dans la flamme pour une intensité de turbulence $I=7.3\%$.

• Le champ de la fraction massique de l'espèce intermédiaire

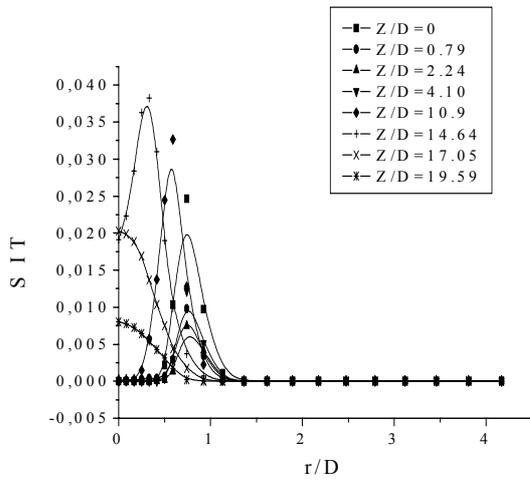


Fig. (V.27) : Profil radial de la fraction massique de l'espèce intermédiaire pour différentes stations dans le brûleur pour une intensité de turbulence I=7.3%.

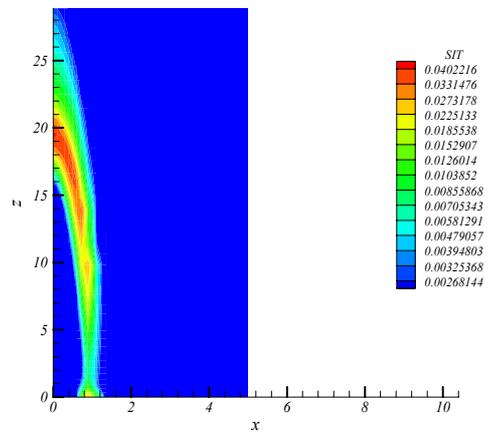


Fig. (V.28) : Contour de distribution de la fraction massique de l'espèce intermédiaire dans la flamme pour une intensité de turbulence I=7.3%.

• Les profils d'évolution de la variable de progrès

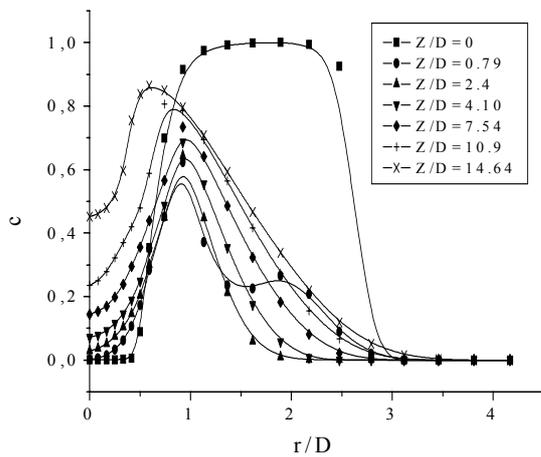


Fig. (V.29) : Profil radial de la variable de progrès c basée sur la température, pour différentes stations dans le brûleur pour une intensité de turbulence I=10.4%.

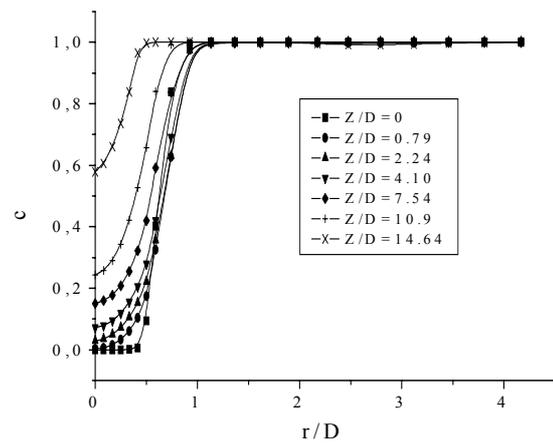


Fig. (V.30) : Profil radial de la variable de progrès c basée sur la concentration, pour différentes stations dans le brûleur pour une intensité de turbulence I=10.4%.

V.5.4 Effets de quelques paramètres sur l'aérothermochimie de la flamme

V.5.4.1 Effet du nombre de Reynolds du jet principal sur la flamme

- Sur le champ de la composante axiale de la vitesse moyenne

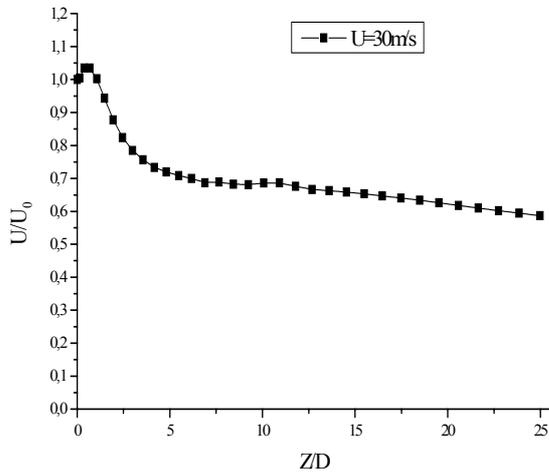


Fig. (V.31) : Profil axial de la composante axiale de la vitesse normalisée par la vitesse à l'entrée : Vitesse du jet U=30m/s, pour une intensité de turbulence I=7.3%.

