



République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



UNIVERSITE HASSIBA BENBOUALI DE CHLEF

FACULTE DE TECHNOLOGIE

DEPARTEMENT DE GENIE MECANIQUE

THESE

Pour l'obtention du grade de

DOCTEUR EN-SCIENCES

SPECIALITE : GENIE MECANIQUE

Présentée par :

MOKHTAR DIDOUCHE Abdelkader

Contribution à la modélisation des flammes de prémélange partiel : Quantification du taux de dégagement de chaleur et du NO thermique

Soutenue le :

Devant le jury composé de :

Bettahar A.	Professeur des universités	Président – UHB Chlef
Bouaaziz M.N.	Professeur des universités	Examineur – U Y.F. Médéa
Bounif A.	Professeur des universités	Examineur – CU A.Z. Relizane
Lounis M.	Professeur des universités	Examineur – U.D.B Khemiss Miliana
Benarous A.	Maitre de conférences (A)	Directeur de thèse – UHB Chlef
Loukarfi L.	Professeur des universités	Co-directeur de thèse–UHB Chlef

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier les responsables et les ingénieurs mécaniciens de l'entreprise du ciment de Chlef, pour m'avoir accueilli et aidé au sein du département technique.

J'aimerais également remercier M. Larbi Loukarfi, Professeur à l'Université Hassiba Benbouali de Chlef, à qui j'adresse mes remerciements les plus forts pour m'avoir mené et guidé sur le chemin de la recherche, pour sa qualité scientifique dont l'étendue pluridisciplinaire est pour moi le graal d'une carrière professionnelle, pour son soutien et sa permanente disponibilité.

Je tiens à remercier M. Ahmed Bettahar, Professeur à l'Université Hassiba Benbouali de Chlef pour avoir accepté de présider la soutenance de cette thèse malgré ces obligations.

Je remercie également très sincèrement M. Bouaaziz Mohamed Nadjib, Professeur à l'Université Dr Yahia Farès de Médéa, pour avoir fait partie du jury d'expertise de cette thèse.

Que Messieurs, Abdelhamid Bounif, Professeur au Centre Universitaire Ahmed Zabana de Relizane et Mourad Lounis, Professeur à l'Université Djilali Bounaama de Khemiss Miliana, puissent trouver ici toute la gratitude que je souhaite leur exprimer pour les efforts qu'ils ont développé pour examiner et expertiser le travail de cette thèse.

J'exprime mes sincères remerciements à M. Abdellah Benarous, Maître de conférences à l'Université Hassiba Benbouali de Chlef, pour son assistance et pour toutes les discussions fructueuses qu'on a entamé ensemble.

Un grand merci aussi à ma femme qui m'a supporté et soutenu pendant ces années de travail.

ملخص :

النماذج الفيزياء-رياضية المتوفرة والمستعملة لأجل التقاط الظواهر الحركية الهوائية وتداخلاتها مع الكيمياء, مثبتة حول نوعي الشعل إما المنتشرة أو الممزوجة. إلا انه, هذه الصور من الشعل لا تمثل إلا حالات حدية لشعل حقيقية تنتشر في صورة مزيج جزئي. هذا مما يشكك في صلاحية هذه النماذج فيما يخص تمثيل الحالات الحقيقية للشعل.

في هذا السياق, العمل المنجز من خلال هذه الأطروحة يمثل مساهمة حول النمذجة و التحليل لمجموعة من الشعل المضطربة والمنتشرة على شكل خليط أو مزيج جزئي. ثلاثة صور مختلفة تمت دراستها, تحليلها و مناقشتها بالنسبة للمعطيات المتعلقة بدرجة الحرارة, الكتلة الجزئية للوقود و غاز أحادي أكسيد النيتروجين (NO).

في القسم الأول نقترح تقنية لتخفيض غاز (NO) المنبعث من احتراق الميثان مع الهواء داخل فرن للاسمنت بحجم حقيقي لمؤسسة صناعة الاسمنت و مشتقاته (م.ص.أ.م, الشلف, الجزائر). انتباها خاصا وجه نحو العلاقة بين مقدار التلوث و فعالية الاحتراق. مقدار التلوث المتوقع من خلال المحاكاة يظهر مبالغة بمقدار 5% بالمقارنة بين القياسات المنجزة في الموقع. كما تم تبين انه بالإمكان تخفيض نسبة التلوث بنسبة 30% باستعمال تقنية الحقن على هيئة دوامة للهواء الأولي الذي يغذي الفرن.

القسم الثاني هو عبارة عن عرض و تقييم للنموذج LW-P حول صورة لشعلة مضطربة بحجم مخبري مثبتته في خارج حارق في سيلان بتركيبية متغيرة (حارق ICARE, أريون, فرنسا). النتائج المتحصل عليها سمحت بالتقاط حسن لقلب جهد السيلان الغير المحترق مع زيادة في التقييم بمقدار 7% مع المعطيات التجريبية. زيادة في التقييم بمقدار 10% لارتفاع و سمك الشعلة المضطرب بالنسبة للقياسات, تم الحصول عليها من خلال محاكاة رقمية عن طريق البرنامج Code_Saturne®.

الصورة الثالثة المدروسة هي عبارة عن شعلة لمزيج (Sandia-D) غنية ومثبتة بشعلة مرشدة فقيرة وبتيار هواء مخفف. النموذج للمزيج الجزئي لبرنامج Ansys-Fluent® للتعبير عن التداخل بين ظاهرتي الاضطراب و التفاعلات الكيميائية, بحيث سمح هذا النموذج بإعطاء حل مبدئي للمحاكاة المنجزة عن طريق نموذج بدالة كثافة الاحتمال منقولة, وهذا الأخير صالح لجميع أشكال الاحتراق, كما انه تم تكميم المزيج على المستوى الغير المرئي بنموذج ملائم. أظهرت نتائج المحاكاة للمجال الحراري و تركيز أحادي أكسيد الكربون نقص تقييم بمقدار 10% بالمقارنة مع التجربة.

الكلمات الاستدلالية :

مزيج جزئي, اضطراب, نسبة التفاعل, دالة كثافة الاحتمال (Pdf), نموذج LW-P, إصدارات ملوثة

Abstract

Physical models used to reproduce interactions between aerodynamics and chemistry phenomena are only validated for diffusion and premixed flames. However, these configurations represent only limited cases of realistic flames which develop in partially premixing. This makes the validity of those models questionable regarding the description of realistic situations.

In this context, the present thesis consists in an attempt to model and analyze of several partially premixed flames. Three configurations are studied and discussed with respect to temperature, fuel mass fraction and NO distribution.

In the first section, we suggest a technique for NO emissions reducing regarding a methane-air industrial burner, mounted on a full-scale cement furnace (ECDE, Chlef, Algeria). Here, emphasis was made on the relationship between combustion efficiency and nitrogen oxide emissions. The predicted pollution rate was overestimated by 5% compared with in situ measurements. It was also shown that the emission rate can be reduced by almost 30% if a swirling injection is ensured for the primary air stream.

The second part was a pilot-stabilized turbulent premixed flame, subjected to a variable equivalence ratio (ICARE burner, Orleans, France). The results of the simulation predict quite well the potential core of the flow by 7% compared with experimental data. Moreover, the visible flame length was overestimated by 10% for the mean brush. The calculations were performed by means of the Code_SaturneTM solver.

The third configuration consists of a rich premixed flame (Sandia-D) stabilized by both a poor pilot flame and a dilution air stream. The partially premixed model with a presumed Pdf of the Ansys-FluentTM solver is used to express the chemistry-turbulence interactions, to provide an initial solution to the simulation performed by the Pdf transported, which is believed covering all combustion regimes. The small scales mixing terms were determined by the Interaction by the Exchange with the Mean (IEM) model and solved using the Monte Carlo method. The results regarding temperature field and CO mass fraction show a slight underestimation of almost 5%, compared to Sandia laboratory measurements.

Keywords:

Partially premixing, Turbulence, Reaction rates, Probability density function (Pdf), LW-P model, Pollutants emissions.

Résumé

Les modèles physico-mathématiques utilisés pour reproduire les phénomènes aérodynamiques et leurs interactions avec la chimie, sont validés sur des configurations de flammes de diffusion ou de prémélange. Cependant, ces configurations ne représentent que des cas limites, des flammes réelles, qui se développent en prémélange partiel. Ceci met en cause la validité de modèles cités quant à la description des situations réalistes.

Dans ce contexte, le présent projet de thèse consiste en une contribution vers la modélisation et l'analyse d'un ensemble de configurations de flammes turbulentes partiellement prémélangées. Trois différentes configurations sont présentées, analysées et discutées, par rapport aux données relatives à la température, à la fraction massique du combustible et au monoxyde d'azote (NO).

Dans la première partie, on propose une technique de réduction des émissions des oxydes d'azote (NO_x) dans le cas d'une combustion turbulente de type méthane-air, au sein du brûleur (à échelle réelle) d'un four de cimenterie (ECDE, Chlef, Algérie). Une attention particulière est prêtée à la relation entre le taux d'émission et l'efficacité de la combustion. Le taux de pollution prédits par la simulation est surestimé de 5% par rapport aux mesures effectuées sur site. Il est aussi montré, que le niveau de pollution peut être réduit d'environ 28 % en utilisant une technique d'injection viciée (swirlée), pour l'air primaire qui alimente le four.

La seconde partie, constitue la validation du modèle de LibbyWillimas-Poitiers (LW-P) sur une configuration de flamme turbulente (à échelle de laboratoire) stabilisée en sortie d'un brûleur dans un écoulement à richesse variable (brûleur ICARE, Orléans, France). Les résultats de la simulation permettent de bien capter le cœur potentiel de l'écoulement non réactif avec une surestimation de 7% par rapport aux données expérimentales. Une surestimation de 10% de la hauteur et l'épaisseur apparente de la flamme turbulente par rapport aux mesures, a pu être obtenue via une simulation numérique par le biais du solveur Code_Saturne[®].

La troisième configuration consiste en une flamme de prémélange (SANDIA-D) riche stabilisée par une flamme pilote pauvre et par un courant d'air de dilution.

Le modèle de prémélange partiel à Pdf présumée du solveur Ansys-Fluent[®] est utilisé pour exprimer l'interaction chimie-turbulence, permettant de donner une solution initiale à la simulation effectuée par le modèle à Pdf transportée, sensé couvrir tout les régimes de combustion. Une fermeture des termes de micro-mélange par le modèle IEM (Interaction by Exchange with the Mean) est associée à une résolution Lagrangienne de type Monte-Carlo. Les résultats de la simulation pour le champ thermique et la concentration du CO, montrent une sous-estimation de 5% par rapport aux mesures effectuées aux laboratoires Sandia.

Mots clefs : Prémélange partiel, Turbulence, Taux de réaction, Fonction densité de probabilité (Pdf), Modèle LW-P, Emissions polluantes.

Table des matières

Table des matières	
Nomenclature	
Introduction.....	1
Chapitre 1 : Généralités sur la combustion	
1.1. Besoins en combustion.....	5
1.2. Différents domaines d'application.....	5
1.3. Régimes des flammes.....	6
1.3.1. Flamme laminaire de prémélange	7
1.3.2. Flamme laminaire de diffusion.....	9
1.3.3. Flamme partiellement prémélangée	11
1.4. Notions de cinétique chimique.....	12
1.4.1. Equation de vitesse de la réaction	13
1.4.2. Les schémas globaux à une seule réaction.....	15
1.4.3. Les schémas globaux à deux réactions	15
1.4.4. Les schémas semi globaux à plusieurs étapes	15
1.4.5. Les schémas quasi globaux	16
1.4.6. Les mécanismes cinétiques détaillés	17
1.5. Emissions polluantes.....	17
1.5.1. Types et définitions	17
1.5.2. Impacts sur l'écosystème	19
1.5.3. Techniques de contrôle et de réduction	21
1.5.3.1. Recirculation des gaz d'échappement (<i>EGR</i>).....	21
1.5.3.2. Refroidissement de la flamme.....	22
1.5.3.3. Réduction catalytique sélective (<i>SCR</i>).....	22

1.5.3.4. Réduction sélective non catalytique (<i>SNCR</i>).....	23
1.5.3.5. Réduction par viciage (swirl) des jets.....	24
Chapitre 2 : La modélisation en combustion turbulente	
2.1. Cartographie des flammes et application.....	27
2.2. La simulation numérique en combustion turbulente.....	29
2.3. Les équations moyennes des bilans	31
2.4. Modélisation de la turbulence	34
2.4.1. Modèle $k - \varepsilon$ et variantes.....	34
2.4.2. Modèle $k - \omega$	38
2.5. Interaction entre chimie et turbulence.....	39
2.5.1. Régimes des flammes turbulentes de prémélange.....	40
2.5.2. Régimes des flammes turbulentes non prémélangées.....	45
2.6. Modélisation du taux de réaction moyen.....	47
2.6.1. Modèles à chimie infiniment rapide	47
a. Modèle “Eddy Break-Up”	47
b. Modèle Bray-Moss-Libby	48
c. Modèle de macro-mélange (<i>Eddy-dissipation</i>)	51
2.6.2. Modèles à chimie non infiniment rapide.....	52
a. Modèles à fonction densité de probabilité (Pdf).....	53
b. Modèles à flammelettes.....	54
c. Modèles Lagrangiens	57
d. Modèle de Libby-Williams.....	57
Chapitre 3 : Le modèle LW-P	
3.1. Chimie de combustion.....	63
3.2. Espace des Compositions	63
3.3. Paramètres de la Pdf.....	65
3.4. Comportement de la Pdf.....	68

3.5. Expression des flux turbulents	70
3.5.1. Termes dus à la réaction chimique	71
3.5.2. Termes dus à la diffusion	71
3.5.3. Termes de dissipation scalaire	72
Chapitre 4 : Modélisation numérique /Cas applicatifs	
4.1. <i>Cas applicatif N°1 : Flamme issue d'un brûleur industriel</i>	78
4.1.1. Points de fonctionnement.....	78
4.1.2. Modélisation de l'aérothermochimie	80
4.2. <i>Cas applicatif N°2 : flamme de prémélange stabilisée par une flamme pilote</i>	93
4.2.1. Description du montage et modélisation géométrique	94
4.2.2. Maillage et conditions aux limites.....	96
4.3. <i>Cas applicatif N°3 : la flamme Sandia-D</i>	109
4.3.1. Description du montage et points de fonctionnement.....	109
4.3.2. Calculs par simulation	114
Conclusions et perspectives.....	135
Bibliographie	138

Nomenclature

Lettres romaines

A, B	Constantes du model de Magnussen	
c	Variable de progrèsson	
$C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}, C_{3\varepsilon}, C_{\mu}$	Constantes du modèle de turbulence	
c_{pi}	Chaleur massique à pression constante de l'espèce "i"	kJ/kg
E_a	Energie d'activation	kJ/m^2s
F	Carburant	
g'	Partie fluctuante d'une variable	
\tilde{g}	Valeur moyenne (au sens de Favre) d'une variable pondéré par la masse volumique	
\bar{g}	Valeur moyenne (au sens de Reynolds) d'un variable	
h^0	Enthalpie de formation	kJ/kg
h	Enthalpie massique	kJ/kg
k^*	Constante de vitesse de réaction	
k	Énergie cinétique turbulente	m^2/s^2
l_t	Longueur intégrale de turbulence	m
m_a	Masse d'air	kg
m_c	Masse de carburant	kg
m_i	Masse molaire de l'espèce chimique "i"	kg/mol
M_i	Poids moléculaire de l'espèce chimique "i"	$kg/kgmol$
n	Nombre total d'espèces dans le mélange	
O	Oxydant	
p	pression partielle du gaz	Pa
P	Pression du mélange	Pa
R	Constante molaire des gaz	$J/mol.K$
s	Rapport du mélange stœchiométrique	
S_0	Nombre de swirl	
S_L	Vitesse de propagation de la flamme laminaire	m/s
S_T	Vitesse de propagation de la flamme turbulente	m/s
S_{ij}	Tenseur de contraintes	
T	Température statique	K
t	Temps	s
u	Vecteur vitesse	m/s
$\tilde{\omega}, \omega, \overset{o}{W}_i$	Taux de réaction de l'espèce chimique "i"	mol/s
x_α	Composante (selon le vecteur α) du vecteur position	
Y_i	Fraction massique de l'espèce chimique "i"	

Symboles grecques

δ_{th}	Epaisseur thermique de la flamme	<i>m</i>
δ_L	Epaisseur laminaire de la flamme	<i>m</i>
ϕ	Variable thermochimique ou Richesse	
λ_t	Conductivité thermique turbulente	<i>w/mK</i>
ξ	Fraction de mélange	
ε	Taux de dissipation de l'énergie cinétique de turbulence	<i>m²/s³</i>
μ_t	Viscosité turbulente	<i>kg/ms</i>
μ	Viscosité dynamique	<i>kg/ms</i>
χ	Invariant du tenseur de la contrainte	
Γ_t	Coefficient de diffusion massique turbulente	<i>m²/s</i>
ω	Taux de dissipation spécifique	<i>1/s</i>
ω_{ij}	Tenseur de rotation	
ν_O, ν_F	Coefficients stœchiométriques	
τ	Facteur d'expansion thermique	
τ_c	Temps caractéristique chimique	<i>s</i>
τ_t	Temps caractéristique de la turbulence	<i>s</i>
ρ	Masse volumique	<i>kg/m³</i>

Indices

<i>a</i>	Air
α	Composante d'une variable
<i>b</i>	Gaz brûlés
<i>c</i>	Carburant
<i>P</i>	Produit
<i>Pc</i>	Correction au sens de Pope
<i>u</i>	Gaz frais

Acronymes

<i>CFD</i>	Computational Fluid Dynamics
<i>CEA</i>	Chemical Equilibrium and Applications
<i>DNS</i>	Direct numerical simulation
<i>ECDE</i>	Entreprise des Ciments et ces Dérivées d'Echlef
<i>EBU</i>	Eddy Break-Up
<i>EGR</i>	Exhaust Gas Recirculation
<i>GES</i>	Gaz à effet de serre
<i>LES</i>	Large Eddy Simulation
<i>OTDF</i>	Overall Temperature Distribution Factor
<i>pdf</i>	Probability density function
<i>PRG</i>	Potentiel de réchauffement global
<i>RANS</i>	Reynolds Average Navier-Stokes equations
<i>RSM</i>	Reynolds Stress Model
<i>SCR</i>	Selective Catalytic Reduction

<i>SNCR</i>	Selective Non Catalytic Reduction
<i>TFA</i>	Température de Flamme Adiabatique
<i>TNF</i>	Turbulent Non-premixed Flames

Nombres sans dimension

Da	Nombre de Damköhler	$Da = \tau_T/\tau_c$
Ka	Nombre de Karloviz	$Ka = \tau_c/\tau_\eta$
Le	Nombre de Lewis	$Le = \lambda/(\rho c_p D)$
Ma	Nombre de Mach	$Ma = u/a$
Pr	Nombre de Prandlt	$Pr = \mu c_p/\lambda$
Re	Nombre de Reynolds	$Re = \rho u L/\mu$
Sc	Nombre de Schmidt	$Sc = \mu/(\rho D)$

Introduction générale

L'accumulation dans l'atmosphère de certains gaz par les activités industrielles est susceptible d'entraîner d'importantes modifications du climat à l'échelle locale mais aussi planétaire (destruction de la couche d'ozone par les oxydes d'azote et réchauffement global par le dioxyde de carbone). En effet, la qualité de l'air n'a rien d'immuable dans le temps et dans l'espace car sa composition chimique résulte d'équilibres complexes entre les apports permanents de polluants émis par les sources fixes et mobiles d'une part et les mécanismes d'élimination naturelle et de recyclage d'autre part. Dans ce cadre général les industriels du secteur de l'énergie et des transports cherchent à perfectionner les procédés de combustion dans le but de réduire leur consommation en combustible et en même temps de limiter leur production d'espèces polluantes. Ces objectifs, qui représentent des enjeux majeurs pour l'énergétique, nécessitent des recherches sur les aspects fondamentaux et technologiques.