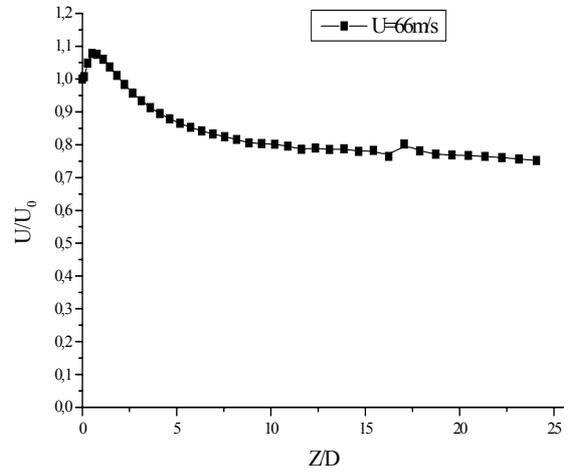


Fig. (V.32) : Profil axial de la composante axiale de la vitesse normalisée par la vitesse à l'entrée : Vitesse du jet U=66m/s, pour une intensité de turbulence I=7.3%.

- Sur la distribution de l'énergie cinétique turbulente

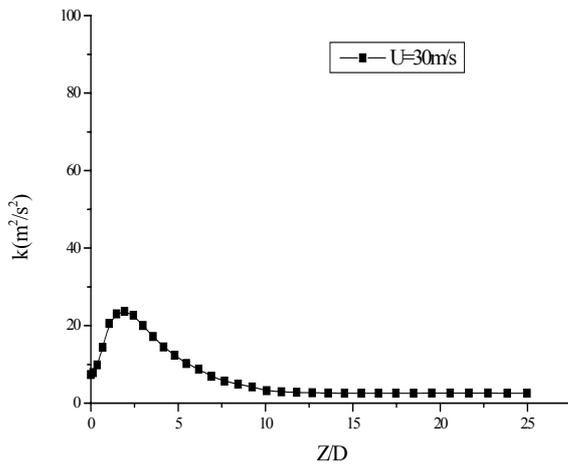


Fig. (V.33) : Profil axial de l'énergie cinétique turbulente: Vitesse du jet U=30m/s, pour une intensité de turbulence I=7.3%.

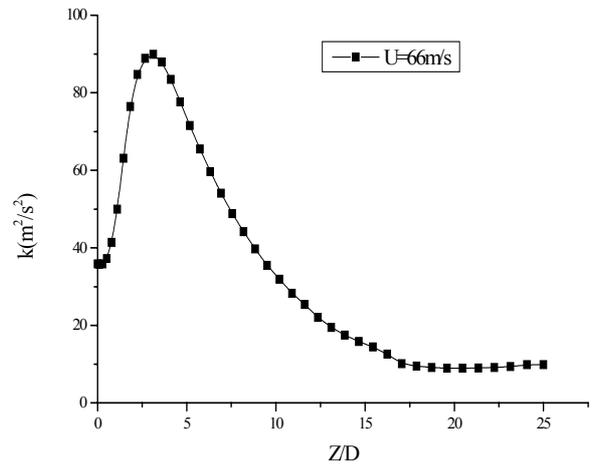


Fig. (V.34) : Profil axial de l'énergie cinétique turbulente: Vitesse du jet U=66m/s, pour une intensité de turbulence I=7.3%.

• Sur le champ de température

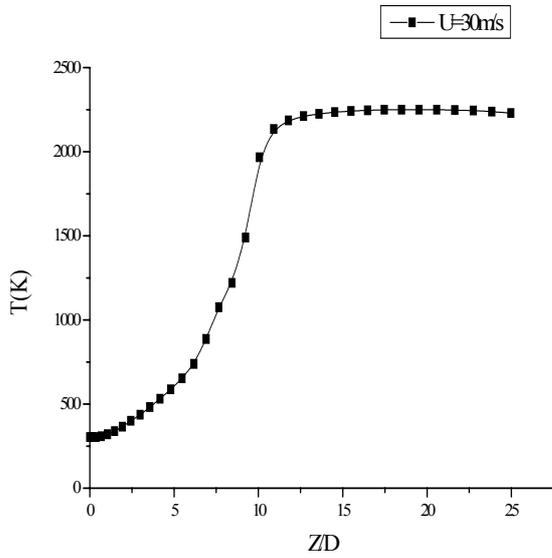


Fig. (V.35) : Profil axial de la température : Vitesse du jet $U=30\text{m/s}$, pour une intensité de turbulence $I=7.3\%$.

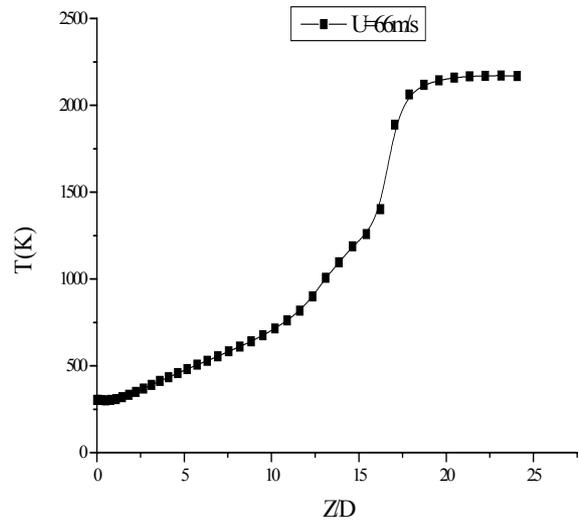


Fig. (V.36) : Profil axial de la température : Vitesse du jet $U=66\text{m/s}$, pour une intensité de turbulence $I=7.3\%$.

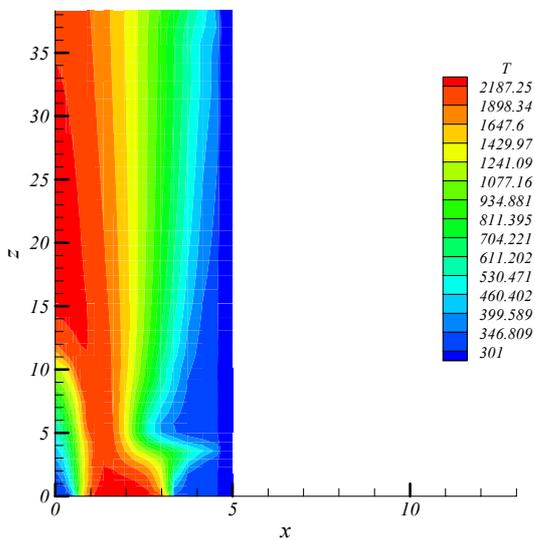


Fig. (V.37) : Champ de distribution de la température : Vitesse du jet $U=30\text{m/s}$, pour une intensité de turbulence $I=7.3\%$.

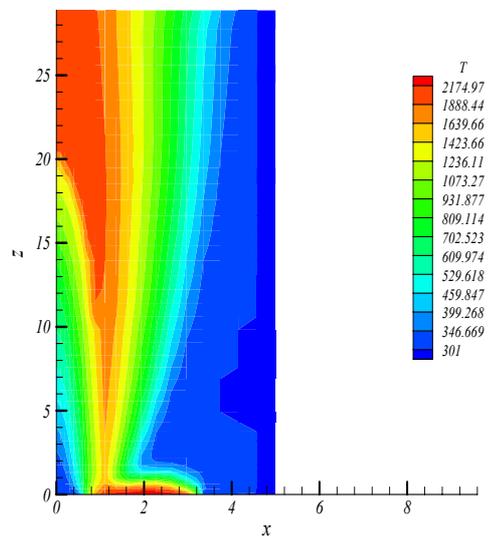


Fig. (V.38) : Champ de distribution de la température : Vitesse du jet $U=66\text{m/s}$, pour une intensité de turbulence $I=7.3\%$.

• Sur la distribution des fractions massiques du méthane

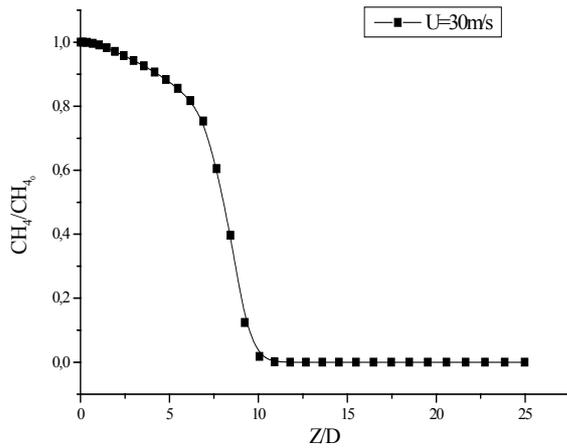


Fig. (V.39) : Profil axial de la fraction massique du méthane : Vitesse du jet U=30m/s, pour une intensité de turbulence I=7.3%.

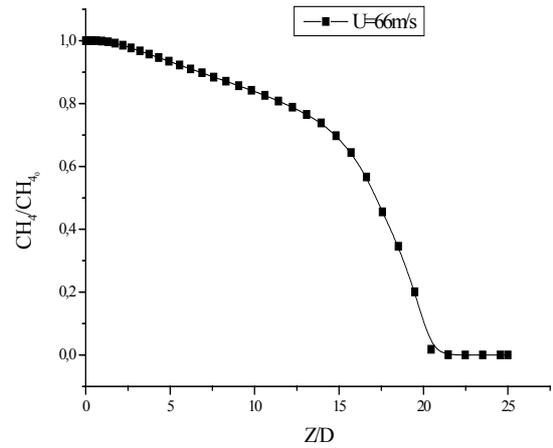


Fig. (V.40) : Profil axial de la fraction massique du méthane : Vitesse du jet U=66m/s, pour une intensité de turbulence I=7.3%.