Ces recherches consistent en particulier à étudier les couplages entre les différents phénomènes physiques intervenant dans les chambres de combustion, sachant que dans les installations industrielles, comme les fours ou les turbines à gaz la combustion est fortement affectée par le caractère turbulent des écoulements. Cette interaction entre combustion et turbulence est étudiée depuis le début du siècle dernier et donne lieu aujourd'hui à de nombreux sujets de recherche sur les trois aspects expérimental, théorique et numérique. Depuis quelques décennies, par le développement des modèles et des techniques de calcul et de la puissance des ordinateurs, les études numériques de la combustion turbulente prennent une place de plus en plus importante. En particulier, de telles études ont conduit la plupart des grands groupes industriels et les organismes de recherche à développer des logiciels permettant la simulation numérique de ces écoulements dans des configurations plus ou moins complexes tant du point de vue de la géométrie des systèmes envisagés que des processus pris en compte. La simulation numérique de configurations industrielles telles que la combustion dans les fours, ne peut se faire aujourd'hui encore qu'en

modélisant une partie des phénomènes physiques mis en jeu. Ces travaux de modélisation sont nécessaires du fait de la grande disparité des échelles des différents phénomènes physiques en regard de celles qui caractérisent les configurations considérées. La simulation directe de l'ensemble de ces phénomènes, c'est-à-dire sans modéliser une partie d'entre eux, pour une géométrie de chambre de combustion réelle demanderait un temps de calcul et une quantité de mémoire prohibitifs pour les calculateurs d'aujourd'hui. Les modèles qu'il faut développer pour permettre le calcul des quantités moyennes ou filtrées, doivent néanmoins tenir compte des différents mécanismes physiques qui peuvent se produire aux petites échelles dans ces chambres de combustion et notamment du mécanisme de mélange des gaz en présence. En particulier, les mélanges réactifs combustible-air au sein des chambres de combustion sont rarement homogènes : la richesse des mélanges y est variable en temps et en espace et la combustion conduit à la propagation de flammes dans des prémélanges partiels et non parfaits.

Dans ce contexte, le présent travail constitue une contribution à la modélisation des flammes de prémélange partiel par deux modèles différentes. Ces modèles utilisent d'une part une fraction de mélange et d'autre part une variable d'avancement des réactions chimiques pour déterminer l'état thermo-chimique de la flamme.

Notre objectif étant aussi, de proposer une technique de dépollution aérodynamique pour un cas réel de flamme, celle de l'entreprise de ciment d'Echlef (ECDE) et ce, sans altérer le processus de fabrication du ciment.

Le premier chapitre de ce mémoire présente des généralités sur la combustion et leurs différents domaines d'utilisation, suivi par une définition de la notion cinétique chimique et les trois régimes de flammes nécessaires à la modélisation. Ce chapitre est clôturé par une vue globale sur les techniques de contrôle et de réduction de la pollution utilisées par le secteur industriel.

Le second chapitre est consacré à l'introduction des bases théoriques et des différentes approches phénoménologiques des mécanismes physiques mis en jeu dans la combustion turbulente. Une attention particulière a été apportée sur les flammes de

prémélange partiel en montrant un ensemble de modèles utilisés pour la fermeture des équations de transport d'espèces.

Dans le troisième chapitre de ce mémoire le modèle LW-P est décrit précisément. Pour cela les différents termes des équations de transport résolues sont fermés en utilisant une fonction densité de probabilité faite de n distributions de Dirac. Nous décrivons en particulier la méthode de fermeture des termes de dissipation apparaissant dans les équations de transport pour les seconds moments des quantités scalaires, fraction de mélange et variable d'avancement. Ces termes sont très importants car leur évolution est intimement liée à celle du taux de réaction chimique.

Le quatrième et dernier chapitre de ce mémoire présente les simulations numériques effectuées sur trois configurations différentes par le biais du code saturne et le solveur Ansys-Fluent. Les résultats des simulations numériques sont comparés aux mesures obtenues sur trois dispositifs expérimentaux différents. Tout d'abord, le modèle de macro mélange EDM est utilisé avec une modélisation appropriée de la turbulence pour simuler l'écoulement de la configuration du four de l'ECDE. Dans un deuxième temps, le modèle algébrique LW-P est testé pour calculer un écoulement où les fluctuations de richesse sont bien plus importantes. Pour cela nous avons choisi le dispositif expérimental ICARE d'Orléans. Enfin, le modèle de prémélange partiel par une Pdf présumée et transportée est validé en utilisant la configuration de la flamme Sandia D.

Chapitre 1

Généralités sur la combustion

Avant toute présentation des utilisations possibles de la combustion, il est primordial de définir ce qu'est la combustion. De Soete [1] définit la combustion comme un ensemble de réactions chimiques, de type bien spécifique, constituant globalement une oxydation exothermique. Ces réactions pouvant entrer en interaction avec d'autres phénomènes physiques, occasionnant ainsi des processus physico-chimiques complexes, dans différents régimes de combustion (par exemple : auto-allumage, déflagration, détonation ...).

Au cours de ce chapitre, nous aborderons tout d'abord le thème de la combustion par une description de ses différentes utilisations dans les sociétés. Nous verrons que nous pouvons définir plusieurs types de flammes et la notion cinétique chimique, avant de décrire les problématiques liées aux émissions polluantes. Un bref rappel sur les techniques de contrôle et de réduction des émissions polluantes clôturera ce premier chapitre.

1.1. Besoins en combustion

L'utilisation intensive des hydrocarbures a été un élément déterminant dans la maîtrise de l'énergie et l'essor des transports, deux phénomènes clés du siècle dernier. Ces différentes motivations de brûler un combustible sont maintenant de plus en plus questionnées, voire décriées [2].

Cette évolution est bien sûr affectée à la fois par l'émergence d'une conscience environnementale et par les variations, structurellement du prix des hydrocarbures pour le consommateur. Il n'en reste pas moins qu'une partie essentielle des sociétés actuelles repose sur l'emploi (massif) de la combustion comme mode de transformation d'énergie. De plus, même les études les plus récentes font état de la poursuite d'un recours majoritaire à la combustion au moins jusqu'à l'horizon 2030 [3] dans les secteurs industriels, de l'automobile et du transport aérien, qui sont la cible de questionnements écologiques légitimes.

1.2. Différents domaines d'application

Nous essayons ici de répertorier l'ensemble des utilisations possibles de la combustion.

– Secteur des transports

L'accomplissement de la maîtrise de la combustion au cours des 150 dernières années a permis le développement exceptionnel du secteur des transports. La démocratisation de l'automobile en est l'exemple parfait : on compte à ce jour plus de 760 millions de véhicules

particuliers à travers le monde [2]. Les flux de marchandises et de personnes entre les continents s'effectuent eux par voie maritime ou aérienne. Les modes de combustion, les tailles caractéristiques des machines ainsi que les carburants utilisés sont très variés.

– **Secteur de l'énergie**

Un secteur d'activité important, si ce n'est fondamental, de la combustion est celui de la production énergétique (sous forme de chaleur ou d'électricité). Les sociétés reposent sur l'utilisation massive de l'électricité, or cette électricité est essentiellement générée à l'aide d'installations comme les turbines à gaz et autres centrales thermiques brûlant fioul ou charbon. L'exemplarité énergétique, concernant les émissions de CO₂, d'un pays est une exception à l'échelle mondiale ; ainsi en 2005, seuls trois pays indiquaient une part de production d'électricité par voie nucléaire supérieure à 50 % : la Lituanie, la Slovaquie et la Belgique [4]. Ce même rapport fait état d'une production d'électricité de 16930 TW.h en 2005 (avec une part du nucléaire limitée à 15,5 %) et d'une projection basse à l'horizon 2030 de 25000 TW.h. Dans les deux cas, la part du nucléaire reste inférieure à 15 %. Les énergies vertes (hydroélectricité, solaire, éolien, biomasse) ne sont pas encore prêtes à prendre complètement le relai à l'échelle du globe : assurant actuellement 18 % de la fourniture d'électricité, on leur prêté un objectif de 30 %, au mieux, en 2030 [4].

– **Utilisation industrielle**

Le secteur industriel est également un éminent consommateur d'énergie. Les usines de sidérurgie, de métallurgie, de transformation ou production (fabriquant verre, ciment, papier, nylon ...) nécessitent à la fois électricité et chaleur pour leur fonctionnement.

1.3. Régimes des flammes

On distingue de manière habituelle deux régimes canoniques de flamme : la flamme de prémélange et la flamme de diffusion (aussi appelée flamme non prémélangée). Cette dernière expression illustre parfaitement un principe fondamental de la flamme de diffusion : carburant et oxydant sont injectés dans la flamme par des flux séparés. De leur rencontre, et de leur mélange, découleront la structure et la géométrie de la flamme. On ne peut définir de vitesse de déplacement d'une flamme de diffusion : on dit que la flamme de diffusion n'est pas propagative. Elle est contrôlée par la qualité du mélange air carburant, c'est-à-dire par les mécanismes de diffusion à l'échelle moléculaire. Dans le cas de la flamme prémélangée,

carburant et oxydant sont mélangés intimement initialement, dans les gaz frais : le front de flamme a ici sa propre dynamique (i.e. la vitesse de flamme) pour consommer ces gaz frais.

1.3.1. Flamme laminaire de prémélange

On s'intéresse ici à la description d'une flamme de prémélange laminaire monodimensionnelle telle qu'illustrée sur la figure 1.1 :

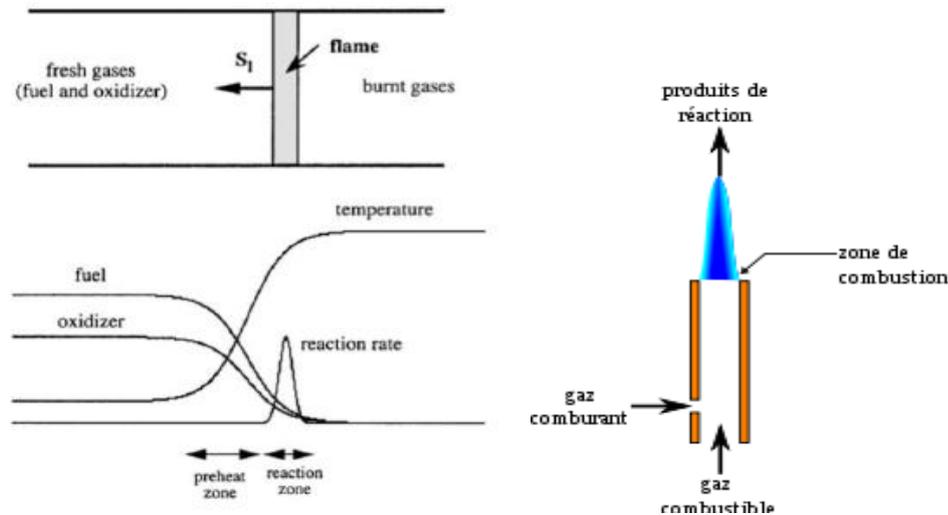


Figure 1.1: Schéma descriptif d'une flamme prémélangée [3]

On distingue (sur la partie supérieure du schéma) à gauche les gaz frais, où carburant et oxydant sont prémélangés, et à droite la zone des gaz brûlés. Le rapport de masse volumique de part et d'autre du front de flamme peut atteindre 5 à 7 pour des flammes d'hydrocarbures [2]. La vitesse de flamme laminaire (notée S_L) est dirigée de la droite vers la gauche, soit dans le sens de propagation de la flamme. La partie inférieure du schéma renseigne sur la structure interne de la flamme : la zone de réaction (gouvernée par la chimie et l'intensité du dégagement de chaleur) est précédée d'une zone dite de préchauffage (dominée par les effets de diffusion des espèces). Au sein de la zone de préchauffage d'une flamme méthane-air, on retrouve les espèces comme HCO et CH₂O formées grâce à l'apport de H (espèce très diffusive). On note ensuite un pic du radical OH, qui caractérise la zone de réaction où CO et H sont définitivement consommés pour former H₂O et CO₂ : cela correspond à la zone de dégagement de chaleur. Des informations complémentaires sur les dynamiques propres à la

flamme de prémélange (S_L , l'épaisseur de la flamme laminaire δ_L , le nombre de Damköhler Da, \dots) sont disponibles dans la littérature [5].

Pour décrire l'évolution des processus de réactions cinétiques, on fait souvent appel au paramètre de contrôle suivant : la variable d'avancement c . Celle-ci peut être définie à l'aide de grandeurs comme la température ou bien certaines fractions massiques d'espèces. Une alternative définition en utilisant l'enthalpie sensible a été aussi proposé dans la littérature [6]. Si l'on utilise les notations « unburnt » et « burnt » pour caractériser les zones de gaz frais et de gaz brûlés respectivement, on peut écrire [3]:

$$c = \frac{T - T_u}{T_b - T_u} \quad (1.1)$$

où c varie entre 0 et 1. A noter que si le domaine spatial d'existence de la flamme de prémélange est suffisamment étendu, les conditions « burnt » correspondent aux conditions d'équilibre chimique (où $T_b \equiv TFA$), en terme de fractions d'espèces et de température (si l'on considère le cas d'étude adiabatique). Exception faite des flammes riches, où on observe une croissance monotone de c le long de la flamme de prémélange, à la différence de la richesse qui elle, reste constante. La richesse ϕ d'un mélange se définit ainsi [5]:

$$\phi = \frac{sY_{F,0}}{Y_{O,0}} \quad (1.2)$$

où s est le rapport de mélange stœchiométrique (s vaut 4 pour une flamme méthane-air) et $Y_{F,0}$ et $Y_{O,0}$ sont respectivement, les fractions massiques initiales du carburant F et d'oxydant O . Si l'on étudie la réaction globale $\nu_F F + \nu_O O \rightarrow \nu_P P$, avec ν_F et ν_O coefficients molaires stœchiométriques, le rapport s s'écrit [5]:

$$s = \frac{\nu_O M_O}{\nu_F M_F} \quad (1.3)$$

Cette richesse ϕ est égale à l'unité dans un mélange stœchiométrique, est supérieure à 1 en mélange riche (en carburant donc) et est inférieure à 1 dans les flammes dites pauvres. La richesse d'une flamme de prémélange est une grandeur fondamentale, influant notamment sur les vitesses de flamme et épaisseurs thermiques caractéristiques :

$$S_L(\phi) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_c dx}{\rho u} \quad (1.4)$$

$$\delta_{th}(\phi) = \frac{T_b - T_u}{\left| \frac{dT}{dx} \right|_{max}}$$

1.3.2. Flamme laminaire de diffusion

Cette section est consacrée à la présentation de la flamme laminaire de diffusion, où les injections de carburant et oxydant sont réalisées dans des flux séparés. Cette caractéristique principale a un avantage singulier en terme de sécurité pour les installations énergétiques : il ne peut en effet se produire de flamme sans rencontre des réactifs. Une représentation de la structure d'une flamme non-prémélangée à contre-courant est donnée en figure 1.2. On y distingue l'arrivée de carburant à gauche, de l'arrivée d'oxydant à droite.

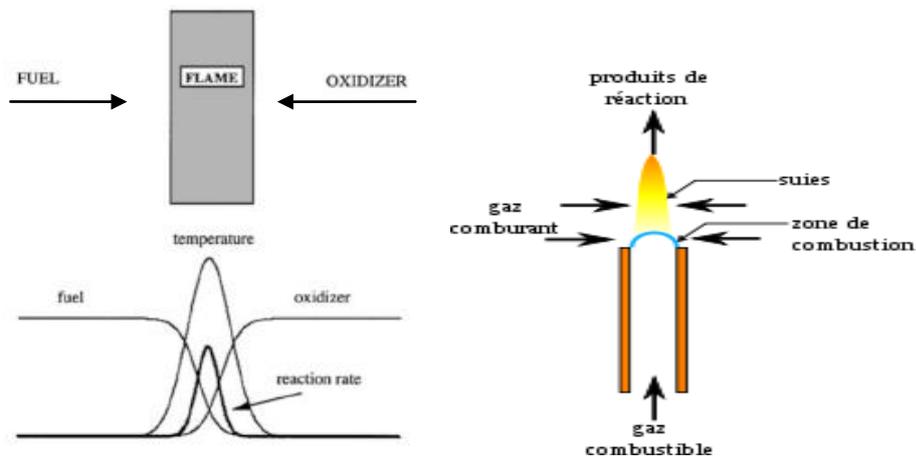


Figure 1.2: Schéma de principe de la flamme de diffusion [2]

A la différence de la flamme prémélangée, la flamme de diffusion ne bénéficie d'aucun mécanisme d'auto-propagation : elle est essentiellement contrôlée par l'intensité du mélange. La problématique principale est alors la mise en contact des espèces réactives, fortement liée dans une configuration réelle, à l'aérodynamique et la géométrie du foyer. Dans un cas de flamme laminaire à contre-courant, les paramètres de contrôle sont les vitesses d'injection des flux respectifs. Si l'on revient à l'étude de la structure interne de la flamme, il est primordial d'introduire la notion de fraction de mélange (notée ζ). Cette variable de Schwab-Zeldovich (hypothèses : réaction globale, $Le=1$, $Ma < 0.3$, parois adiabatiques et imperméables aux

espèces) est obtenue par opération algébrique sur les fractions massiques d'oxydant et de carburant : ϕ est un scalaire passif, qui caractérise le mélange. La fraction de mélange ξ suit une équation de transport du type convection-diffusion, sans aucun terme source (cas monophasique). Son profil évolue entre 0 et 1 selon que l'on se situe dans l'écoulement d'air ou de carburant pur, correspondant à la définition suivante [5]:

$$\xi = \frac{\phi \frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{\phi + 1} \quad (1.5)$$

où $Y_{F,0}$ et $Y_{O,0}$ sont les fractions massiques de carburant et d'oxydant dans les flux initiaux, tandis que Y_F et Y_O sont les fractions massiques rencontrées localement. L'analyse de Burke et Schumann [7] indique que dans le cas limite d'une combustion infiniment rapide, la position de flamme se trouve à la condition stœchiométrique ξ_{st} où $Y_F \times Y_O = 0$: les réactifs réagissent dès leur rencontre. De manière analogue à ϕ , quand $\xi < \xi_{st}$, on se situe du côté pauvre, et respectivement du côté riche lorsque $\xi > \xi_{st}$. On peut écrire [2]:

$$\xi_{st} = \frac{Y_{O,0}}{Y_{O,0} + sY_{F,0}} \quad (1.6)$$

ce qui introduit une autre formulation de ϕ :

$$\phi = \frac{\xi}{1 - \xi} \times \frac{1 - \xi_{st}}{\xi_{st}} \quad (1.7)$$

Nous pouvons également présenter une façon différente de caractériser la richesse d'un mélange avec la notion de *FAR* (pour *Fuel Air Ratio*), largement utilisée par les motoristes :

$$FAR = \frac{m_F}{m_O} = \frac{\xi}{1 - \xi} \quad (1.8)$$

où m_F et m_O sont les masses introduites dans le système. On a directement la relation $FAR_{st} = \xi_{st}/(1 - \xi_{st})$.

1.3.3. Flamme partiellement prémélangée

En effet, les deux configurations de flamme précédentes, ne représentent que la manière la plus fréquemment utilisée pour exposer les problématiques liées à la combustion. Cependant, pour expliquer certains phénomènes, il a fallu introduire un nouveau régime de combustion qui s'impose comme une "passerelle" entre les deux régimes classiques. Ce nouveau régime appelé partiellement prémélangé s'est avéré être présent dans un très grand nombre de situations.

Le régime partiellement prémélangé est établi lorsque les deux régimes de combustion classiques, prémélangé et non prémélangé, coexistent. Ce type de combustion peut avoir lieu si l'écoulement est composé d'un mélange riche adjacent à un mélange pauvre. Les conditions de gradient de richesse ainsi créées permettent d'obtenir des flammes partiellement prémélangées (figure 1.3.a). Ces flammes ont à la fois les propriétés des flammes prémélangées et des flammes de diffusion. L'intérêt de ce type de flamme est certain puisqu'on bénéficie des avantages de chaque régime de combustion en termes de sécurité, de contrôle des émissions et de stabilité de flamme.

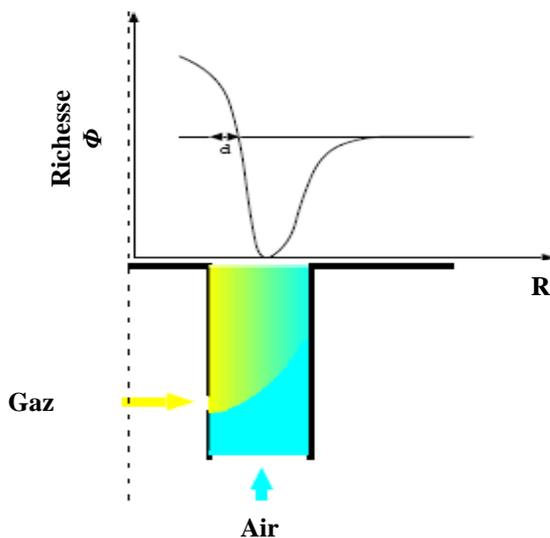


Figure 1.3.a : Prémélange partiel (richesse variable)

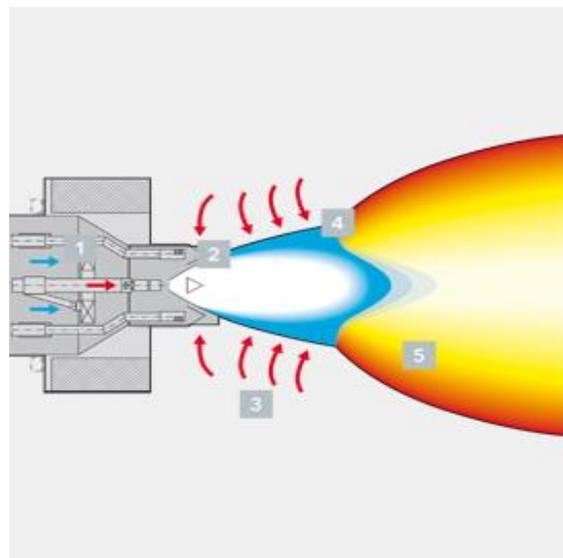


Figure 1.3.b : Prémélange partiel (dilution par gaz brûlés)

Dans de nombreuses configurations propices aux flammes de diffusion, une zone de mélange entre les réactifs peut avoir lieu avant la zone de réaction [8]. Dans ces conditions, il s'agit de flammes partiellement prémélangées (figure 1.3.b).

Le régime de flamme partiellement prémélangé se retrouve également lors des situations d'écoulements très perturbés où les flammes subissent des extinctions locales. Le réallumage de régions de flamme localement éteintes se fait souvent dans des conditions de flammes partiellement prémélangées [8].

Dans la pratique, ces flammes sont présentes dans de nombreux systèmes de combustion allant des fours industriels aux brûleurs à gaz domestiques, mais également dans les systèmes de combustion mettant en œuvre des sprays de combustible, pour lesquels l'évaporation des gouttes combinée à un mauvais mélange permet d'obtenir des gradients de richesse importants.

Le tableau 1.1 présente une description globale des principaux avantages et inconvénients des modes de combustion, tels qu'ils sont.

TAB. 1.1 : Caractéristiques globales des trois modes de combustion [8]

Mode de combustion	Avantages	Inconvénients
Prémélangé	Peu polluant (en régime pauvre)	Instabilité de combustion, stockage du mélange
Non prémélangé	Stabilité de la flamme, stockage du carburant en dehors des limites de flammabilité	Production d'oxyde d'azote
Partiellement prémélangé	Peu polluant (en régime pauvre), stockage du carburant en dehors des limites de flammabilité	Instabilité de combustion, hétérogénéités de mélange

1.4. Notions de cinétique chimique

Dans la combustion d'un hydrocarbure, on peut distinguer trois stades qui diffèrent par les produits formés et le bilan énergétique local [9]. La Première étape où l'hydrocarbure initial se dégrade en hydrocarbures intermédiaires oléfiniques plus légers, ces intermédiaires majoritaires, pour des alcanes jusqu'en C_{18} , sont respectivement l'éthylène puis le propène. Le

bilan énergétique de cette première étape est sensiblement nul, du fait de la compensation entre l'exothermicité de la réaction d'oxydation de l'hydrogène et l'endothermicité des réactions de pyrolyse [9]. Durant le second stade, on assiste à une oxydation des oléfines intermédiaires avec production de monoxyde de carbone, cette étape est faiblement exothermique, en fin, le monoxyde de carbone s'oxyde en dioxyde de carbone, d'une manière fortement exothermique et produit la majeure partie de l'énergie totale libérée par la combustion.

1.4.1. Equation de vitesse de la réaction

Pour modéliser l'oxydation des hydrocarbures, il est apparu nécessaire d'adopter une manière uniforme pour exprimer la vitesse de réaction en fonction de la température. On utilise généralement la formulation modifiée de l'expression d'*Arrhenius* :

$$k^* = A_I * T^b * \exp(-E_a/RT) \quad (1.14)$$

, où k^* représente la constante de vitesse, A_I le facteur de fréquence, E_a l'énergie d'activation, R la constante des gaz parfaits et T la température en degrés Kelvin. L'exposant de T est nécessaire pour rendre compte de l'écart observé par rapport à la loi d'*Arrhenius* classique si l'on considère un large domaine de température.

L'évaluation des vitesses de réaction est difficile et longue et n'a pas été menée à bien dans certains cas, ce qui conduit à employer dans les mécanismes de combustion des données cinétiques incertaines.

L'utilisation de la théorie de l'état de transition et autres méthodes théoriques peuvent donner de bonnes évaluations des vitesses des réactions élémentaires et les études de modélisation peuvent fournir des valeurs estimées des vitesses, en particulier pour des réactions très difficiles à étudier expérimentalement.

Un autre élément essentiel pour les études de modélisation est la connaissance précise des caractéristiques thermochimiques des espèces intervenant dans le mécanisme (chaleur de formation, chaleur spécifique, entropie, enthalpie) ce qui malheureusement n'est pas toujours possible, en particulier pour les espèces intermédiaires fugaces. Ainsi, il peut arriver que les modèles soient incapables de refléter l'expérience, à moins d'assigner à des constantes de vitesses bien établies des valeurs très différentes de celles connues. Invariablement, ceci indique que le mécanisme proposé est incomplet ou bien qu'une partie du mécanisme est

incorrecte ou bien encore que le modèle physique est erroné [9]. Outre la dépendance de la température, la constante de vitesse peut dépendre de la pression ; c'est un phénomène encore plus difficile à exprimer.

Les mécanismes d'oxydation des hydrocarbures ont une structure hiérarchisée schématisée dans la Figure 1.3 ci-dessous :

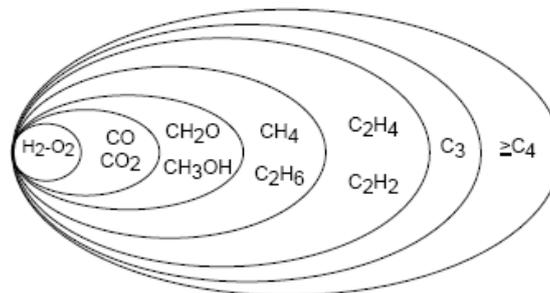


Figure 1.3: Structure hiérarchisée des mécanismes détaillés [9].

On distingue les mécanismes dits de basse température et de haute température. A titre d'exemple, le mécanisme ci-dessous à haute température est donné pour le méthane (Figure 1.4) :

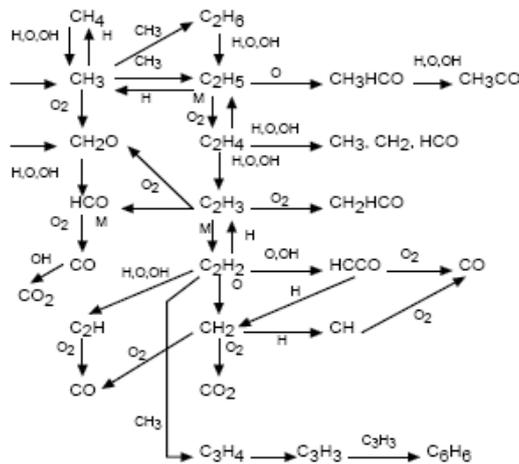
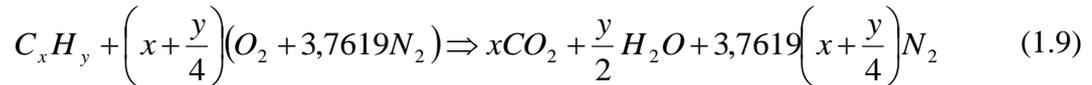


Figure 1.4 : Oxydation du méthane [9]

1.4.2. Les schémas globaux à une seule réaction

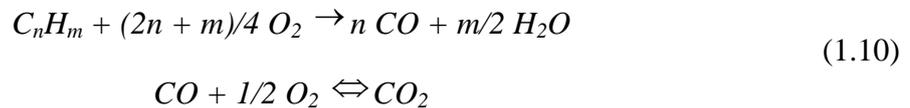
Considérons l'équation d'une réaction irréversible globale à une seule étape de la combustion complète d'un hydrocarbure C_xH_y . Dans le cadre d'une hypothèse de chimie rapide, où l'air est un mélange composé de 21% de O_2 et de 79% de N_2 en volume, le bilan de la réaction chimique à la stœchiométrie s'écrit comme :



Ces schémas à une seule réaction supposent que les seuls produits formés sont les molécules saturées de type CO_2 et H_2O et ne permettent pas de représenter les détails d'inflammation liés à l'accumulation des composés intermédiaires. La température calculée est sensiblement plus élevée que celle mesurée dans la flamme, conséquence de la non prise en compte des équilibres entre CO_2 et CO et entre H_2O et H_2 , en fin de réaction (pas de pertes par dissociation).

1.4.3. Les schémas globaux à deux réactions

On représente la combustion de l'hydrocarbure par une séquence de deux réactions (la première irréversible et la seconde réversible) :



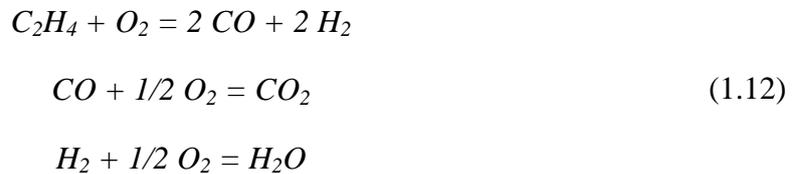
Dans ces schémas, la température de flamme peut être calculée avec une précision plus ou-moins acceptable tout comme la concentration en monoxyde de carbone à l'équilibre. Mais ces schémas rendent compte de manière insuffisante de la nature séquentielle de la combustion des hydrocarbures. La phase initiale d'oxydation précédant l'élévation de température n'apparaît pas.

1.4.4. Les schémas semi globaux à plusieurs étapes

Ce schéma développé par *Hautman et al.* [10] représente la combustion de l'hydrocarbure par une première étape globale produisant de l'éthylène :



suivie de trois autres équations correspondant respectivement à l'oxydation de l'éthylène, l'équilibre entre CO_2 et CO et l'équilibre entre H_2O et H_2 :



Ce schéma prend en compte des étapes principales de la combustion des hydrocarbures et permet de représenter l'accumulation d'éthylène comme composé intermédiaire. Il donne aussi une représentation correcte du profil de concentration de l'hydrocarbure initial en fonction du temps ; il prend en compte les processus compétitifs entre produits intermédiaires et produits initiaux au cours de la réaction [10].

1.4.5. Les schémas quasi globaux

Edelman et *Fortune* [11] proposent un mécanisme avec une étape globale suivie de neuf réactions élémentaires pour l'oxydation de CO et H_2 . *Edelman* et *Harsha* [12] proposent une autre version de ce mécanisme avec la même réaction globale,



suivie de 21 réactions élémentaires pour le système CO, H_2, CO_2 .

Ce mécanisme permet de calculer avec précision la température des gaz brûlés et leur composition, mais il ne permet pas de représenter correctement les premières étapes de la combustion :

- Les réactions de l'hydrocarbure initial avec les atomes et radicaux ne sont pas prises en compte.
- Les hydrocarbures intermédiaires n'apparaissent pas.

Ceci a pour conséquence une mauvaise estimation des concentrations en atomes, en radicaux et en monoxyde de carbone, pendant une partie de la réaction [12]. Une amélioration de ce mécanisme a été apportée par *Duterque et al* [13], en subdivisant la première étape globale en deux étapes mettant en jeu des composés intermédiaires [13].

1.4.6. Les mécanismes cinétiques détaillés

Le mécanisme ou schéma cinétique détaillé est un ensemble de réactions chimiques, pour la plupart élémentaires. Les autres réactions transcrivent globalement des processus complexes où les espèces intermédiaires ont été négligées dans la mesure où elles n'affectent pas les prévisions du modèle de combustion. Pour n espèces, on peut avoir n^2 paires de réactifs et pour chaque paire, il y a un nombre donné de produits possibles. L'écriture du mécanisme peut se faire à partir des espèces les plus simples, jusqu'à l'hydrocarbure initial ; c'est ainsi que l'on peut distinguer le système H_2/O_2 , le système $CO/H_2/O_2$, le système espèces intermédiaires/ H_2/O_2 et enfin la partie propre à l'hydrocarbure initial. Pour qu'un mécanisme soit validé, il faut qu'il soit testé dans un grand nombre de conditions expérimentales, car des réactions élémentaires données peuvent jouer un rôle différent pour des régimes expérimentaux différents. Par exemple, les réactions entre un hydrocarbure et l'hydrogène atomique sont importantes pour les mélanges riches et moins importantes dans le cas des mélanges pauvres pour lesquels les réactions avec le radical hydroxyle et l'oxygène atomique prédominent. De même, en fonction de la température, l'importance relative des différentes réactions peut subir des variations notables [6].

En plus des processus élémentaires, on peut être amené à écrire des étapes globales, faute de connaître le cheminement réactionnel exact ou pour éviter de compliquer inutilement le mécanisme par l'introduction d'espèces intermédiaires non indispensables, sur le volet énergétique. (Le mécanisme de formation pour CH_4 -air comprend 325 réactions et 53 espèces [14]).

1.5. Emissions polluantes

1.5.1. Types et définitions

Selon la législation actuelle [4], la pollution atmosphérique y est caractérisée comme « ...l'introduction par l'homme, directement ou indirectement, dans l'atmosphère et les espaces clos, de substances ayant des conséquences préjudiciables de nature à mettre en danger la santé humaine, à nuire aux ressources biologiques et aux écosystèmes, à influencer sur les changements climatiques, à détériorer les biens matériels, à provoquer des nuisances olfactives excessives ».

Nous pouvons compléter cette définition en se concentrant sur les différentes échelles à laquelle elle s'observe. En effet, il est commun de distinguer trois échelles d'application : échelle locale, régionale et enfin globale. Quand on parle d'échelle locale (et donc d'effet local), on entend généralement une pollution limitée à un espace défini et précis : autour d'une installation industrielle, le long d'un axe de circulation très emprunté.... Au degré régional, la problématique vient de la convection et la dispersion des polluants par les masses d'air. Les phénomènes à retenir sont l'acidification, l'eutrophisation et la pollution photochimique. Enfin, s'agissant de l'échelon planétaire, on citera bien évidemment l'effet de serre et la destruction de l'ozone stratosphérique.

Il convient de définir ces différents termes, à commencer par l'acidification. Celle-ci se matérialise par des pluies acides. Ce phénomène provient de la rencontre entre des masses d'air humide et certains composés gazeux acides émis par les activités humaines. L'acidité s'infiltré ensuite dans les sols et affaiblit l'écosystème.

L'eutrophisation des sols est quant à elle une perturbation de l'équilibre biologique des sols et des eaux due à un excès d'azote notamment d'origine atmosphérique (NO_x et NH_3) par rapport à la capacité d'absorption des écosystèmes.

Viennent ensuite les gaz à effet de serre, cette appellation provient de la comparaison entre le rôle de ces gaz dans l'atmosphère et la vitre des serres dont la fonction est d'emprisonner la chaleur au sein de l'installation. Le CO_2 par exemple est un acteur à l'échelle globale, car il participe au mécanisme de régulation thermique via les échanges atmosphériques. En effet, l'atmosphère reçoit une immense quantité d'énergie via le rayonnement solaire, qu'elle transmet dans la gamme dite du visible. Dans le sens inverse, le rayonnement émis par la terre est lui aussi transmis par les constituants majoritaires (comme N_2 et O_2) mais pas par les Gaz à Effets de Serre (GES), caractérisés justement par cette capacité à absorber (et réémettre en partie) le rayonnement infrarouge. L'augmentation de la concentration des GES dans l'atmosphère par les activités humaines perturbe cet équilibre, et tend à augmenter la température moyenne autour du globe.

1.5.2. Impacts sur l'écosystème

Cette section a pour objet de répertorier les différentes espèces chimiques responsables de la pollution atmosphérique, d'en définir les sources et aussi les impacts sur les organismes vivants ou la planète.

– le monoxyde de carbone CO

Le monoxyde de carbone est un gaz inodore, incolore, sans saveur et extrêmement toxique. Il est essentiellement issu de la combustion incomplète qui peut avoir lieu dans les foyers. Il est également sans propriétés irritatives, ce qui permet l'inhalation de concentrations importantes et potentiellement létales sans symptômes avertisseurs pour la victime. L'intoxication par le CO représente chaque année l'une des principales causes de mortalité par intoxication dans les pays industrialisés [15].

– le dioxyde de carbone CO₂

Le dioxyde de carbone est un gaz incolore, inodore, présent naturellement dans l'atmosphère (à hauteurs de quelques ppmv cependant). Il constitue, avec la vapeur d'eau, le produit de combustion naturel des hydrocarbures. Le dioxyde de carbone fait partie des GES, il s'inscrit donc dans la liste des polluants à l'échelle globale. A noter qu'une installation émettant du CO₂ peut également avoir des conséquences locales ou régionales.

TAB. 1.2 : Détails sur les gaz à effet de serre [15]

Espèce chimique	Temps de séjour (années)	PRG (à 100 ans)
Dioxyde de carbone CO ₂	≤1	1
Vapeur d'eau H ₂ O	200	8
Méthane CH ₄	12	23
Protoxyde d'azote N ₂ O	120	310
Dichlorodifluorométhane CFC	100	~6500
Chlorodifluorométhane HCFC	12	~1350
Tétrafluorométhane CF ₄	50000	6500
Hexafluorure de soufre SF ₆	3200	22800

Ce potentiel de réchauffement global (PRG) du CO₂ est devenu un outil de mesure et de comparaison. Il est fixé à l'unité pour le dioxyde de carbone. Le méthane, par exemple, est crédité d'un PRG de 25, ce qui veut dire que le même volume de CH₄ contribue 25 fois plus au réchauffement climatique. Le tableau 2.1 passe en revue les principaux GES, leurs durées de vie dans l'atmosphère et leurs PRG respectifs.