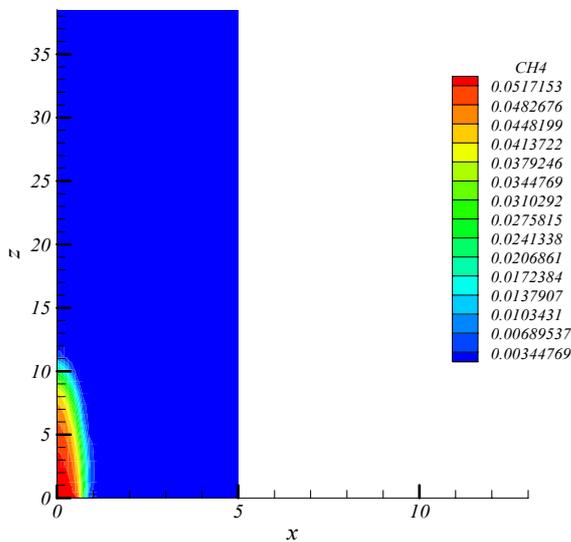


Fig. (V.41) : Champ de distribution de la fraction massique du méthane : Vitesse du jet U=30m/s, pour une intensité de turbulence I=7.3%.

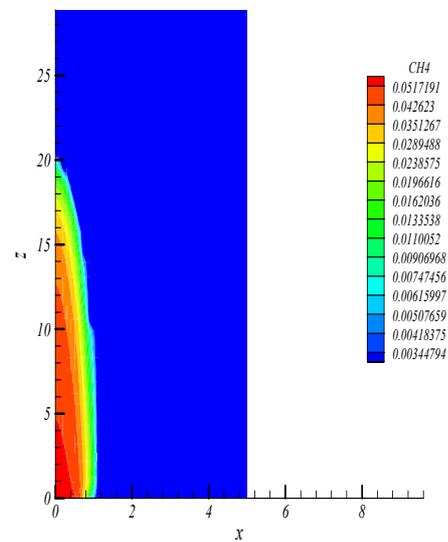


Fig. (V.42) : Champ de distribution de la fraction massique du méthane : Vitesse du jet U=66m/s, pour une intensité de turbulence I=7.3%.

V.5.4.2 Effet de la turbulence sur le champ de température dans la flamme

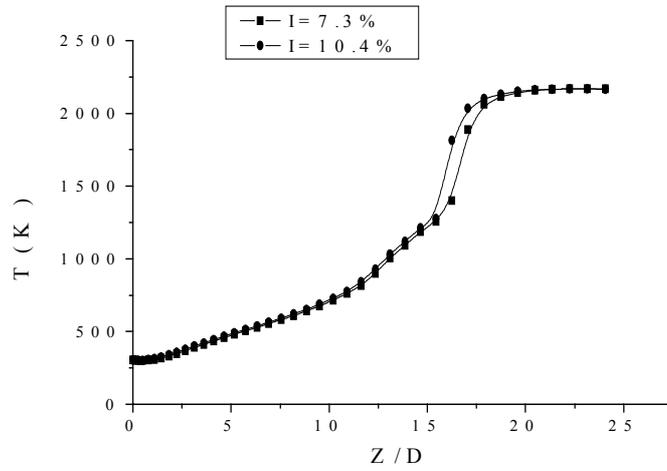


Fig. (V.43) : Effet de l'intensité de turbulence à l'entrée du brûleur sur le profil axial de la température dans la flamme.

V.5.4.3 Effet de la richesse du prémélange et de la turbulence sur la flamme

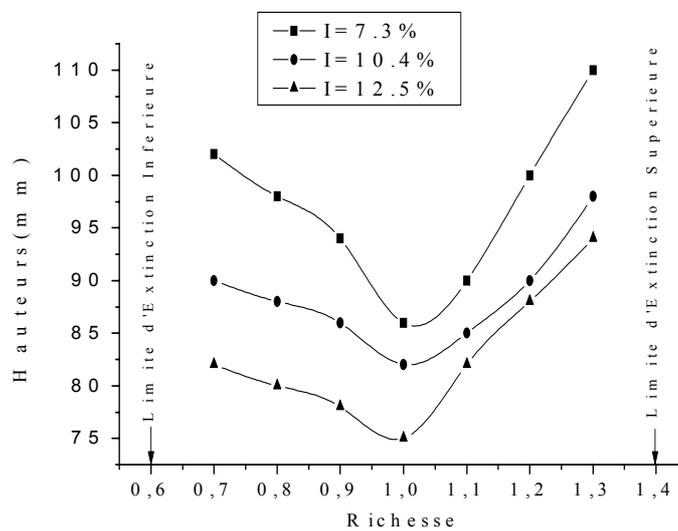


Fig. (V.44) : Effet de la richesse du prémélange et de l'intensité de turbulence à l'entrée du brûleur sur les longueurs des flammes.