– **les oxydes d'azote NO_x**

Les oxydes d'azote sont des espèces chimiques formées à partir de l'azote et de l'oxygène de l'air, dans des zones de haute température, rencontrées typiquement lors de la combustion d'hydrocarbures. Le monoxyde d'azote NO et le dioxyde d'azote NO₂ (couleur rouge-brune caractéristique) sont des polluants gazeux à la fois acteurs à l'échelle globale (nocifs pour la santé) et globale (intervenant dans la destruction de l'ozone). Signalons également le protoxyde d'azote (N₂O) qui est à la fois un puissant GES, et un excitateur pour la combustion.

– **le dioxyde de soufre SO₂**

Le dioxyde de soufre est un gaz dense (masse molaire de 64 g/mol), incolore et toxique dont l'inhalation est fortement irritante. Il joue un rôle important dans la formation des pluies acides. Longtemps décrié comme l'un des polluants principaux des moteurs automobiles, son implication est maintenant très réduite du fait des normes exigeantes sur la quantité de soufre dans les carburants pour des pays industrialisés.

– **les suies et particules**

Les particules en suspension (appelées Particulate Matter ou PM en langue anglaise) sont une famille générique pour désigner les fines particules transportées par les masses d'air. Ces aérosols proviennent notamment des activités humaines comme le chauffage au bois, la combustion d'hydrocarbures et certains procédés industriels. L'augmentation des taux de particules fines dans l'air est considérée comme un facteur de risques sanitaires (maladies cardiovasculaires, altération des capacités pulmonaires, cancers . . .). La métrologie distingue les particules selon différentes classes : PM₁₀, PM_{2.5}, PM₁ et PM_{0.1} (en fonction de la taille de la particule en micromètre). Les suies, qui proviennent de la combustion incomplète (phénomène de flamme riche), résultent de l'agglomération de particules sphériques (appelées

monomères), majoritairement constituées de carbone. Ces dernières se forment par condensation d'hydrocarbures aromatiques polycycliques dans la flamme. Elles représentent un risque sanitaire et environnemental : en endommageant les systèmes respiratoires (encore plus gravement pour les suies de faible diamètre caractéristique).

– **Les composés organiques volatils**

Le terme de composé organique volatil (COV) désigne certaines molécules à base de carbone et d'hydrogène, présentes dans l'air à l'état gazeux, et auxquelles appartiennent par exemple les aldéhydes (acétaldéhyde, formaldéhyde) ou cycles aromatiques comme le benzène. Ces espèces ont des propriétés cancérigènes identifiées. L'usage domestique de solvants est également une source importante de COV dans l'atmosphère.

1.5.3. Techniques de contrôle et de réduction

Nous présentons dans cette partie, d'une manière non exhaustive, les principales techniques utilisées par les industrialistes afin de réduire leurs émissions polluantes, notamment les dioxydes d'azote (NO_x) et le monoxyde de Carbone (CO), aux quels nous nous intéressons dans notre travail.

La plus grande partie, et même la totalité avec les combustibles qui ne contiennent pas d'azote, comme le gaz naturel, des oxydes d'azote formés dans les chambres de combustion proviennent de la réaction entre l'azote et l'oxygène de l'air comburant et cette réaction est d'autant plus "efficace" que la température de combustion soit élevée. D'où le principe de tous les brûleurs et chambre de combustion "bas NO_x" est de diminuer la température de la flamme, sans toutefois augmenter la production de monoxyde de carbone (CO). Il faut donc trouver un compromis.

Dans les installations industrielles, les techniques de réduction peuvent être classées en deux types : les techniques dites primaires (action sur la combustion) et les techniques dites secondaires (action sur l'effluent gazeux).

1.5.3.1. Recirculation des gaz d'échappement (EGR)

La recirculation des gaz d'échappement [16] ou *EGR* pour *Exhaust gas recirculation*, est un système inventé au début des années 1970, premièrement pour les moteurs diesels et

étendu pour d'autres domaines industriels qui utilisent la combustion comme une source d'énergie tel que les fours de cimenteries. Cette technique utilisable pour le four de l'ECDE qui représente une partie de notre calcul par simulation, consiste à rediriger une partie des gaz d'échappement du four à partir des gaz aspirés du refroidisseur et les réinjecter dans ce dernier comme air secondaire (figure 1.5).

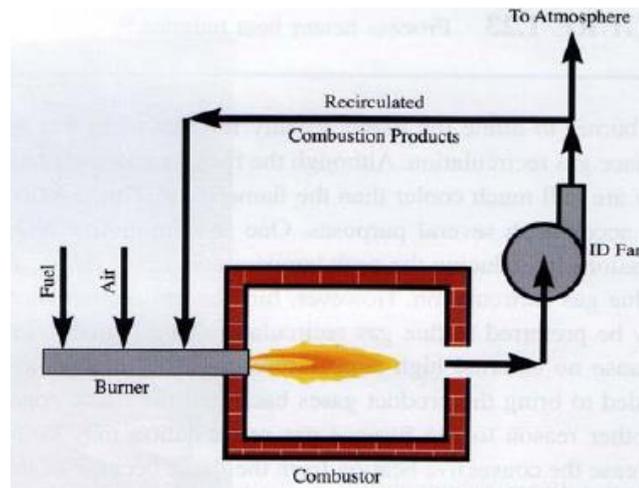


Figure 1.5 : Schéma descriptif de la recirculation des gaz d'échappement

1.5.3.2. Refroidissement de la flamme

L'addition d'eau au combustible ou directement dans la flamme abaisse la température et augmente la concentration en radicaux hydroxyles (OH), ce qui peut avoir un effet positif sur la réduction des NO_x . Des réductions allant de 0 à 50 % peuvent être obtenues dans certaines installations industrielles [17]. L'évaporation de l'eau nécessite un apport de chaleur complémentaire, ce qui provoque de nouvelles émissions de CO_2 (de 0,1 à 1,5 %) qui restent cependant très faibles par rapport à la totalité des émissions de CO_2 dans les foyers.

1.5.3.3. Réduction catalytique sélective (SCR)

Cette technique, comme le montre la figure 1.6, réduit le NO et le NO_2 en N_2 à l'aide de NH_3 et d'un catalyseur avec des températures qui varient entre 500 et 800 °C. Cette technique est très utilisée pour réduire les émissions de NO_x dans certains secteurs industriels tel que ; les centrales thermiques au charbon et les incinérateurs de déchets [18].

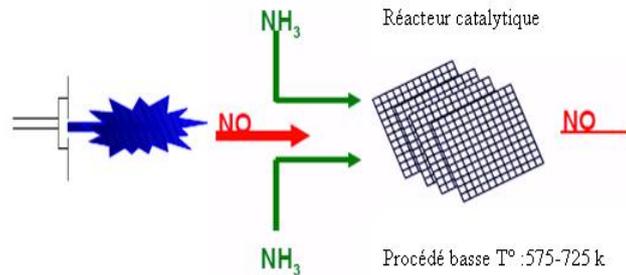


Figure 1 .6 : Principe de la réduction catalytique des NO_x [18]

1.5.3.4. Réduction sélective non catalytique (SNCR)

La réduction sélective non catalytique ou *SNCR* consiste à injecter des composés de type NH_2-X dans les gaz résiduaux pour réduire le NO en N_2 . La réaction est optimale entre 800 et 1000°C, et le temps de séjour doit être suffisant pour que les agents injectés aient le temps de réagir avec le NO . Cette plage de températures est facile à obtenir dans certains foyers, mais voire impossibles, dans d'autres. L'agent NH_2-X le plus courant est une solution d'eau ammoniacale à 25 % de NH_3 [17]. D'autres réducteurs tels que le gaz ammoniac, les solutions d'urée, la chaux nitrurée ou la cyanamide et autres substances similaires peuvent être utilisés à l'échelle industrielle. L'expérience montre que dans la plupart des applications, l'eau ammoniacale est le réducteur le mieux adapté à la *SNCR* dans certains fours [17].

La plupart des unités de *SNCR* actuellement en service sont conçues ou conduites pour réduire de 10% à 50 % les niveaux des NO_x (pour des rapports molaires NH_3/NO_2 de 0,5 à 0,9) et abaisser leurs émissions à 500 - 800 mg NO_x/m^3 , ce qui est suffisant pour se conformer à la législation en vigueur dans certains pays. Les installations conçues et conduites pour améliorer ces performances obtiendront de meilleurs résultats.

Il est important de respecter les plages de température indiquées (800 -1000°C) car si elles sont inférieures, de l'ammoniac non transformé se dégage (échappée de NH_3) et si elles sont trop élevées, l'ammoniac s'oxyde en NO_x . On peut aussi avoir une échappée de NH_3 quand le rapport molaire NH_3/NO_2 est élevé, c'est-à-dire à partir de 1,0-1,2 [18]. Dans d'autres secteurs de l'industrie, l'échappée d'ammoniac a parfois provoqué la formation d'aérosols de

chlorures et de sulfates d'ammonium qui ont traversé le filtre et formé des panaches blancs en haut des cheminées d'évacuation des gaz résiduaux.

1.5.3.5. Réduction par viciage (swirl) des jets

Cette technique des jets viciés a été proposée par Winnox en 2001 [19], en première lieu, il a appliquée cette technique pour les chaudières à 150 kW de puissance. Cette technologie des jets swirlés est utilisable dans différentes applications industrielles comme les turbines à gaz, les moteurs automobiles ou aéronautiques et certains fours industriels [20].

Les jets viciés résultent de l'application d'un mouvement se développant en spirales, une composante de vitesse swirlée étant imposée par l'utilisation d'une entrée axiale et d'une entrée tangentielle. Techniquement, cela est caractérisé par un nombre de swirl à l'injection défini comme [19]:

$$S_0 = \frac{\int_{R_0}^{R_1} W.r.(\rho U).rdr}{(R_1 - R_0) \int_{R_0}^{R_1} U.(\rho U).rdr} \quad (1.15)$$

avec U vitesse axiale, W vitesse tangentielle et R_1, R_0 sont, respectivement les rayons extérieur et intérieur de l'injecteur. Il a été observé qu'à partir d'une certaine intensité de swirl, une zone de recirculation dont la présence permet d'infléchir les lignes de courant, apparaît dans l'écoulement principal et crée une dépression au niveau de l'axe. La taille et la position de cette zone de recirculation varient avec l'intensité du swirl [21]. Cette zone est un élément essentiel pour stabiliser les flammes car elle contient des gaz frais préchauffés et permet l'accrochage de la combustion. La figure (1.7) montre un exemple de recirculation due au swirl [21].

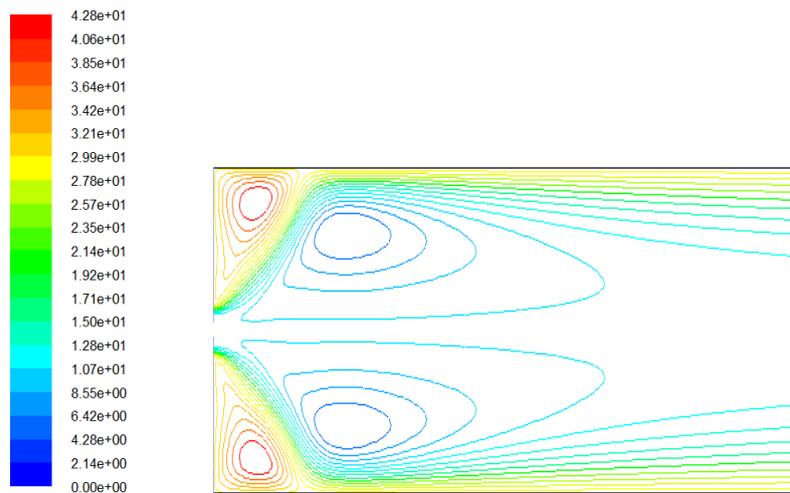


Figure 1 .7 : Lignes de courant d'un écoulement swirlé présentant une zone de recirculation au niveau de l'axe du domaine [21].

Cette technique a été testée et proposée dans une partie de notre simulation numérique pour le cas du four de L'ECDE, afin de réduire le taux des émissions du type NO_x et CO, tout en gardant une bonne efficacité sur le dégagement de chaleur dans ce dernier [21].

Chapitre 2

La modélisation en combustion
turbulente

Dans la plupart des systèmes de combustion rencontrés dans les applications industrielles ou académiques, le type de régime d'écoulement observé est turbulent et interagit avec la chimie. La combustion turbulente résulte de cette interaction entre deux phénomènes complexes, ayant lieu à des échelles de temps et d'espace très dispersés.

Dans ce chapitre on va présenter, d'abord, quelques applications expérimentales, académiques et industrielles de la combustion turbulente. En suite, les équations de l'aérothermochimie sont écrites dans leurs formes moyennes. Les différents régimes des flammes turbulentes prémélangées et non prémélangées nécessaires pour la modélisation de la combustion turbulente, sont aussi détaillés. En dernière section, il est question de décrire les différents modèles utilisés pour exprimer les termes qui caractérisent l'interaction chimie-turbulence.

2.1. Cartographie des flammes et application

Le TNF workshop (Turbulent Non-premixed Flames) a pour objectif de développer l'interaction entre expérimentateurs et numériciens dans le domaine de la combustion turbulente. Plusieurs flammes académiques, mesurées expérimentalement, servent de base au développement de modèles numériques. La figure 2.1 cartographie simplement les différentes flammes étudiées expérimentalement en fonction du régime mode de combustion. Le tableau 2.1 détaille toutes les flammes cartographiées dans la figure 2.1.

Malgré leur grand intérêt, les flammes TNF ne couvrent pas tous les problèmes rencontrés en combustion : les flammes TNF ne sont pas confinées, ni soumises à des instabilités de combustion. Dans cette thèse, on étudiera trois flammes de configuration différentes ; une venant du TNF workshop (référence c dans le tableau 2.1, [22]), l'autre est celle de la flamme de ICARE d'Orléans [23] et la troisième plus proche d'une flamme de chambre de combustion à échelle réelle, issue d'un four de cimenterie de l'ECDE [24,25].

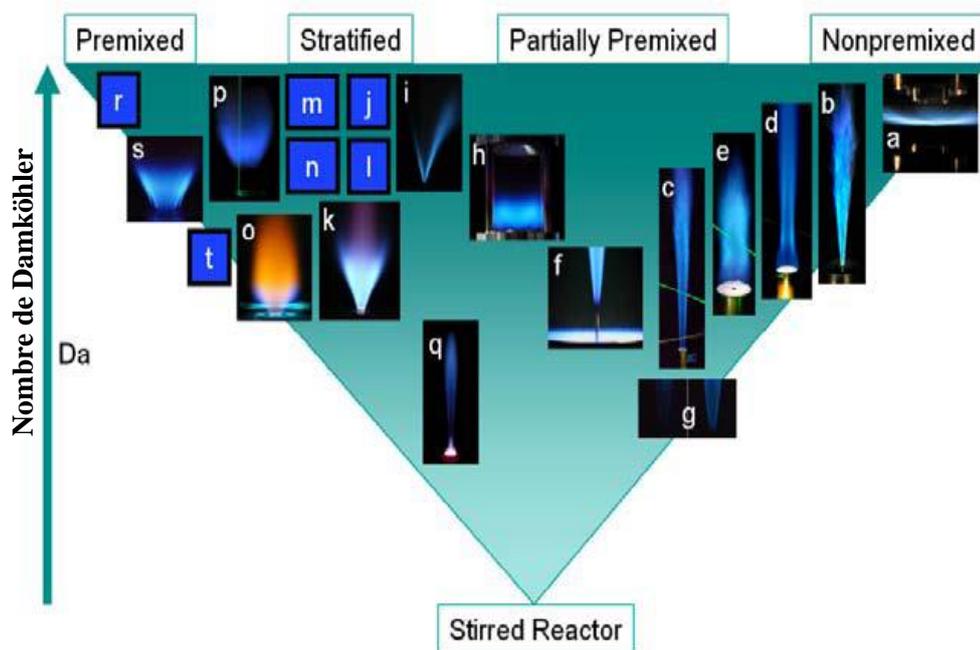


Figure 2.1 : Carte simplifiée des modes et régimes de combustion [26].

TAB. 2.1 : Liste des flammes expérimentales cartographiées sur la figure 2.1 [26].

a	TUD turbulent opposed jet burner
b	DLR simple jet flames of CH ₄ /H ₂ /N ₂ in air
c	Sandia piloted CH ₄ /air air jet flames
d	Sydney bluff-body flames of CH ₄ /H ₂
e	Sydney swirl/bluff-body flames
f	Berkeley/Sydney nonpremixed lifted jets flames in vitiated H ₂ /air coflow
g	Adelaide nonpremixed jet flames in vitiated coflow (low O ₂ levels)
h	DLR model gas turbine combustor (steady and unsteady cases)
i	Cambridge stratified slot burner, CH ₄ /air V-flame
j	CORIA-INSA stratified V-flame
k	TUD piloted annular stratified burner
l	ORACLES burner
m	Cambridge stratified swirl burner
n	Twente stratified swirl combustor (steady and oscillating cases)
o	TECFLAM premixed swirl burner
p	TUD premixed low-swirl burner
q	Sydney piloted premixed jet in vitiated coflow
r	Place holder for various premixed flames with low u'/S_L
s	Sandia premixed swirling dump combustor
t	Place holder for premixed flames, higher u'/S_L

Pour des configurations aussi bien académiques qu'industrielles des flammes, il a été prouvé que le régime des prémélanges partiels était le plus prépondérant. En effet,

dans le cas des turbines aéronautiques, le carburant est, la plupart du temps, injecté sous forme liquide (spray). Ceci mène inévitablement à un mode de combustion de type prémélange partiel. L'utilisation de jets de dilution peut aussi mener à des flammes non prémélangées.

Dans le cas des turbines de production d'énergie, la combustion est souvent prémélangée. A ce titre, de faibles hétérogénéités de mélange peuvent influencer fortement la performance des turbines, mettant en lumière l'importance d'un bon prémélange.

Dans le cas des moteurs à combustion interne de type "Diesel", le combustible est souvent injecté sous forme de spray, menant à des régimes de combustion de type prémélange partiel ou combustion stratifiée. A l'inverse, dans le cas des moteurs de type HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition), le mélange air-carburant est mélangé de la manière la plus homogène possible (comme dans les moteurs à essence) et est comprimé assez fortement pour atteindre le point d'auto-allumage. De simples hétérogénéités de mélange influencent alors très fortement les performances du moteur [27].

2.2. La simulation numérique en combustion turbulente

Pendant de nombreuses années, les études expérimentales ont servi à développer et valider les techniques de simulation numérique. De nos jours, la simulation numérique est devenue suffisamment développée pour être utilisée en parallèle avec des essais expérimentaux, et devient ainsi un outil prédictif. Mais la simulation numérique n'apporte pas toujours les réponses aux problèmes des constructeurs. Lorsqu'on s'intéresse aux écoulements turbulents et réactifs dont la complexité mène aux instabilités qui ont été évoquées, il faut considérer un large spectre d'échelles à la fois en espace et en temps et autoriser de nombreux phénomènes physiques [27, 28].

En mécanique des fluides numérique (*CFD*, comme *Computational Fluid Dynamics* en anglais) pour modéliser numériquement les phénomènes liés à la combustion turbulente, on peut distinguer (Figure.2.2), à l'heure actuelle, trois approches de résolution des équations des bilans moyens [27], appelées aussi équations de l'aérothermochimie.

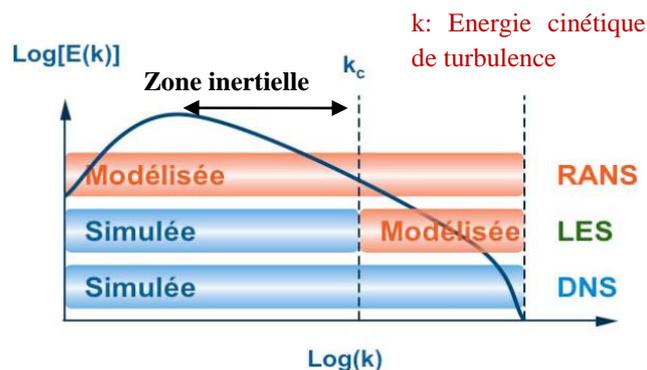


Figure 2.2 : Spectre d'énergie turbulente calculés et méthode de modélisation [26]

Historiquement la plus ancienne, la résolution des équations moyennées (RANS pour Reynolds Average Navier-Stokes) [27, 29] se contente de décrire le comportement moyen de l'écoulement mais nécessite la modélisation de tous les effets instationnaires et par conséquent toutes les échelles spatio-temporelles (figure 2.3). Bien adaptée au dimensionnement des moteurs et à la description des écoulements à échelle réelle, elle a toujours été en peine lorsqu'il a été question d'aborder les instabilités de combustion ou de prédire des allumages ou extinctions locaux.

Au contraire, la simulation numérique directe (DNS pour Direct Numerical Simulation) consiste à calculer toutes les structures de l'écoulement sans modélisation autre que le choix d'un schéma cinétique et la description du transport moléculaire [30, 31, 32]. Malheureusement, cette approche est numériquement extrêmement coûteuse et limitée à de faibles nombres de Reynolds (qui contrôlent la gamme des tailles de structures présentes dans l'écoulement). Cette approche est donc restreinte à des situations académiques simples, malgré la puissance des machines de calcul disponibles aujourd'hui, mais constitue un outil irremplaçable pour étudier précisément certains phénomènes fondamentaux (flash-back en prémélange, soufflage en diffusion, extinction locale,...) [29, 30] et aider au développement de modèles [31,32]. Il est hors de question de simuler un foyer aéronautique ou industriel avec une telle méthode.

Relativement récente, la simulation aux grandes échelles (LES pour Large Eddy Simulation) apparaît comme intermédiaire entre la RANS et la DNS [33, 34,35]. Il s'agit cette fois, de calculer complètement les plus grandes structures turbulentes

présentes dans l'écoulement comme en DNS tandis que, en utilisant une technique de filtrage, seul l'effet des plus petites structures est modélisé comme en RANS.

Nettement plus coûteuse que la RANS (il faut calculer un écoulement instationnaire, tri-dimensionnel, et renoncer aux simplifications usuelles de la RANS telles que la symétrie, la bidimensionnalité, etc), cette approche est beaucoup moins limitée que la simulation directe et donne accès à une précision élevée que la RANS [36, 37, 38]. L'échelle de coupure (filtre spatial) est en principe choisie dans la zone inertielle du spectre de turbulence en raison des hypothèses faites pour développer les modèles. L'impact des modèles sur le résultat final est logiquement moindre qu'en RANS. Aussi, pour les problèmes couplés à des études acoustiques, la LES apparaît comme un outil adapté à l'étude des phénomènes d'instabilités de combustion [39, 40]. Enfin, il faut surtout retenir que pour le cas de la combustion, qui fait appel aux phénomènes physiques à échelle très petite que la taille du filtre, la LES nécessite toujours une modélisation [33].

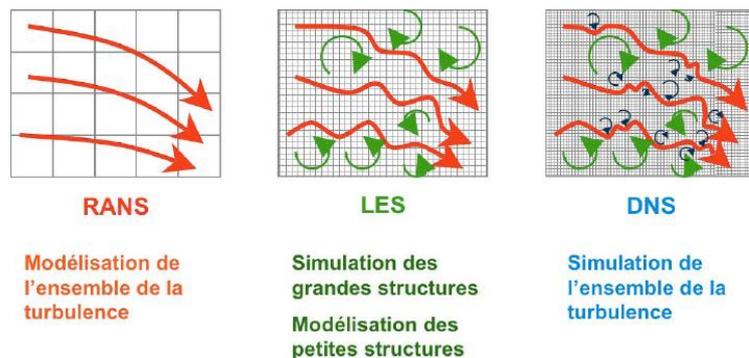


Figure 2.3 : Schématisation globale des méthodes de modélisation.

2.3. Les équations moyennes des bilans

Une des particularités des écoulements de gaz réactifs est la variation de masse volumique engendrée par le dégagement de chaleur. Le procédé de moyenne, appliqué à ces écoulements, conduit à des équations complexes très différentes des équations moyennes pour les écoulements où la masse volumique est constante. Afin de retrouver les mêmes formes d'équations, il est coutume d'utiliser une moyenne pondérée par la masse volumique appelée moyenne de Favre, définie de la façon suivante : $\overline{\rho g} = \overline{\rho} \tilde{g}$. La fluctuation autour de la moyenne de Favre \tilde{g} est notée g'' : $g = \tilde{g} + g''$. A la différence de la moyenne de Reynolds, cette moyenne

n'est pas centrée, donc $\overline{g''} \neq 0$ mais $\tilde{g}'' = 0$. Pour obtenir les équations d'évolution des quantités moyennes, on applique l'opérateur de moyenne aux équations de l'aerothermochimie. On obtient [27]:

- l'équation de continuité

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k) = 0 \quad (2.1)$$

- les équations de quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\tau}_{ik} - \overline{\rho u_i'' u_k''}) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.2)$$

- l'équation d'évolution de la fraction moyenne de mélange ($\tilde{\xi}$)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\xi}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{\xi}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' \xi''} \right) \quad (2.3)$$

- l'équation d'évolution de la fraction massique moyenne du combustible (\tilde{Y})

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{Y}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' Y''} \right) + \bar{\omega} \quad (2.4)$$

- L'équation de l'énergie

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial h}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' h''} \right) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} \quad (2.5)$$

Les quantités transportées sont donc des quantités moyennes au sens de Favre. Lorsque la masse volumique est constante, les moyennes de Favre et de Reynolds sont équivalentes. Ces équations moyennes sont semblables aux équations d'un écoulement non réactif sauf qu'un terme supplémentaire apparaît dans chaque équation (mis à part l'équation de continuité). Ces nouveaux termes représentent le mécanisme de transport turbulent des variables :

- $\overline{\rho u_i'' u_k''}$ est le flux turbulent de quantité de mouvement (tenseur de Reynolds) ;
- $\overline{\rho u_k'' \xi''}$ est le flux turbulent de la fraction de mélange ;
- $\overline{\rho u_k'' Y''}$ est le flux turbulent de la fraction massique de combustible ;
- $\overline{\rho u_k'' h''}$ est le flux turbulent de l'enthalpie.

Pour pouvoir utiliser ces équations moyennes, il faut connaître ces flux turbulents, ainsi que le terme $\bar{\omega}$, appelés taux de réactions moyen, n'est pas seulement fonction de la chimie : comme les valeurs non moyennées de $\bar{\omega}$ sont très fortement non linéaires par rapport à ξ et Y . De ce fait, le taux de réaction chimique moyen $\bar{\omega}$ ne peut pas être représenté par la loi Arrhenius des valeurs moyennes $\bar{\xi}$ et \bar{Y} :

$$\overline{\omega(\xi, Y)} \neq \omega(\bar{\xi}, \bar{Y}) \quad (2.6)$$

Les valeurs moyennées seront fortement dépendantes des fluctuations de ces variables, que l'on ne connaît encore pas. Pour l'équation de transport d'espèces, le choix de la variable descriptive est en fonction de la configuration de combustion étudiée. En effet, pour un prémélange parfait, on utilise plutôt une variable d'avancement (c), qu'on définit comme une température réduite, une fraction massique réduite ou même une enthalpie réduite. En l'occurrence, on aura plus besoin de la fraction de mélange puisque seule la variable d'avancement nous renseignera sur l'état thermochimique du mélange. Pour le cas d'une combustion non prémélangée, où le combustible et l'oxydant diffuent vers une zone de mélange pour brûler en flamme de diffusion au niveau d'une couche stœchiométrique, seule la fraction de mélange est transportée. Dans ce cas, et sous réserve de certaines conditions (hypothèses de Shvab-Zeldovitch), cette variable définie comme une combinaison entre la fraction massique du combustible et de l'oxydant, est souvent passive.

Les termes $\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t}$, $\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t}$, $\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}}{\partial t}$ et $\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\xi}}{\partial t}$ représentent l'accumulation des variables ; masse volumique, vitesses, fraction massique et fraction de mélange respectivement, au cours du temps t , qui sont nuls pour un cas stationnaire.

Pour le cas des équations d'état, le problème se pose du même genre ; en effet la moyenne des équations classiques donne :

$$\bar{P} = \tilde{\rho} R \sum_{i=1}^n \frac{\bar{Y}_i T}{m_i} = \tilde{\rho} R \sum_{i=1}^n \frac{\tilde{Y}_i}{m_i} \tilde{T} + \tilde{\rho} R \sum_{i=1}^n \frac{\bar{Y}_i T''}{m_i} \quad (2.7)$$

et de même :

$$\tilde{h} = \sum_{i=1}^n Y_i \int_0^T c_{p_i}(T) dT + \sum_{i=1}^n \tilde{Y}_i h_i^0 \quad (2.8)$$

Pour le cas de combustion avec de l'air, donc à peu près 79% d'azote, $\sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{m_i}$ est très peu variable en fonction de la composition exacte du milieu gazeux et on a simplement [41] :

$$\bar{P} = \tilde{\rho} R_m \tilde{T} \quad (2.9)$$

avec

$$R_m = \sum_{i=1}^n \frac{\bar{Y}_i R}{m_i} \quad (2.10)$$

Enfin, pour pouvoir utiliser ces équations, il faut les compléter par des modèles permettant de calculer, de façon approximative, les flux de diffusion turbulentes et le taux de réaction moyen en fonction des grandeurs caractéristiques moyennes. Nous allons décrire, dans le paragraphe qui suit, les principaux modèles de turbulence permettant d'exprimer les flux de diffusions turbulentes, ensuite, selon chaque régime de flammes, les modèles permettant de décrire le taux de réaction moyen.

2.4. Modélisation de la turbulence

Les modèles de turbulence, comme nous l'avons mentionné ci-dessus, doivent permettre de calculer les tensions de *Reynolds* et les flux de diffusions turbulents d'enthalpie ou d'espèces. C'est dans l'obtention de tels modèles que réside le cœur du problème de la turbulence. Pour de tels modèles, on résout une équation de transport supplémentaire pour chacune de ces grandeurs (h , Y_i) comme par exemple le modèle *RSM* qui nécessite un temps de calcul très important. D'autres modèles expriment les fluctuations en fonction des valeurs moyennes des variables caractéristiques de l'écoulement, tels que le modèle $k - \varepsilon$ et le modèle $k - \omega$.

2.4.1. Modèle $k - \varepsilon$ et variantes

Le $k - \varepsilon$ appartient à la catégorie de modèles basés sur l'hypothèse de *Boussinesq* [42], suivant laquelle tous les flux turbulents peuvent être reliés aux gradients des

grandeurs moyennes par des coefficients de diffusion turbulents, analogues aux coefficients de diffusion moléculaires qui relient les flux laminaires aux gradients des variables caractéristiques de l'écoulement. Ces flux sont modélisés comme [42] :

$$\overline{-u_k''\xi''} = \lambda_t \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k}, \quad \overline{-u_k''Y_i''} = \Gamma_t \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_k}, \quad \overline{-u_i''u_k''} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} \right), i \neq k \quad (2.11)$$

avec

$$\mu_t = C_\mu k^2 / \varepsilon, \quad \Gamma_t = \frac{\mu_t}{Sc_t}, \quad \lambda_t = \frac{\mu_t}{Pr_t} \quad (2.12)$$

$C_\mu = 0,09$, Sc_t et Pr_t sont les nombres de *Schmidt* et *Prandtl*, respectivement en régime turbulent supposés constants (de l'ordre de 0,8 pour les gaz).

En l'occurrence, le calcul d'un écoulement turbulent est équivalent, avec cette hypothèse, au calcul d'un écoulement laminaire dont les propriétés physiques sont remplacées par des propriétés effectives, somme des propriétés moléculaires et turbulentes. L'information relative à la turbulence et regroupée dans l'expression des propriétés turbulentes, qui varient en tout point du domaine de calcul. Ces propriétés, qui s'expriment en m^2/s , peuvent être exprimés par le produit d'une vitesse turbulente v_t et d'une longueur caractéristique turbulente l_t . La première peut être définie comme la racine de l'énergie cinétique de turbulence k , le calcul de la vitesse turbulente requiert donc de résoudre une équation supplémentaire de conservation pour k . Cette équation comprend un terme de production d'énergie cinétique de turbulence sous l'action du cisaillement produit par les gradients de vitesses dans le fluide, et un terme de dissipation de cette énergie cinétique, due à la viscosité moléculaire du fluide. Ce dernier terme noté ε , peut être représenté, d'après l'analyse dimensionnelle, à partir de $k^{3/2}/l_t$. On peut également le calculer à partir du choix de la dimension caractéristique de l'écoulement. En pratique, ce choix est difficile car les échelles de longueurs dépendent de la géométrie de l'écoulement et ne peuvent donc être estimés que si des études expérimentales détaillées sont disponibles pour la configuration étudiée [43]. Dans le modèle $k - \varepsilon$ développé par *Launder et Spalding*

[44], en revanche, on introduit une équation de conservation supplémentaire pour la variable ε . Ainsi, leurs formulations sont données par :

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\rho k} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\overline{\rho \tilde{u}_\alpha k}) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\overline{\rho} \frac{\mu_t}{Pr_k} \frac{\partial k}{\partial x_\alpha} \right) - \underbrace{\overline{\rho u''_\alpha u''_\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta}}_{\text{La production de } k} - \underbrace{\overline{\rho \varepsilon}}_{\text{La dissipation de } k} \quad (2.13)$$

et :

$$\alpha, \beta = 1, 2, 3$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\rho \varepsilon} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\overline{\rho \tilde{u}_\alpha \varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\overline{\rho} \frac{\mu_t}{Pr_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_\alpha} \right) - \underbrace{\overline{\rho} \frac{\varepsilon}{k} C_{1\varepsilon} u''_\alpha u''_\beta \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta}}_{\text{La production de } \varepsilon} - \underbrace{\overline{\rho C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k}}}_{\text{La dissipation de } \varepsilon} \quad (2.14)$$

Les relations du modèle $k - \varepsilon$, comportent cinq constantes, dont les valeurs ont été déterminées afin de valider ce modèle pour un certain nombre de configurations expérimentales définies :

$$C_\mu = 0,09 ; C_{1\varepsilon} = 1,44 ; C_{2\varepsilon} = 1,92 ; Pr_k = 1 ; Pr_\varepsilon = 1,3 \quad (2.15)$$

En raison de sa simplicité et sa robustesse, le modèle $k - \varepsilon$ est largement utilisé et implémenté dans tout les logiciels de simulation numérique, car il permet de tenir compte des effets de la turbulence, sans alourdir significativement le calcul de l'écoulement [43]. Il a été utilisé au cours de l'étude numérique, décrivant correctement le comportement d'un écoulement non tourbillonnaire axisymétrique en aval d'un injecteur coaxial unique [45]. Il est important de noter que le modèle $k - \varepsilon$ dans sa version originale, a été développé pour une configuration d'un jet plan, pour lequel la plupart des contraintes étaient dues au cisaillement émanant de l'éirement plan, non viciés, non tourbillonnaire de l'écoulement. Pour les jets issus de buses rondes, l'écoulement a tendance à se développer pas seulement dans la direction axiale, mais aussi dans la direction radiale en s'étirant et s'épanouissant d'une manière tourbillonnaire. Une expression dite de *Pope* est ajoutée à l'équation de transport du taux de dissipation ε , le taux de production de l'énergie cinétique est ainsi corrigé par un terme invariant χ , et s'écrit [46] :

$$P_{pc} = C_{3\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \chi \quad (2.16)$$

Le terme χ s'exprime en fonction des composantes des tenseurs S et W :

$$\chi = \omega_{ij} \omega_{jl} S_{li} \quad (2.17)$$

où :

$$S_{li} = \frac{1}{2} \frac{k}{\varepsilon} \left[\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_l} \right]$$

$$\omega_{jl} = \frac{1}{2} \frac{k}{\varepsilon} \left[\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} - \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_j} \right] \quad (2.18)$$

La correction du terme du taux de production de l'énergie cinétique dans l'équation de transport de ε permet de prendre en considération l'effet de l'étirement tourbillonnaire sur la viscosité du jet et par conséquent, sur son taux d'épanouissement. Ainsi, le jet rond (considéré axisymétrique) s'épanouit moins rapidement que le jet plan [46]. Cette correction a été utilisée pour le cas de la configuration de la flamme Sandia-D, une configuration qui a fait l'objet d'une investigation numérique, qu'on présentera en détail au niveau du quatrième chapitre (section 3).

Les équations du modèle $k-\varepsilon$ ont été établies en supposant la turbulence homogène et isotrope, hypothèse considérée comme valable dans le cas des écoulements non swirlés [41]. Par conséquent, une réécriture du modèle $k-\varepsilon$ pour l'adapter à un plus grand nombre de configurations d'écoulement et inclure plus particulièrement des termes spécifiques aux écoulements à swirl, a été développée par *T.H. Shih et al* [47,48]. Ce modèle a été implémenté dans le code *Fluent* sous la dénomination de $k-\varepsilon$ -Realizable [48]. Ce modèle, contient une nouvelle formulation pour le calcul de la viscosité turbulente, dans laquelle le terme C_μ n'est plus une constante mais varie en fonction de la déformation moyenne de l'écoulement, de k et de ε . Ceci évite certains résultats non physiques rencontrés avec le modèle $k-\varepsilon$, dans lequel les tensions normales de Reynolds peuvent devenir

négatives lorsque l'écoulement présente de fortes contraintes. D'autre part, il est notoire que l'équation de ε dans le modèle $k - \varepsilon$ standard conduit à sous estimer la dispersion des jets ronds axisymétriques. Dans le modèle *Realizable* $k - \varepsilon$ de *Shih*, le terme de production dans l'équation de conservation de ε est indépendant de la production de k , ce qui est censé mieux représenter les transferts d'énergie entre les différentes échelles de la turbulence [48]. En outre, le terme de destruction de l'équation de ε ne contient pas de singularité (son dénominateur ne tend jamais vers zéro quand k diminue).

2.4.2. Modèle $k - \omega$

Le modèle $k - \omega$ standard est une extension de celui développé en 1988 par Wilcox [49], aux écoulements à faible nombre de Reynolds, compressibilité et à haut taux d'épanouissement. Ce modèle a une formulation empirique qui a été amélioré au cours des dernières années. En plus d'une bonne prédiction de la dynamique des jets confinés (initialement assurée par le modèle de Wilcox), le modèle $k - \omega$ standard introduit des termes de production supplémentaires de l'énergie cinétique turbulente (k) et du taux de dissipation spécifique (ω , définie comme ε / k) dans les équations de transport dans le but d'améliorer la prédiction dynamique dans le cas des jets libres [49].

Les équations de l'énergie cinétique turbulente k et le taux de dissipation spécifique ω du modèle sont donnés comme suite [49]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} k + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\bar{\rho} \tilde{u}_\alpha k) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\bar{\rho} \frac{\mu_t}{Pr_k} \frac{\partial k}{\partial x_\alpha} \right) \underbrace{- \bar{\rho} \widetilde{u''_\alpha u''_\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta}}_{\text{La production de } k} - \underbrace{\bar{\rho} \beta^* f_\beta k \omega}_{\text{La dissipation de } k} \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \omega + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\bar{\rho} \tilde{u}_\alpha \omega) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\bar{\rho} \frac{\mu_t}{Pr_\varepsilon} \frac{\partial \omega}{\partial x_\alpha} \right) + \underbrace{- \bar{\rho} \alpha \frac{\omega}{k} \widetilde{u''_\alpha u''_\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta}}_{\text{La production de } \omega} - \underbrace{\bar{\rho} \beta \cdot f_\beta \omega^2}_{\text{La dissipation de } \omega} \quad (2.20)$$

Dans ces équations ; Pr_k et Pr_w sont les nombres de *Prandtl* turbulent pour k et ω , respectivement définis comme : $Pr_k = Pr_w = 2$, la viscosité turbulente μ_t est calculée par la relation:

$$\mu_t = \alpha^* \frac{k}{\omega} \quad (2.21)$$

où le coefficient α^* amorti la viscosité turbulente en causant une correction à faible nombre de *Reynolds*. Ce coefficient et les coefficient α, β, β^* du modèles sont fonction du nombre de *Reynolds* turbulent et dans le cas d'un grand nombre de *Reynolds* $\alpha = \alpha^* = 1$. En plus, les coefficients β, β^* sont fonction à un terme qui tient en compte de la compressibilité du fluide, les fonctions f_β, f_{β^*} quant à eux, sont liées au tenseur du taux de contrainte S_{ij} . On trouvera la formulation de tous ces coefficients et les constantes du modèle dans la littérature [49].