Conclusion Générale

L'étude et la compréhension des processus de la combustion turbulente prémélangée passent en premier lieu par l'analyse fine de la structure des flammes turbulentes de prémélange. Le brûleur bunsen constitue un outil communément utilisé pour l'investigation détaillée de ce type de flamme.

Le présent travail a porté essentiellement sur la simulation numérique des phénomènes de l'aérothermochimie turbulente dans une flamme turbulente prémélangée, stabilisée par une flamme pilote dans un brûleur bunsen.

Une étude de la structure des champs d'écoulement (moyen et fluctuant) dans le cas d'un mélange réactif comparé à celui d'un mélange non réactif a montré que la réaction chimique, dans son interaction avec la turbulence tend toujours à modifier les champs de vitesse moyenne et fluctuante au sein de l'écoulement : La réaction chimique a tendance à amortir la turbulence, venant des gaz frais et à dilater les gaz au niveau du front de flamme.

Le temps caractéristique de la turbulence, $\frac{k}{\varepsilon}$ ou temps de retournement des grands tourbillons, devient plus grand dans le cas réactif sous l'effet de la réaction chimique, alors les tourbillons porteurs d'énergie cinétique turbulente deviennent moins énergétiques, ce qui est consistant avec l'amortissement noté plus haut.

Le schéma à deux étapes de Peters et Williams représente de manière réaliste le mécanisme réactionnel du méthane. Le processus de production/ destruction des espèces intermédiaires au sein de la flamme permet de déduire une forme plus représentative de la structure et comprendre par la suite sa morphologie interne.

A partir de l'étude paramétrique, on peut conclure que :

- L'augmentation de la vitesse d'entrée et donc du nombre de Reynolds du jet entraîne une longueur de flamme plus allongée.
- Une turbulence plus intense à l'entrée donne une hauteur de flamme plus courte puisque la vitesse turbulente de propagation du front de flamme augmente.
- Une hauteur de flamme plus allongée résulte si on impose à l'entrée du domaine un mélange plus riche ou plus pauvre par rapport au cas stoechiométrique.

Cette étude a permis la compréhension de certaines caractéristiques de la combustion turbulente prémélangée. Une reproduction réaliste des phénomènes complexes de l'aérothermochimie turbulente dans les flammes turbulentes prémélangées tels que : l'interaction du champ de l'écoulement avec la réaction chimique, la morphologie interne d'une flamme turbulente méthane-air, l'effet du nombre de Reynolds du jet, de la composition chimique et de l'intensité de la turbulence du jet à l'entrée sur les caractéristiques spatiales et chimiques de la flamme.

Bibliographie

[1] R.G.Abdel-Gayed, D.Bradley, M.Mcmahon (1979)

"Turbulent flame propagation in premixed gas: Theory and Experiment", In 17th Symposium (International) on Combustion, pp.245-254. The Combustion Institute.

[2] R.G.Abdel-Gayed, D. Bradley, M.Hamid, and M.Lawes (1984)

"Lewis number effects on turbulent burning velocity". In 20th Symposium (International) on Combustion, pp.505-512. The Combustion Institute.

[3] A.A.Amsden, P.J.O'rourke and T.D.Butler (1989)

"KIVA-II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays", Los Alamos Laboratory Report LA-11560-MS.

[4] C.Bailly, G.Compte-bellot (2003)

"Turbulence", Editions CNRS.

[5] J.B.Bell, M.S.Day, J.F.Grear (2002)

"Numerical Simulation of Premixed Turbulent Methane Combustion", Computing Sciences Directorate, Publications of Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California, USA.

[6] B.A.V.Bennett, J.Fielding, R.J.Mauro, M.B.Long, M.O.Smook (1999)

"A comparison of the structures of lean and rich axisymmetric laminar Bunsen flames: Application of level rectangular refinement solution-adaptive gridding", In Combustion Theory Modelling: 3, pp.657-685.

[7] R.G.Bill, JR.I.Namer, L.Talbot, R.K.Cheng and I.Robben (1981)

"Flame propagation in grid-induced turbulence", In Combustion and Flame; 1981, 43: pp.229-242.

[8] R.Borghi (1974)

"Chemical Calculations in Turbulent Flows". Application to CO containing turbojet flame. Adv.Geophys.18B, 349.

[9] R.Borghi, D.Dutoya (1981)

"On the scales of fluctuations in turbulent combustion", Colloquium on Turbulent-Combustion Interaction, Combustion Institute.

[10] R.Borghi (1984)

In *"Recent Advances in Aeronautical Sciences"*, (L.Bruno, C.Caki, Eds) Plenum N.Y.

[11] R.Borghi, M.Destriau, G.De Soete (1995)

"La Combustion et les Flammes" p47, Editions Technip.

[12] R.Borghi, Champion (2000)

"Modélisation des flammes", p186-192, Editions Technip.

[13] A.Boukhalfa (1988)

“*Contribution à l'étude de la structure scalaire dans les flammes turbulentes prémélangées du type Bunsen*” Thèse de Doctorat, Université d'Orléans.

[14] K.N.C.Bray (1979)

“*The interaction between turbulence and combustion*”, In 17th Symposium (International) on Combustion, In 17th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute.