Ces modèles de turbulence, qui ont d'abord été étudiés pour des écoulements non réactifs, doivent être adaptés aux écoulements réactifs. Par ailleurs, les fluctuations de masse volumique existant dans un milieu en combustion doivent jouer un rôle. En effet, en utilisant les moyennes pondérées par ρ , il apparaît clairement dans l'équation pour k un nouveau terme $\tilde{u}''_\alpha \cdot \overline{\partial p} / \partial x_\alpha$ où u''_α est la fluctuation autour de \tilde{u}_α , et donc $\tilde{u}''_\alpha = 0$ uniquement si ρ fluctue. Ce terme traduit physiquement le travail de la force que représente le gradient de pression moyen sur des particules fluides de masse volumique fluctuante et lorsque $\overline{\partial p} / \partial x_\alpha$ est dû au champ de pesanteur, on retrouve alors le travail de la force d'Archimède. Ce terme peut être positif ou négatif, suivant les signes respectifs de \tilde{u}''_α et $\overline{\partial p} / \partial x_\alpha$, produisant ou détruisant la turbulence.

2.5. Interaction entre chimie et turbulence

Sur le volet phénoménologique, la turbulence de l'écoulement se manifeste par un transfert énergétique, partant des grandes structures (plus gros tourbillons ayant la taille équivalente du domaine de calcul) jusqu'aux petites échelles (celles de Kolmogorov), où la turbulence est dissipée sous forme de chaleur. Dans le même contexte, la morphologie de la flamme (quelque soit sa configuration) est telle qu'une zone thermique, caractérisée par un dégagement de chaleur, précède une zone

réactionnelle siège de réaction chimique qui sont souvent exothermiques. L'épaisseur de cette flamme dépend aussi bien de la configuration aérodynamique (étirement, stagnation,...) que des conditions thermochimiques (richesse, température des réactifs,...). Une compétitivité permanente existe entre les structures de l'écoulement turbulent (tourbillons) et la structure interne de la flamme. Cette compétitivité fait que la flamme peut être influencée ou non dans sa structure interne par le mouvement des tourbillons, et par conséquent, l'expression du taux de réaction (qui caractérise la zone réactionnelle/ zone de mélange) dépendra de la façon avec laquelle la flamme répondra aux agitations turbulentes. Les régimes de combustion représentent les états dans lesquels se retrouvent une flamme, sujette aux mouvements des structures turbulentes.

Il est important de noter qu'on n'a pas pu du tout abordé la problématique de l'effet de la flamme sur la turbulence (appelée abusivement turbulence inverse). En effet, l'expansion thermique dans le voisinage du front ou de la couche de mélange réactionnelle fait abaisser la masse volumique et par thermo-diffusion, la dynamique de l'écoulement se perturbe. Par exemple, pour une flamme de prémélange plane, le principe de conservation de la masse ($\rho u = cst$) implique une accélération des gaz brûlés à la traversé du front (puisque ρ diminue), ce qui a pour effet de modifier de la turbulence de part et d'autres de la flamme. Cette problématique associée à des phénomènes de diffusion contre gradient, sera abordée au niveau de la partie réservée au modèle LW-P (chapitre 3).

2.5.1. Régimes des flammes turbulentes de prémélange

La structure interne d'une flamme turbulente a tout d'abord été considérée, dès les premiers travaux de Damköhler en 1940 [50], comme étant une flamme laminaire très fine, plissée et rapidement convectée par la turbulence de telle sorte que la zone de flamme apparaisse épaisse à l'œil nu. En fait, cette façon de représenter la structure interne d'une flamme turbulente n'est pertinente que si la taille des plus petits tourbillons créés par la turbulence, est plus grande que l'épaisseur de la flamme laminaire, empêchant ainsi aux tourbillons de pénétrer dans la flamme laminaire. On obtient une classification relativement simple des structures de flammes turbulentes en comparant les longueurs et les temps caractéristiques de la turbulence à la longueur

et au temps caractéristiques des flammes laminaires (ou de la chimie de la flamme). Différents nombres caractéristiques peuvent être choisis pour établir cette classification des régimes de combustion. Les deux nombres les plus utilisés sont les nombres de Damköhler Da et de Karlovitz Ka , qui comparent le temps caractéristique chimique τ_c aux temps caractéristiques de la turbulence τ_T et τ_K associés respectivement aux structures énergétiques et dissipatives de la turbulence :

$$Da = \frac{\tau_T}{\tau_c} = \frac{l_T}{\delta_L} \frac{S_L}{u'} \quad Ka = \frac{\tau_c}{\tau_K} = \frac{\delta_L}{l_K} \frac{u_K}{S_L} \quad (2.22)$$

τ_T , l_T et u' sont respectivement le temps, l'échelle intégrale et la vitesse caractéristiques de la turbulence. τ_K , l_K et u_K sont le temps, la longueur et la vitesse caractéristiques de la dissipation (échelle de Kolmogorov). δ_L et S_L sont l'épaisseur et la vitesse de la flamme laminaire. Les longueurs, temps et vitesses caractéristiques de la turbulence peuvent être exprimés en fonction de l'énergie cinétique turbulente k , de la dissipation ε et de la viscosité cinématique du fluide ν , comme [51]:

$$u' = \sqrt{k} \quad l_T = \frac{u'^3}{\varepsilon} \quad u_K = (\nu\varepsilon)^{1/4} \quad l_K = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (2.23)$$

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

$$Re_T = \frac{u'l_T}{\nu} = Da^2 Ka^2 \quad (2.24)$$

Le diagramme de la figure 2.5, avec u'/S_L en ordonnée et l_T/δ_L en abscisse, proposé par Barrère et Borghi [41,51] permet de représenter les limites des différents régimes de combustion. Un diagramme équivalent est utilisé par Peters [52]. Selon la zone du diagramme dans laquelle on se trouve, les flammes turbulentes seront de différents types : les flammes “plissées” ou flammelettes, les flammes “épaissies” et les flammes “plissées-épaissies”.

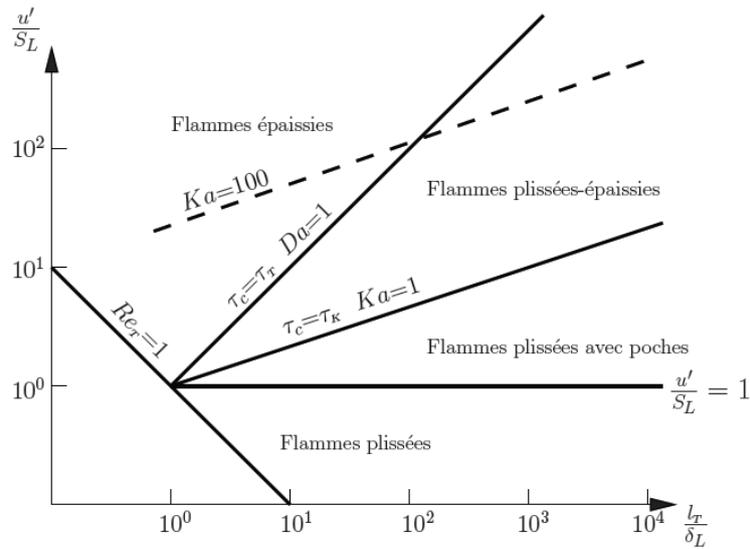


Figure 2.5 : Les différents types de flammes turbulentes de prémélanges (diagramme de Borghi-Peters [51,52])

• Les Flammes “Plissées”

Dans le régime de combustion des “flammes plissées” ou régime de “flammelettes”, la flamme turbulente est constituée d’une collection de flammes laminaires (flammelettes) plissées par la turbulence. La structure interne de la flamme laminaire n’est pas perturbée par les tourbillons car les tailles de tourbillons sont toutes plus grandes que l’épaisseur de la flammelette, $l_K > \delta_L$. La considération des seuls rapports d’échelles de longueurs n’est toutefois pas suffisante pour conclure quant à la structure de la flamme ; d’autres paramètres non dimensionnels tel que u'/S_L doivent être pris en compte. De plus, la comparaison de ces deux échelles de longueur n’est pas si évidente car l_K est défini d’un point de vue statistique et δ_L est susceptible de varier d’un point à un autre au sein de la flamme moyenne du fait des étirements locaux.

Dans ce régime, la flamme turbulente peut donc être considérée comme un ensemble de flammelettes d’épaisseur quasiment constante δ_L , courbées et plissées occupant une zone d’épaisseur δ_T . δ_T est définie comme l’épaisseur moyenne de la flamme turbulente, le “flame brush” en anglais.

Lorsque l'intensité turbulente augmente ($u' > S_L$), la déformation de la flammelette s'accroît et peut ainsi provoquer des interactions entre deux parties adjacentes de celle-ci, (voir figure 2.6). Ces interactions sont susceptibles de conduire à la formation de "poches" de gaz entourées d'une flammelette. Ces poches peuvent être constituées de gaz frais ou de gaz brûlés suivant que l'interaction se fait au niveau des zones de préchauffage ou des zones de réaction. Dans ce dernier cas, on parle alors d'interaction de deux flammelettes "dos à dos". L'apparition de poche de gaz frais dans les gaz brûlés est nettement plus fréquente que l'inverse car la propagation de la flamme locale favorise ce phénomène, (voir figure 2.6). Les interactions "dos à dos" ne forment une poche de gaz brûlés que si une extinction des zones de réaction se produit, la turbulence doit alors être suffisamment forte.

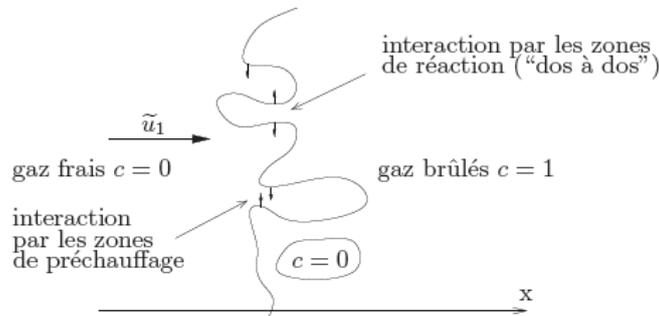


Figure 2.6 : Formation de poches dans une flamme turbulente [53,54]

- **Les Flammes "Plissées-épaissies"**

Lorsque l'énergie cinétique turbulente k augmente et que l'échelle intégrale l_T est constante, alors l'échelle de Kolmogorov l_K diminue et devient de plus en plus proche voire inférieure à l'épaisseur des flammelettes δ_L . Les structures turbulentes sont alors susceptibles de pénétrer dans la structure de la flamme laminaire, provoquant ainsi son épaississement. La zone de préchauffage est la première affectée par ces tourbillons car son épaisseur est plus importante que celle de la zone de réaction. Les premières études concernant l'épaississement de la zone de préchauffage ont été réalisées par Zimont [55]. Ce phénomène est en fait la conséquence des interactions des zones de préchauffage qui se produisent de plus en plus fréquemment car le rayon de courbure des flammelettes est de plus en plus petit et peut être, par endroit, de l'ordre de δ_L . L'étirement que la turbulence provoque peut aussi réduire l'épaisseur

de la flammelette [56, 57] et créer des interactions “dos à dos” suivies d’extinction des deux zones de réaction en contact ; une poche de gaz brûlés encerclée par la zone de réaction apparaît alors dans la zone de préchauffage.

- **Les Flammes “Épaissies”**

Si l’énergie cinétique turbulente k augmente encore et que l’échelle intégrale l_T est toujours constante de telle sorte que $\tau_T = \tau_c$, alors les interactions de flammelettes ont lieu à toutes les échelles, même les plus grandes. La flamme n’est plus plissée mais seulement épaissie par la turbulence. Ce régime de combustion est aussi appelé “réacteur bien agité” (well-stirred reactor). En fait, les flammes turbulentes épaissies ont la même structure que les flammes laminaires, avec une zone de préchauffage et une zone de réaction bien séparées. Cependant, comme la diffusion dans ces zones est engendrée par le transport turbulent qui est bien plus important que le transport moléculaire, les zones sont bien plus épaissies que dans des flammes laminaires.

Le diagramme de la figure (2.5) permet de se situer par rapport au modèle de combustion le mieux adapté à la situation que l’on cherche à représenter, mais on doit bien garder à l’esprit que cette classification des régimes de combustion n’est que qualitative [58]. En effet, les limites entre les différentes zones sont basées sur des raisonnements d’ordres de grandeurs ; par exemple, la limite entre les flammes épaissies et les flammes plissées-épaissies est définie, selon les auteurs par la droite $Da = 1$ ou $Ka=100$; la limite entre les flammes plissées-épaissies et les flammes plissées peut correspondre à $Ka = 0,1$ ou $Ka = 10$ plutôt que $Ka = 1$. De plus, l’analyse qui conduit à cette classification est basée sur certaines hypothèses non réalistes : une turbulence homogène isotrope obtenue dès que $Re_T = 1$ [59], une réaction globale irréversible, etc.

Les trois types de flammes turbulentes qui viennent d’être décrites engendrent des différences importantes des fluctuations de températures. En effet, si la flamme est de type plissé, la mesure locale et instantanée de la température donnera soit la température des gaz frais soit la température des gaz brûlés. Comme la flammelette a une épaisseur δ_L très fine, la probabilité d’obtenir une température intermédiaire sera très faible. Par contre, si la flamme est du type “épaissi”, les fluctuations de

température ne seront pas assez fortes pour que les températures des gaz frais et des gaz brûlés puissent être mesurées au même endroit de la flamme moyenne. La fonction densité de probabilité (Pdf) de la température aura, dans le cas des flammes “plissées”, plutôt l’allure de deux distributions de Dirac, l’une correspondant à la température des gaz frais, l’autre à la température des gaz brûlés. Dans le cas de flammes “épaissies”, la Pdf sera plus étroite, elle aura plutôt l’allure d’une gaussienne. La Pdf de température pour des flammes de type “plissé-épaissi” montrera à la fois la présence de pics et de situations intermédiaires.

2.5.2. Régimes des flammes turbulentes non prémélangées

Il est difficile de définir des régimes de combustion non prémélangée parce qu’une flamme de diffusion ne se propage pas et ne possède pas d’épaisseur fixe. La classification des régimes est d’abord basée sur la comparaison des échelles de temps caractéristiques de la turbulence et de la chimie avec le nombre de Damköhler $Da = \tau_t / \tau_c$. Lorsque le nombre de Damköhler est petit ($Da < 1$), les échelles de la turbulence et la longueur de mélange sont plus petites que l’épaisseur de la flamme. Ces petits tourbillons intensifient le transport turbulent, et donc le mélange dans la zone de réaction. Ce régime est appelé régime de zones de réaction distribuées. Au contraire, si la combustion est rapide comparée au mélange, le nombre de Damköhler est grand ($Da > 1$) et l’effet de la turbulence sur la zone réactionnelle de la flamme, est faible. C’est le régime de flammelette. Ces deux régimes sont représentés schématiquement sur la figure 2.7.

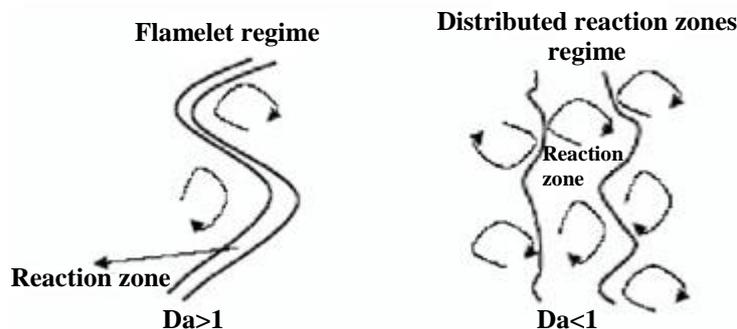


Figure 2.7 : Effet de la turbulence sur la structure de la zone de réaction [60]

Une description de la structure de la flamme peut être apportée en comparant l'échelle intégrale l_T et l'épaisseur diffusive δ_d . Si on fait l'hypothèse que la flamme est étirée par les échelles de Kolmogorov [60], alors l'épaisseur diffusive est contrôlée par les plus petits tourbillons. L'épaisseur δ_d peut être estimée par: $\delta_d \approx l_K$. Le nombre de Damköhler s'exprime alors en fonction du nombre de Reynolds turbulent $Re_t \approx (l_T / \delta_d)^{4/3}$:

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} \approx 2\sqrt{Re_t} Da^{fl} \quad (2.25)$$

Il est possible de classifier les régimes de combustion en fonction des nombres de Damköhler et Reynolds sur un diagramme log-log (Figure 2.8). Quand la chimie est suffisamment rapide (grandes valeurs de Da), la flamme a une structure de flamme laminaire et le régime est le régime dit "de flammelette". Cette condition est délimitée par la droite $Da^{fl} = Da^{LFA}$. Les extinctions se produisent pour des temps chimiques grands, quand $Da^{fl} < Da^{ext}$, où *fl*, *LFA* font références respectivement à flamelet et Laminar Flamelet Assumption.

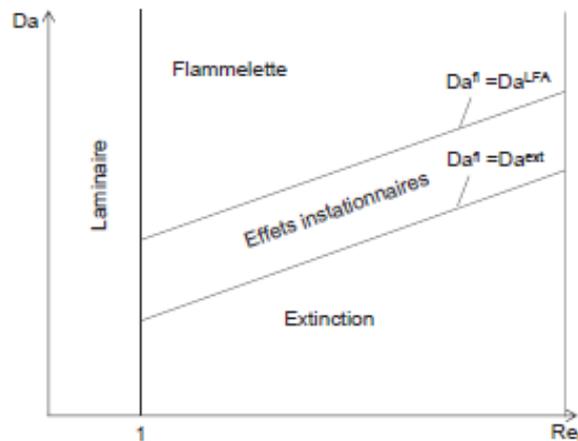


Figure 2.8 : Représentation schématique des régimes de combustion turbulente non prémélangée [60].

2.6. Modélisation du taux de réaction moyen

Il s'agit maintenant de trouver des modèles pour exprimer le taux de réaction moyen $\bar{\omega}$, en fonction des variables connues, c'est-à-dire des valeurs moyennes elles-mêmes, et probablement aussi en fonction des caractéristiques de la turbulence, puisque celle-ci doit jouer un rôle.

Il existe en effet, trois types de modèles ; les modèles algébriques, stochastiques (à Pdf présumée ou transportée) et les modèles géométriques basés sur la notion de densité de surface de flamme (Σ), qui est dans ce cas obtenue par une description matérielle. Ces derniers nécessitent une compréhension plus profonde des mécanismes de production et de destruction de la surface de la flamme [61].

Les modèles stochastiques consistant à utiliser une fonction densité de probabilité, sont principalement utilisés si une variable (par exemple, la fraction de mélange) est considérée pour décrire la thermochimie et le mélange. Leur extension aux cas multivariés sans recourir à la supposition de l'indépendance statistique est particulièrement délicate à mettre en œuvre [62], tandis que, la résolution de l'équation de transport pour la Pdf induit des difficultés additionnelles liées à la modélisation du micro-mélange [62].