[15] K., Bray (1980)

“*Turbulent flows with premixed reactants in turbulent reacting flows*”. In P.A. Libby and F.A. Williams (Ed.), *Topics in applied physics*, **44**: pp.115. New York: Springer Verlag.

[16] K.N.C, Bray, M. Champion and P.A.Libby (1988)

“*Mean reaction rates in premixed turbulent flames*”. In 22nd Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute. Pittsburgh, pp.763-769.

[17] M.S.Bouhahlib, B.Renou, B.Taupin, A.Boukhalfa, Z.Nemouchi (2002)

“*Etude expérimentale de la combustion turbulente de prémélange pour une flamme bunsen stabilisée : Analyse simultanée des images tomographiques et de la PIV*” CIMC'02 1^{er} Congrès International de Mécanique-Constantine, Université Mentouri, Algérie 14-16 Décembre.

[18] S.Candel, D.Thévenin, N.Darabiha, D.Veynante (1999)

“*Progress in Numerical Combustion*”, In *Combustion Science and Technology*, **149**: pp.297-337.

[19] M. Chekired, Z. Nemouchi, M. S. Bouhahlib (2004)

“*Etude Numérique de la combustion turbulente prémélangée d'un mélange CH₄/Air stabilisée par une flamme pilote dans un brûleur Bunsen*”, 4^{ème} Journées de Mécanique, Ecole Militaire Polytechnique JM-EMP'2004, 23,-24 Mars, Alger, ALGERIE.

[20] M. Chekired, Z. Nemouchi, M. S. Bouhahlib (2004)

“*Etude Numérique de l'influence de la richesse et de la turbulence sur une flamme turbulente de prémélange ch₄/air stabilisée par une flamme pilote dans un brûleur bunsen*”, 7^{ème} Congrès International de la physique énergétique, Centre Universitaire de Béchar, 03,05 Octobre, Béchar, ALGERIE.

[21] J.R.Christopher, J.H.Ferziger, S.H.El Tahry (1990)

“*Full numerical simulations and modelling of turbulent premixed flames*”, In 23rd Symposium (international) on Combustion. The Combustion Institute, pp.621-627.

[22] B.B.Dally, D.F.Fletcher and A.R.Masri (1998)

“*Flow in mixing fields of turbulent bluff-body jets and flames*”, In *Combustion Theory and Modelling-2*, pp.193-219.

[23] Dixon-Lewis and al (1985)

In 20th Symposium (International) on Combustion, The combustion Institute, Pittsburgh, pp.1893-1904.

[24] J.P. Dumont (1987)

“Etude de la structure spatiale de flammes turbulentes par tomographie laser”, Thèse de Doctorat, Université de Rouen (1987).

[25] L.Gagnepain (1998)

“Contribution à l’étude de la structure des flammes turbulentes prémélangées pauvres: Détermination des échelles caractéristiques des champs dynamiques et scalaires” Thèse de Doctorat, Université d’Orléans.

[26] C.Ghenai (1995)

“Etude de la structure et de la dynamique spatio-temporelle des fronts de flammes instantanés en combustion prémélangée”, Thèse de Doctorat, Université d’Orléans.

[27] I.Gökalp, G.M.L.Dumas, R.I.Ben-Aïm (1981)

“Temperature field measurements in premixed turbulent flame”, Eighteenth Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, pp.969-976.

[28] J.H.Chen, and I.M Hong (1998)

“Correlation of flame speed with stretch in turbulent premixed Methane/Air Flames”, Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, pp.819-826.

[29] P.Kalt (1998)

“Experimental Investigation of Turbulent Scalar Flames”, Phd Thesis, University of Sydney.

[30] Kuo (1986)

“Principles of Combustion”. New York : John Wiley.

[31] A.Liñán (1974)

“The asymptotic structure of counter-flow diffusion flames for large activation energy”. Acta Astronautica 1:1007-1039.

[32] A.Liñán, M. Rodriguez (1986)

In Combustion and Nonlinear Phenomena (P.Clavin, B.Larrouturou, and P.Pelcé, Eds.), Les éditions de Physique. Les Ulis, France, pp.51-69.

[33] U.Maas, S.B.Pope (1992)

“Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds”, In Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion, the Combustion Institute, pp.103-192.

[34] L. Mokhtari (2003)

“Etude numérique des écoulements réactifs turbulents dans une chambre de combustion d’un moteur Diesel”, Mémoire de Magister, Université de Constantine.

[358] M.Mulas, M.Talice (2002)

“Fully compressible simulation of low-speed premixed reacting flows”, Publications of Computational Fluid Dynamics Group, CRS4.

- [36] H.N.Najm, O.M.Knio, P.H.Paul, P.S.Wyckoff (1999)**
“Response of stoichiometric and rich premixed methane-air flames to unsteady strain rate and curvature”, In *Combustion Theory and Modelling*: **3**, pp.709-726.
- [37] M.Namazian M, L.Talbot, F.F.Robben (1989)**
 In 22 th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, pp.411-419.
- [38] D. Pavé (2002)**
“Contribution à l’étude de la structure des flammes turbulentes prémélangées pauvres de méthane-air”. Thèse de Doctorat, Université d’Orléans, (2002).
- [39] N.Peters, and J.(Eds) Warnatz (1982)**
“Numerical methods in laminar flame propagation”, Vieweg, Braunschweig (1982).
- [40] N.Peters (1985)**
 In *Numerical Simulation of Combustion Phenomena* (R.Glowinski, B. Larrouturou, and R. Temmam, Eds.), *Lecture Notes in Physics*, **241**, Springer-Verlag, pp.90-109.
- [41] N.Peters (1986)**
“Laminar flamelet model concepts in turbulent combustion”. In 21 st Symposium (International) on Combustion, pp.1231-1250.the Combustion Institute.
- [42] N.Peters, F.A.Williams (1987)**
“The asymptotic structure of stoichiometric methane-air flames”, In *Combustion and Flame* **68**: pp.185-207.
- [43] N. Peters (1991)**
“Reducing mechanism in reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for Methane-Air Flames”, *Lecture notes in Physics* 384, Springer Verlag, pp3-14.
- [44] N.Peters (1997)**
“Propagating thin reaction zone in premixed turbulent combustion”. In *combustion modelling workshop*, Sandia National Laboratories-Livermore.
- [45] T.Poinsot, D.Veynante, S.Candel (1990)**
“Diagrams of premixed turbulent combustion based on direct simulation”, Twenty-Third Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, pp613-619.
- [46] T.Poinsot, D.Veynante, and S.Candel (1991)**
“Quenching processes and premixes turbulent combustion diagrams”. *J.Fluid Mech.* **228**: pp561-606.
- [47] S.B.Pope (1990)**
“Computations of turbulent combustion : Progress and Challenges”. In *Proceedings of the 23rd Symposium (International) on Combustion*. The combustion Institute Pittsburgh.
- [48] B. Renou (1998)**
“Contribution à l’étude de la propagation d’une flamme de prémélange instationnaire dans un écoulement turbulent, influence du nombre de Lewis”, Thèse de Doctorat. Université de Rouen.

- [49] W.Roberts, J.Driscoll, M.Drake, and L.Goss (1993)**
 “*Images of the quenching of a flame by a vortex: to quantify regimes of turbulent combustion*”. In *Combustion and Flame*, pp58-94
- [50] D.B.Spalding (1972)**
 “*Mixing and Chemical reaction in steady confined turbulent flames*”. The Combustion Institute. pp649-657.
- [51] D.B.Spalding (1978)**
 “*Development of the Eddy-Break-Up model of turbulent combustion*”. The Combustion Institute; pp.1657-1663.
- [52] E.J.Stevens (1998)**
 “*Velocity and Scalar Measurements in Premixed Turbulent Reacting Flows*”. PhD Thesis, Churchill College.
- [53] L.Vervisch, D.Veynante (1987)**
 “*Combustion turbulente*”, Publications de l’*é*cole centrale de Paris.
- [54] B.D.Videtto, D.A.Santavicca (1990)**
 “*Flame –Turbulence interactions in a freely-propagating premixed flame*”. In *Combustion Science and Technology*, **70**: pp.47-73.
- [55] J.Warnatz (1984)**
Combustion Chemistry (W.C.Gardiner, Jr., Ed.), Springer Verlag, New York, pp.197-360.
- [56] F.A.Williams (1985)**
 In *Combustion Theory and modelling*, 2nd Ed, Benjamin Chmmings, Menloo park, 1985.
- [57] Williams, F. (1985)**
 “*Combustion Theory*” (2 ed.). Addison-Wesley.
- [58] T.Yanagi and Y.Mimura (1981)**
 “*Velocity-Temperature correlation in premixed flame*”, 18 th Symposium (International) on Combustion, Combustion Institute, pp.1031-1039.
- [59]S.L.Yang (2000)**
 “*Notes on the KIVA Software*”, Cours présentés à The Michigan University of Technology.

Abstract

The turbulent premixed flames can be found in a wide variety of thermal energy production systems. The burners operating with this type of flames are utilised for example in furnaces, industrial gas turbines combustion chambers or in those of aeronautical turbojets.

The need to understand the complicated structure of these flames has been our motivation to carry out a numerical study of the turbulent aerothermochemistry of CH₄ / Air premixed flames stabilised by a pilot flame in a Bunsen burner using (R.A.N.S) approach. An adapted version of Kiva II computer program to this type of application was tested.

The equations governing the phenomenon in this case were solved by the finite volume method of the type (A.L.E). The model of turbulence $k-\epsilon$ was used to close the equations which describe the flow field.

The two-step Peters-Williams mechanism reduced scheme was adopted for modelling the rates of the turbulent combustion terms in the transport equations of the chemical species.

Numerical simulations were performed for different Reynolds numbers of the jet and for different intensities of turbulence in the case of a non-reactive jet. After that, the behaviour of the obtained flow is compared with that of the reactive flow. Some properties of the complex phenomenon of interaction between turbulence and combustion in premixed flames are observed.