2.6.1. Modèles à chimie infiniment rapide

On considère d'abord, le cas des flammes turbulentes où la chimie est très rapide par rapport à tous les processus de la dynamique des fluides, y compris la turbulence. Si l'on considère la figure 2.5, cela correspond aux situations de flammes plissées, et même seulement aux flammes plissées assez loin de la limite du domaine, vers le bas et la droite de la figure. Dans ce cadre, il nous faut distinguer pour la modélisation, les deux cas différents des flammes de prémélange et des flammes de diffusion.

a. Modèle "Eddy Break-Up"

Nous considérons maintenant des prémélanges parfaits et l'extrême limite du régime des flammes plissées où les phénomènes chimiques sont très rapides comparés aux phénomènes turbulents ; $\tau_c \ll \tau_T$ et $\tau_c < \tau_K$. La zone de réaction est alors vue comme une collection de poches de gaz frais et de gaz brûlés séparées par des

interfaces réactives. L'hypothèse sous-entendue par cette représentation est que le taux de réaction chimique des espèces ω_i est de l'ordre du nombre de Damköhler Da . Pourtant, le taux de réaction chimique moyen $\overline{\omega_c}$ doit rester fini. Il faut donc, que la probabilité d'obtenir des gaz en cours de réaction ($0 < c < 1$) soit d'ordre inverse du nombre de Damköhler $1/Da$. La Pdf de la variable d'avancement c , est alors principalement composée de deux pics de Dirac, là où ω_i est nul, c'est-à-dire dans les gaz frais ($c = 0$) et dans les gaz brûlés ($c = 1$). Le taux de réaction chimique moyen est donc contrôlé par la turbulence. Les travaux de Spalding [63] ont abouti, après quelques modifications, à la relation suivante pour le taux de réaction chimique moyen :

$$\overline{\omega_c} = C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{c}(1-\tilde{c})}{\tau_T} \quad (2.26)$$

où τ_T représente un temps caractéristique de la turbulence.

Le modèle EBU a été très utilisé dans les codes de calcul industriel car il est très simple à mettre en œuvre puisqu'il ne nécessite aucune équation de transport supplémentaire. Le terme source $\overline{\omega_c}$ qui intervient dans l'équation de transport pour \tilde{c} n'est fonction que de quantités connues et ne dépend pas des caractéristiques chimiques de l'écoulement. Cet avantage est aussi un inconvénient car la seule façon de faire intervenir la chimie dans le modèle est d'ajuster la constante C_{EBU} . La formule (2.26) a été justifiée théoriquement plus tard par Bray et Moss [64] ce qui a permis de donner une interprétation physique à la constante C_{EBU} .

b. Modèle Bray-Moss-Libby

L'idée de base du formalisme du modèle BML a été proposée initialement en 1977 par Bray et Moss [64] et a depuis fait l'objet de nombreux travaux et améliorations par Bray, Moss et Libby puis par Bray, Champion et Libby, (pour plus de détails voir [65]). On peut noter que des travaux similaires étaient conduits à la même époque à l'ONERA par R. Borghi [51].

Pour les flammes de prémélange, l'idée consiste à présumer la forme de la Pdf de la variable c comme une somme de gaz frais, de gaz brûlés et de gaz en train de brûler:

$$\tilde{P}(c; x, t) = \underbrace{\alpha(x, t)\delta(c)}_{\text{gaz frais}} + \underbrace{\beta(x, t)\delta(1-c)}_{\text{gaz brûlés}} + \underbrace{\gamma(x, t)f(c; x, t)}_{\text{gaz en cours de réaction}} \quad (2.27)$$

Pour des raisons de simplicité, on utilise une Pdf de Favre. α , β et γ sont respectivement les probabilités de trouver des gaz frais, des gaz brûlés et des gaz en train de brûler. $\delta(c)$ et $\delta(1-c)$ sont respectivement les distributions de Dirac correspondant aux gaz frais et aux gaz brûlés. La normalisation de la Pdf conduit à :

$$\alpha + \beta + \gamma = 1 \quad (2.28)$$

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

$$\bar{\omega}_c(x, t) = \bar{\rho}\gamma(x, t) \int_0^1 \frac{\omega(c)}{\rho} f(c; x, t) dc \quad (2.29)$$

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

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

$$\tilde{P}(c; x, t) = \alpha(x, t)\delta(c) + \beta(x, t)\delta(1-c) + O(1/D_a) \quad (2.30)$$

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

$$\tilde{c} = \int_0^1 c\tilde{P}(c; x, t)dc = \beta \quad \text{et} \quad \alpha = 1 - \beta \quad (2.31)$$

La masse volumique moyenne est calculée à partir de l'équation d'état (1.16) :

$$\begin{aligned} \overline{\rho \tilde{T}_*} &= \rho_r T_r^* \quad \text{et} \quad \tilde{T}_* = \alpha T_r^* + \beta T_p^* = (1 - \tilde{c}) T_r^* + \tilde{c} T_p^* \\ \overline{\rho} &= \frac{\rho_r}{1 + \tilde{\tau} c} \quad \text{avec} \quad \tau = \frac{T_p^*}{T_r^*} - 1 = \frac{\rho_r}{\rho_p} - 1 \end{aligned} \quad (2.32)$$

où τ est le facteur d'expansion thermique.

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

$$\tilde{c}^2 = \alpha \tilde{c}^2 + \beta (1 - \tilde{c})^2 = \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad (2.33)$$

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

La Pdf ne permet cependant pas de calculer le terme source moyen car l'équation (2.29) conduit à une forme indéterminée $\gamma \rightarrow 0$ et $\int_0^1 (\omega(c) / \rho) f(c; x, t) dc \rightarrow \infty$. Cependant, il a été démontré que dans ce cas limite, le terme source moyen est proportionnel à la dissipation scalaire. Dériver une équation de transport pour la variance ($\tilde{c} (1 - \tilde{c})$), fait aboutir à [66] :

$$-2\rho D \frac{\partial c}{x_k} \frac{\partial c}{x_k} = \overline{\omega_c} - 2c \overline{\omega_c} \quad (2.34)$$

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

$$\overline{\omega_c} = \frac{\overline{\rho \varepsilon_c}}{(2c_m - 1)} \quad (2.35)$$

Le terme source moyen est donc fonction de la dissipation ε_c qui caractérise le micro-mélange et de c_m qui caractérise la réaction chimique. La valeur de c_m est un paramètre du modèle qui est déterminé par la structure locale de la flamme [66]. La

dissipation peut être résolue par une équation de transport ou par un modèle algébrique de relaxation linéaire [66]. Dans ce dernier cas, on obtient [65]:

$$\overline{\omega_c} = \frac{1}{(2c_m - 1)} \frac{\overline{\rho c^{n2}}}{\tau_T} = \frac{1}{(2c_m - 1)} \overline{\rho} \frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}{\tau_T} \quad (2.36)$$

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

$$C_{EBU} = 1/(2c_m - 1) \quad (2.37)$$

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

c. Modèle de macro-mélange (*Eddy-dissipation*)

Pour les flammes non prémélangées, le modèle est basé sur la notion du *Eddy Break Up* ou *EBU* décrit dans le paragraphe précédent, le concept d'*Eddy-dissipation* a été développé par *Magnussen* et *Hjertager* en 1976 [67]. Celui-ci postule qu'on peut représenter le phénomène de combustion turbulente par des divisions successives (ou *Break-Up*), sous l'action du frottement turbulent, du domaine des gaz frais en éléments de plus en plus petits (appelés *eddies* ou *bouffées turbulentes*), et ce jusqu'à atteindre une taille limite à laquelle ces *bouffée*, contenant les réactifs supposés mélangés à l'échelle moléculaire, sont en contact suffisant avec les gaz brûlés pour que leurs température soit assez élevée pour réagir instantanément [43]. Dans le modèle de *Spalding*, ainsi que dans le modèle de *Magnussen* et *Hjertager*, implémenté dans le solveur du Ansys-Fluent [68] sous le nom *Eddy-dissipation Model* ou *EDM*, la chimie est considérée comme infiniment plus rapide que le mélange (même turbulent) des réactifs, et la composition atteinte alors dans ces structures fines correspond à celle de l'équilibre chimique. Par conséquent, on peut supposer la vitesse de réaction moyenne comme inversement proportionnelle au temps caractéristique du mélange (k/ε) des grandes échelles de la turbulence et indépendante de la cinétique chimique. Le taux moyen net de production/destruction de l'espèce i dans la réaction r peut donc s'exprimer par [69]:

$$\bar{\omega} = v'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{Y_{re}}{v'_{re,r} M_{w,re}}, B \frac{\sum_p Y_p}{\sum_N v''_{j,r} M_{w,j}} \right) \quad (2.38)$$

où $M_{w,j}$ est le poids moléculaire de l'espèce i , ρ est la masse volumique du mélange, l'indice re représente le réactif donnant la valeur minimale de l'expression $\frac{Y_{re}}{v'_{re,r} M_{w,re}}$, l'indice p représente les produits de la réaction, A et B sont des constantes du modèle, leurs valeurs sont de 4 et 0,5 respectivement [69].

La relation (2.38) exprime que la vitesse de réaction est limitée par l'espèce en défaut, qui peut être un réactif, ce qui est logique, mais aussi les produits de combustion. Ceci est un artifice, qui permet de simuler l'inflammation du mélange réactif sous l'effet du préchauffage par les produits de combustion, ainsi que cela se produit en pratique dans un équipement de combustion, alors que l'absence de notion de cinétique dans ce modèle ne permet nulle part de tenir compte de l'effet de la température d'inflammation. On suppose donc que, si les produits de combustion existent, c'est qu'on a atteint localement la température d'inflammation et donc que la réaction peut se produire. La conséquence de ceci est que, pour que la réaction de combustion puisse démarrer, il est obligatoire d'imposer une fraction non nulle de produits de combustion quelque par dans le domaine. Dès que la réaction a démarré, elle est supposée se maintenir pour autant que la turbulence soit présente ($k/\varepsilon > 0$) et il est donc impossible de simuler les phénomènes d'extinctions locales ou de décollement des flammes turbulentes avec ce modèle. Néanmoins, dans le cas du four étudié, le problème principale est que la production de l'énergie cinétique est beaucoup plus importante que son taux de dissipation à cause des grandes vitesses d'injection du fluide dans la chambre de combustion par le brûleur, ce qui implique que la combustion se déroulera dans un temps caractéristique infiniment grand, ceci engendra des instabilités acoustique et de combustion [70], donc il est utile d'insister sur une interaction chimie-turbulence avec ce modèle.

2.6.2. Modèles à chimie non infiniment rapide

Ce n'est que dans le domaine des flammes plissées de la figure 2.5 que la chimie peut être considérée infiniment rapide. La prise en compte de flammes ressortissant

des autres types, épaissies et plissées ou seulement épaissies, ou même de flammes trop proches de ces dernières, demande de faire intervenir dans le modèle, d'une façon ou d'une autre, les caractéristiques de vitesse des réactions chimiques de combustion. Les problèmes de prévision des domaines de stabilité des foyers turbulents, de la quantité de produits polluants libérés, sont des problèmes pratiques où il est nécessaire de faire intervenir ces données chimiques. Les réactions de combustion près des limites d'extinction, ou les réactions de pollution, ne peuvent en aucun cas être considérées comme très rapides.

a. Modèles à fonction densité de probabilité (Pdf)

Il s'agit ici de bâtir une modélisation donnant accès directement à la densité de probabilité (Pdf) des grandeurs caractérisant l'écoulement. La version la plus simple de cette approche consiste à s'intéresser seulement à la Pdf des espèces et de la température ; des variables thermochimiques directement impliquées dans le calcul des taux de réactions.

Le nombre de ces variables thermochimiques dépend de la schématisation adoptée pour les processus chimiques, et aussi du fait que la flamme est parfaitement prémélangée, adiabatique ou non. Le cas d'une flamme de prémélange parfait, adiabatique, où la chimie peut être représentée par une réaction unique, conduit à une Pdf à une seule variable aléatoire. Si le prémélange n'est pas parfait, ou si la flamme n'est pas prémélangée, il faut au moins deux variables, dont l'une est la fraction de mélange. Si la flamme n'est pas adiabatique ou si la chimie est représentée avec plus d'espèces indépendantes, il faut rajouter des variables à la Pdf (enthalpie ou fractions massiques).

Dans le cas d'une flamme de prémélange où on pourrait se contenter d'une seule variable aléatoire, cette approche conduit à calculer la Pdf par une équation de transport avec un terme de réaction. Par exemple, avec le modèle de Dopazo et O'Brien [41] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{P}) + \frac{\partial}{\partial x_\alpha}(\bar{\rho}\tilde{u}_\alpha\tilde{P}) = & \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\bar{\rho}D_p \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_\alpha} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial Y_F} \left(\bar{\rho} \frac{6d}{\lambda_F^2} (\tilde{Y}_F - Y_F) \tilde{P} - \overset{0}{W}_F(Y_F) \tilde{P} \right) \end{aligned} \quad (2.39)$$

Cette équation peut se généraliser sans difficultés au cas où plusieurs variables aléatoires sont nécessaires, et elle peut ainsi s'appliquer aux flammes de diffusion ou à des flammes mixtes, et prendre en compte, dans une certaine mesure, une schématisation plus compliquée de la chimie de la combustion [71]. Le premier morceau du dernier terme de l'équation (2.39) est un modèle particulièrement crucial pour cette équation, qui représente le phénomène physique de mélange turbulent à petite échelle, souvent appelé : « micromélange ».

D'autres sous-modèles existent pour ce phénomène, par exemple le modèle de Curl qui a une forme intégrale et représente simplement le micromélange comme l'interaction de deux « particules » différentes prises au hasard et donnant deux particules identiques de caractéristiques égales à la moyenne arithmétique de celles des particules incidentes [72]. Précisons finalement que la résolution numérique d'une telle équation, lorsque la Pdf comporte plusieurs variables, nécessite des méthodes particulières du type de Monte Carlo [71].

b. Modèles à flammelettes

Lorsque la flamme comporte en son sein essentiellement une collection de flammelettes très semblables à des flammes laminaires, dont la structure interne reste très peu modifiée même si la turbulence les déplace continuellement de façon aléatoire, il est possible de simplifier le calcul de l'interaction turbulence-chimie.

Dans le cas des flammes de diffusion, on considère que la flamme turbulente est constituée seulement de flammelettes laminaires planes étirées, dans une configuration d'écoulement de type « point d'arrêt », en négligeant les autres configurations d'écoulements, dans lesquels la flamme n'est jamais stable. Si l'on étudie séparément de telles flammelettes de diffusion diverses plus ou moins étirées, on arrive à obtenir des relations directes donnant les fractions massiques de toute

espèce chimique i en fonction du scalaire conservé Φ (passif) et du taux d'étirement a (l'inverse d'un temps) [73]:

$$Y_i = Y_i(\Phi, a) \quad (2.40)$$

Ce sont ces relations qui peuvent prendre en compte toute la complexité de la chimie, et qui constituent la « bibliothèque » de flammelettes. Il suffit alors pour calculer toutes les valeurs moyennes, d'écrire en chaque point :

$$\tilde{Y}_i = \int_0^1 \int_0^\infty Y_i(\Phi, a) \tilde{P}_2(\Phi, a) d\Phi da \quad (2.41)$$

Il faut supposer alors :

$$\tilde{P}_2(\Phi, a) = \tilde{P}(\Phi) \tilde{P}_a(a) \quad (2.42)$$

C'est-à-dire l'indépendance statistique des fluctuations de Φ et a , en plus d'une forme particulière pour, qui est une donnée spécifique de la turbulence.

L'avantage d'une telle méthode est que l'on peut calculer les flammelettes séparément, et que sa lourdeur ne doit pas être couplée avec celle des calculs de la turbulence. Ensuite, le calcul de $\tilde{P}(\Phi)$ est suffisant pour résoudre le problème. Cette méthode a été proposée pour la première fois par K.N.C. Bray [73]. Une quantité cruciale qui intervient est $P_a(a)$, la répartition des taux d'étirement dans la turbulence. Malheureusement, cette quantité est moins bien connue que k ou epsilon ; aussi des travaux fondamentaux sont-ils encore nécessaires pour maîtriser les possibilités du modèle.

Dans le cas des flammes de prémélange, la supposition que la flamme est composée essentiellement de flammelettes (de prémélange) de type laminaire permet de relier directement le taux de réaction moyen \bar{w}_i de chaque espèce à une quantité nouvelle, la surface de flamme par unité de volume Σ . On a alors [73]:

$$\bar{w}_i = V_{D_i} \cdot \Sigma \quad (2.43)$$

avec V_{Di} vitesse de consommation de l'espèce i à la traversée de l'unité de surface de flamme.

Le calcul de V_{Di} peut se faire alors séparément, en considérant qu'il est une somme pondérée des différents V_{Di} individuels de chaque élément de la collection de flammelettes non turbulentes. L'étirement de chaque flammelette par l'écoulement doit être pris en compte, et peut-être aussi sa compression, si on ne néglige pas cette situation. Quelles que soient les hypothèses choisies, on est encore conduit à établir une « bibliothèque » donnant les valeurs des V_{Di} individuels des flammelettes. Le calcul de Σ peut alors être fait de deux façons différentes.

b.1 Le *modèle de Bray-Moss-Libby-Champion* donne pour cette quantité une formule algébrique qui ressemble à la formule Eddy- Break-Up. Il en résulte alors finalement que le taux de réaction moyen suit encore une formule semblable à (2.26), mais où la constante C_{EBU} n'est plus constante, mais dépend de la pondération choisie des étirements ou compressions des flammelettes. Cette pondération, qui varie d'un point à un autre de la flamme, est exprimée dans le modèle en fonction du nombre de Karlovitz qui est relié au nombre de Damköhler et au nombre de Reynolds.

b.2 Le *modèle dit de la flamme cohérente* propose une équation de bilan nouvelle, dont la forme initiale a été proposée par Marble et Broadwell pour une flamme de diffusion peu turbulente [74]. Cette équation a été transposée pour les flammes de prémélange par Veynante, Candel et Lacas [75]. Dans ce cas, V_{Di} est très reliée à la vitesse de propagation laminaire de la flamme, c'est en fait, une vitesse de consommation, qui dépend aussi de l'espèce considérée.

Tous les modèles à flammelettes sont limités aux cas où les flammelettes sont peu étirées, et ne sont que rarement éteintes. Certains modèles prennent en compte une extinction immédiate et définitive des flammelettes dès que le taux d'étirement dépasse une certaine valeur [73]. Mais il est connu que le comportement des flammelettes est alors instationnaire, et la prise en compte de cela dans les modèles à flammelettes n'est encore pas bien établie.

c. Modèles Lagrangiens

Dans le domaine du génie chimique, des équations Lagrangiennes pour l'évolution des particules fluides ont été proposées comme support des modèles représentant les phénomènes turbulents. Un modèle très simple, appelé IEM (interaction avec la moyenne), consiste à remplacer l'équation de bilan instantané exacte pour les Y_i [76]:

$$\rho \frac{dY_i}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} \rho Y_i + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \rho u_\alpha Y_i = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_\alpha} \right) + \dot{W}_i^0 \quad (2.44)$$

par une équation plus simple :

$$\rho \frac{dY_i}{dt} = \rho \frac{d\tilde{Y}_i - Y_i}{\tau_{ex}} + \dot{W}_i^0 \quad (2.45)$$

Ici, le terme de mélange entre les particules fluides adjacentes est remplacé par un modèle simulant les échanges de masse avec une particule fluide fictive, qui représente la moyenne statistique de toutes les particules fluides pouvant passer à un endroit donné, à un instant donné. Les échanges se font avec une fréquence $1/\tau_{ex}$, ou avec une période τ_{ex} , reliée à la turbulence régnant à cet endroit, à cet instant.