A comparison between the morphology of the obtained flow and that of the reactive flow case highlighted some properties of the complex phenomenon of interaction between turbulence and combustion in premixed flames.

The thermal and dynamic field as well as the distribution of the chemical species in the flame are examined. The results show the influence of turbulent intensity on temperature field in the flame.

The space characteristics of the flames are of a primordial importance for the design of combustion systems. The effects of the equivalence ratio of the mixture and the turbulence intensity on the considered flame have been considered.

Key Words: Turbulence, Combustion, Bunsen burner, Kiva II Computer program, Two Steps Peters-Williams Mechanism.

إن .

المحارق التي تعمل وفق هذا الصنف من الشعلات تجد تطبيقاتها المباشرة في الأفران الصناعية ، في غرف الإحتراق الخاصة بالتوربينات الغازية أو في بؤر إعادة التحميه لمحركات الطائرات .

إن فهم البنية المعقدة لهذه الشعلات يعتبر ذو أهمية بالغة . مما دعانا في هذا العمل لإخراج دراسة عددية بمقاربة رانس للأيروكيمياء الحرارية المضطربة للشعلات مسبقه المزج ميثان/هواء، المستقرة بواسطة شعلة قائدة في محرق من نوع بنزن. إن البرنامج الحسابي KIVA II المعدل والمطور لمحاكاة الجريان المتفاعل المضطرب قد جرب على هذا النوع من التطبيقات.

المعادلات التي تصف الظاهرة المدروسة قد تم حلها بواسطة طريقة الحجوم المنتهية من نوع ALE ولغلق المعادلات التي تصف إيروديناميكا الجريان تم إستعمال نموذج $k-\epsilon$.

في هذا العمل تم تبني حركية كيميائية مفصلة لوصف الآلية التفاعلية للميثان والمتركرة على مخطط مقلص إلى خطوتين لبيترز وويليامس ، من أجل نمذجة الحدود ذات الطبيعة الكيميائية في معادلات نقل الأفراد الكيميائية. كخطوة أولى تمت المحاكاة العددية على نفث بارد، من أجل قيم مختلفة لعدد رينولدس المتعلق بالنفث الرئيسي في المحرق ، ومن أجل شدات متغيرة للإضطراب في مدخل المحرق.

إن مقارنة تركيبة الجريان المتحصل عليها مع تلك الخاصة بجريان متفاعل قد بينت بعض خصائص الظواهر المعقدة للعلاقة بين الإضطراب والإحتراق الشعلات المسبقة المزج .

إن الخصائص الفضائية للشعلات ذات أهمية بالغة لتصميم أنظمة الإحتراق. في هذا الصدد أجريت دراسة دقيقة حول تأثير سرعة التفث الرئيسي وغنى المزيج الغازي وشدة الإضطراب على طول الشعلة المدروسة .

كلمات مفتاحية : إضطراب ، إحتراق ، محرق بنزن، البرنامج الحسابي KIVA II ، آلية بيتر وويليامس ذات

Résumé

Les flammes turbulentes de prémélanges, caractérisent aujourd'hui un bon nombre de systèmes de production d'énergie thermique. Les brûleurs fonctionnant avec ce type de flammes, trouvent essentiellement leurs applications dans les fours industriels, les chambres de combustion des turbines à gaz, ou bien dans les foyers de réchauffe des turboréacteurs aéronautiques.

La compréhension de la structure complexe de ces flammes nous motivé le présent travail qui est une étude numérique par l'approche (R.A.N.S), de l'aérothermochimie turbulente des flammes prémélangées CH₄/Air stabilisées par une flamme pilote dans un brûleur bunsen. Une version modifiée du code de calcul KIVA2 et adapté à la combustion turbulente dans les brûleurs été utilisée.

Les équations régissant le phénomène dans les deux cas ont été résolues par la méthode des volumes finis du type (A.L.E) et le modèle de turbulence k-ε a été utilisé pour fermer les équations qui décrivent l' aérodynamique dans l'écoulement.

Une cinétique chimique pour décrire le mécanisme réactionnel du méthane, basée sur le schéma réduit à deux étapes de Peters et Williams a été adoptée pour la modélisation des termes d'origine chimique dans les équations de transport des espèces chimiques.

Dans un premier temps, la structure du jet en l'absence de réactions chimiques a été étudiée pour différents nombres de Reynolds et intensités de turbulence à l'entrée du domaine.

Ensuite, une comparaison de la morphologie des écoulements obtenus avec celle de l'écoulement réactif, a mis en évidence quelques propriétés du phénomène complexe d'interaction entre la turbulence et la combustion dans les flammes de prémélange.

Les caractéristiques spatiales des flammes sont d'une importance primordiale pour la conception des systèmes de combustion. Dans cet optique, une investigation détaillée a été faite sur les effets de la vitesse à la sortie du jet, la richesse du mélange et de l'intensité de turbulence sur la taille de la flamme.

Mots-clés : *Turbulence, Combustion, brûleur bunsen, Le code de calcul Kiva II, Le mécanisme à deux étapes de Peters-Williams.*