Il peut être montré que le modèle IEM [76] redonne aussi bien les équations classiques de \tilde{Y}_i et $\tilde{Y}_i''^2$ utilisées dans le modèle de la Pdf présumée que l'équation de la densité de probabilité du modèle de Dopazo et O'Brien, moyennant l'utilisation additionnelle d'un coefficient de diffusion turbulente pour modéliser le transport turbulent. On peut donc considérer que l'équation (2.45) est une forme « Lagrangienne » du modèle de micromélange de Dopazo et O'Brien. L'équation (2.45), appliquée à un nombre d'espèces à choisir, avec une certaine schématisation de la chimie, peut directement servir à reconstituer la Pdf des fluctuations de ces espèces.

d. Modèle de Libby-Williams

En 2000, Libby et Williams [77] ont proposé un modèle (LW) applicable à la combustion turbulente en prémélange partiel basé sur une Pdf présumée et sur une thermochimie fonction de deux variables, la fraction massique de combustible Y et la

fraction de mélange ξ . Les deux variables utilisées (Y, ξ) permettent de déterminer la composition du mélange en considérant les hypothèses de Schvab-zeldovitch (une réaction globale, $Le = 1, Ma < 0.3$). La Pdf jointe des deux variables Y et ξ est composée de deux pics de Dirac [77]:

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

La Pdf est donc définie par cinq paramètres Y_1, ξ_1, Y_2, ξ_2 et α . Si les premiers et seconds moments des scalaires sont résolus, les positions des pics de Dirac peuvent être obtenues par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \tilde{\xi} - \left(\frac{(1-\alpha)}{\alpha} \cdot \left(\overline{\rho \xi^{n2}} \right) / \bar{\rho} \right)^{1/2} & Y_1 &= \tilde{Y} - \left(\frac{(1-\alpha)}{\alpha} \cdot \left(\overline{\rho Y^{n2}} \right) / \bar{\rho} \right)^{1/2} \\ \xi_2 &= \tilde{\xi} + \left(\frac{\alpha}{(1-\alpha)} \cdot \left(\overline{\rho \xi^{n2}} \right) / \bar{\rho} \right)^{1/2} & Y_2 &= \tilde{Y} + \left(\frac{\alpha}{(1-\alpha)} \cdot \left(\overline{\rho Y^{n2}} \right) / \bar{\rho} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (2.47)$$

La seule inconnue restante est l'amplitude α .

Il a été démontré que la droite support des deux pics de Dirac (D)

$(Y - \tilde{Y}) / (\xi - \tilde{\xi}) = \pm d$ a une pente d fonction des variances des scalaires [77]:

$$d = \left(\frac{\overline{\rho Y^{n2}}}{\overline{\rho \xi^{n2}}} \right)^{1/2} \quad (2.48)$$

En introduisant l'abscisse g le long de la droite D , les positions des pics s'expriment alors [77]:

$$g_1 = \tilde{g} - \left(\frac{(1-\alpha)}{\alpha} \cdot \left(\overline{\rho g^{n2}} \right) / \bar{\rho} \right)^{1/2} \quad g_2 = \tilde{g} + \left(\frac{\alpha}{(1-\alpha)} \cdot \left(\overline{\rho g^{n2}} \right) / \bar{\rho} \right)^{1/2} \quad (2.49)$$

Les moments de g sont définis de la façon suivante : $\tilde{g} = 0$ et $\overline{\rho g^{n2}} = \overline{\rho \xi^{n2}} + \overline{\rho Y^{n2}}$.

La figure 2.9 représente un exemple des pics de Dirac dans l'espace des compositions d'un prémélange partiel pauvre. Pour déterminer l'amplitude $\overline{\rho Y^{n2}}$, Libby et Williams ont proposé de résoudre une équation de transport pour la

corrélation croisée $\overline{\rho Y'' \xi''}$. Cependant, cette proposition n'est pas réalisable car la Pdf à deux pics de Dirac impose directement une relation de dépendance entre la covariance $\overline{\rho Y'' \xi''}$ et les variances $\overline{\rho \xi''^2}, \overline{\rho Y''^2}$ [78] :

$$\overline{\rho Y'' \xi''} = \sqrt{\overline{\rho \xi''^2} \cdot \overline{\rho Y''^2}} \quad (2.50)$$

Ribert et al. [78] ont alors proposé de déterminer l'amplitude α en considérant que la valeur de α obtenue lorsque les pics sont à leur position extrême sur la droite D , est valable quelle que soient les positions des pics :

$$\alpha = \frac{g_{max} - \tilde{g}}{g_{max} - g_{min}} \quad (2.51)$$

Les valeurs limites de g , g_{max} et g_{min} , sont déterminées par les différentes droites de l'espace des compositions, (voir figure 2.9).

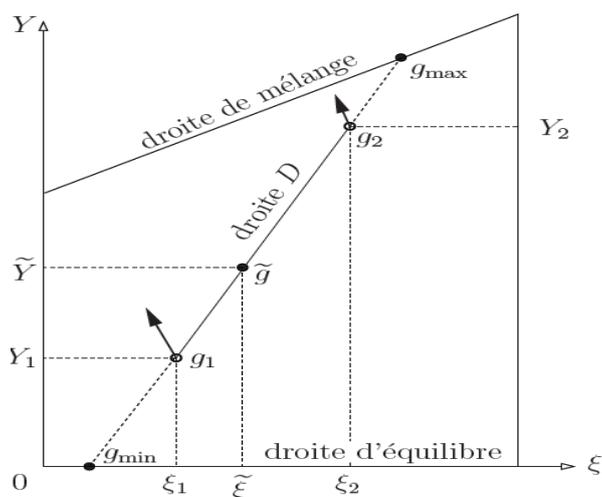


Figure 2.9 : Postions des pics de Dirac dans l'espace des compositions (mélange pauvre)

L'analyse introduite par Libby et Williams puis celle de Ribert et al., sont à l'origine du modèle LW-P proposé et développé par Robin et al. [79] à quatre pics de Dirac.

Dans ce chapitre, nous avons présenté une variété de modèles permettant de calculer le taux de réaction chimique moyen pour chaque régime de flammes. Quelle

que soit l'approche du problème utilisé, ce taux de réaction chimique moyen est directement ou indirectement dépendant du mélange turbulent. Ce mélange turbulent est quantifié par le biais de la dissipation scalaire ou du terme de micromélange dans l'équation de la Pdf.

Le modèle que nous décrivons dans la troisième partie de ce mémoire, est un développement du modèle LW décrit succinctement au paragraphe précédent. Il utilise une approche par Pdf présumée qui permet de prendre en compte un temps chimique fini, sans utiliser une équation pour la Pdf. Le taux de réaction chimique moyen est alors explicitement calculé mais un modèle algébrique pour la dissipation scalaire est nécessaire puisque l'équation pour ce terme n'est pas encore résolue.

Chapitre 3

Présentation du modèle Libby
Williams-Poitiers (LW-P)

Dans ce chapitre, il est question de présenter un modèle relativement originale nommé LW-P (comme Libby William Poitiers) pour décrire le prémélange partiel. L'originalité provient de plusieurs aspects. D'abord, le formalisme mathématique du LW-P permet de retrouver les expressions utilisées dans le prémélange parfait et dans le non prémélange. Contrairement aux modèles précédents (BML, LW) du prémélange partiel, qui supposent – à priori- une Indépendance statistique entre les variables thermochimiques (ζ et c ou ζ et Y_f), le modèle LW-P n'émet aucune hypothèse là-dessus et résous plutôt, une équation de transport pour la covariance $\widetilde{\zeta Y_f}$; permettant entre autre, de quantifier le mélange, la production chimique et leur mutuelle interaction à grande et petites échelles.

Le modèle est basé sur l'analyse originale de Libby et Williams [77], voir paragraphe 2.6.2.a. Ces travaux ont ensuite été poursuivis au LCD à Poitiers et ont aboutis au modèle LW-P.

Le modèle utilise les approximations de Schvab-Zeldovitch (une réaction globale, $Le=1$, $Ma < 0.3$) introduites dans le second chapitre de ce mémoire. Par conséquent, l'état thermochimique du mélange est déterminé par deux variables, la fraction de mélange ζ définie par la relation (1.5) et la fraction massique de combustible Y .

Les paramètres de forme de la Pdf jointe $\tilde{P}(Y, \zeta)$ sont déterminés à partir des premiers et seconds moments de ζ et Y : la fraction de mélange moyenne $\tilde{\xi}$, sa variance $\tilde{\xi}^2$, la fraction massique moyenne \tilde{Y} , sa variance \tilde{Y}^2 et la covariance $\widetilde{\zeta Y}$. La résolution d'équations de transport pour ces cinq quantités moyennes est donc nécessaire. Les transports turbulents sont modélisés par le modèle $k - \epsilon$.

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

3.1. Chimie de combustion

Le temps chimique est introduit dans les équations par l'expression instantanée du taux de consommation de combustible. Ce taux de consommation peut être exprimé par la loi d'Arrhenius (1.14) comme cela a été fait dans les travaux de Ribert et al. [78] et Robin et al. [79, 80]. Les constantes a et b sont, dans ces travaux, égales à l'unité et le coefficient pré-exponentiel est ajusté au mélange réactif considéré dans chaque étude. Les variations de richesse sont prises en compte dans cette expression du taux de disparition de combustible par le biais de la température $T(\xi, Y)$ et des fractions massiques de réactifs Y et $Y_{O_2}(\xi, Y)$. Cependant, cette représentation globale de la cinétique n'est en générale pas valable sur tout le domaine de richesse. Les travaux de Fernandez-Tarrazo et al. [81] ont confirmé qu'une représentation globale de la cinétique pouvait donner des résultats satisfaisants sur tout le domaine de richesse à condition d'utiliser un facteur pré-exponentiel et une température d'activation qui soient des fonctions de la richesse.

De façon à rendre la loi d'Arrhénius pour la réaction globale applicable à un large domaine de richesse, Robin et al. l'expriment de la façon suivante [79]:

$$\omega = \rho \Omega = \rho K(\xi)(Y - Y_{min}(\xi)) \exp[-T_a/T] \quad (3.1)$$

La température d'activation T_a est considérée constante mais le coefficient pré-exponentiel K est fonction de la fraction de mélange. La valeur minimale possible pour la fraction massique de combustible Y_{min} est également fonction de la fraction de mélange. Cette valeur limite est définie par les droites de combustion complète du domaine de définition des couples (ξ, Y) (voir Figure. 2. 9). Une tabulation du facteur pré exponentiel $K(\xi)$ est créée à l'aide d'un logiciel de calcul de flamme laminaire 1D de type Chemkin (Premix ou Cantera). Les valeurs de $K(\xi)$ sont ajustées de façon à obtenir les mêmes vitesses de propagation que celles obtenues avec des schémas cinétiques détaillés (le GRI 2.11 dans le cas de la combustion de méthane dans l'air) [66].

3.2. Espace des Compositions

Le domaine de définition de la Pdf est limité par trois droites (voir Figure. 2.9 et Figure. 3.1) : la droite de mélange où Y atteint sa valeur maximale $Y = Y_{max} = \xi$, la droite de combustion complète pauvre où Y atteint sa valeur minimale pour des cas

pauvres $Y = Y_{\min} = 0$ et la droite de combustion complète riche où Y atteint sa valeur minimale pour des cas riches $Y = Y_{\min} = (\zeta - \zeta_{st}) / (1 - \zeta_{st})$.

La variable d'avancement Y est donc comprise entre Y_{\min} (gaz entièrement brûlés) et Y_{\max} (gaz frais). Ces limites sont des fonctions connues de la fraction de mélange ζ [66]:

$$Y_{\max}(\zeta) = \zeta \quad \text{et} \quad Y_{\min}(\zeta) = A(\zeta)(\zeta - \zeta_{st}) \quad (3.2)$$

$A(\zeta)$ représente le coefficient directeur de la droite $Y_{\min}(\zeta)$, il est donc discontinu. $A(\zeta) = 0$ en prémélange pauvre et $A(\zeta) = 1/(1 - \zeta_{st})$ en prémélange riche. En introduisant la fonction de Heaviside $H(\zeta - \zeta_{st})$, l'expression suivante est obtenue [66] :

$$A(\zeta) = \frac{1}{1 - \zeta_{st}} H(\zeta - \zeta_{st}) \quad (3.3)$$

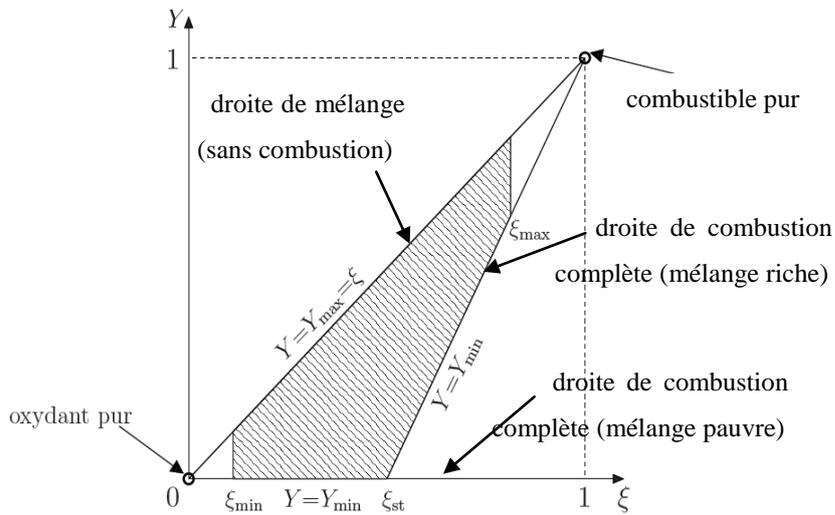


Figure 3.1 : Domaine d'existence des couples (ζ, Y) [77]

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

3.3. Paramètres de la Pdf

Le modèle LW-P est un modèle basé sur l'existence d'une Pdf formée de quatre distributions de Dirac. On considère de plus que pour chaque valeur de la richesse, il existe deux avancements (Y_a, Y_b) différents (voir figure 3.2).

Les paramètres de la PDF, c'est-à-dire les positions et les amplitudes des pics de Dirac dans l'espace des compositions, sont déterminés à partir des premiers et seconds moments des scalaires : $\tilde{\xi}$, $\tilde{\xi}^{n2}$, \tilde{Y} , \tilde{Y}^{n2} , $\tilde{\xi}^n \tilde{Y}^n$.

La Pdf jointe de fraction de mélange et de fraction massique de combustible $\tilde{P}(Y, \xi)$ est tout d'abord exprimée par deux distributions de Dirac en deux valeurs de la fraction de mélange [66]:

$$\tilde{P}(Y, \xi) = \alpha \tilde{P}_a(Y) \delta(\xi - \xi_a) + (1 - \alpha) \tilde{P}_b(Y) \delta(\xi - \xi_b) \quad (3.4)$$

Cette expression fait apparaître les Pdf de Y conditionnées en ξ_a et ξ_b . Ces Pdf sont, à leur tour, exprimées par deux distributions de Dirac [66]:

$$\begin{aligned} \tilde{P}_a(Y) &= \beta \delta(Y - Y_{a1}) + (1 - \beta) \delta(Y - Y_{a2}) \\ \tilde{P}_b(Y) &= \gamma \delta(Y - Y_{b1}) + (1 - \gamma) \delta(Y - Y_{b2}) \end{aligned} \quad (3.5)$$

Les quatre pics de Dirac résultant de la Pdf jointe sont représentés dans l'espace des compositions sur la figure 3.2.

Finalement, La Pdf jointe est définie par neuf paramètres, $\alpha, \beta, \gamma, \xi_a, \xi_b, Y_{a1}, Y_{a2}, Y_{b1}$ et Y_{b2} qui sont à déterminer.

Les quantités moyennes transportées $\tilde{\xi}$, $\tilde{\xi}^{n2}$, \tilde{Y} , \tilde{Y}^{n2} et $\tilde{\xi}^n \tilde{Y}^n$ fournissent cinq relations [66]:

$$\tilde{\xi} = \alpha \xi_a + (1 - \alpha) \xi_b \quad (3.6)$$

$$\tilde{\xi}^{n2} = \alpha \xi_a^2 + (1 - \alpha) \xi_b^2 - \tilde{\xi}^2 = \alpha(1 - \alpha)(\xi_b - \xi_a)^2$$

$$\tilde{Y} = \alpha \tilde{Y}_a + (1 - \alpha) \tilde{Y}_b \quad (3.7)$$

$$\tilde{Y}^{n2} = \alpha (\tilde{Y}_a^{n2} + \tilde{Y}_a^2) + (1 - \alpha) (\tilde{Y}_b^{n2} + \tilde{Y}_b^2) - \tilde{Y}^2$$

$$\tilde{\xi}^n \tilde{Y}^n = \alpha \tilde{Y}_a \xi_a + (1 - \alpha) \tilde{Y}_b \xi_b - \tilde{Y} \tilde{\xi} = \alpha(1 - \alpha) (\tilde{Y}_b - \tilde{Y}_a) (\xi_b - \xi_a) \quad (3.8)$$

Ces expressions font apparaître les moyennes et variances conditionnées en ξ_a et ξ_b , notées $\tilde{Y}_a, \tilde{Y}_b, \tilde{Y}_a^{n^2}, \tilde{Y}_b^{n^2}$. Les Pdf conditionnées permettent d'exprimer ces quantités en fonction des paramètres que l'on cherche à déterminer [66]:

$$\tilde{Y}_a = \beta \tilde{Y}_{a1} + (1-\beta) \tilde{Y}_{a2} \quad (3.9)$$

$$\tilde{Y}_a^{n^2} = \beta Y_{a1}^2 + (1-\beta) Y_{a2}^2 - \tilde{Y}_a^2 = \beta(1-\beta)(Y_{a2} - Y_{a1})^2$$

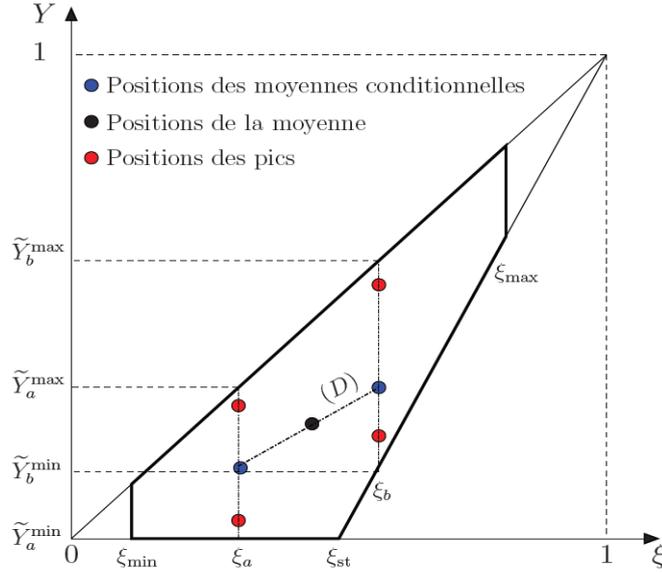


Figure 3.2 : Répartition des pics de Dirac dans le domaine d'existence

$$\tilde{Y}_b = \gamma Y_{b1} + (1-\gamma) Y_{b2} \quad (3.10)$$

$$\tilde{Y}_b^{n^2} = \gamma Y_{b1}^2 + (1-\gamma) Y_{b2}^2 - \tilde{Y}_b^2 = \gamma(1-\gamma)(Y_{b2} - Y_{b1})^2$$

Une sixième relation est obtenue en considérant que les variances normalisées conditionnées en ξ_a et ξ_b sont égales [78]:

$$\frac{\tilde{Y}_a^{n^2}}{(\tilde{Y}_a^{max} - \tilde{Y}_a)(\tilde{Y}_a - \tilde{Y}_a^{min})} = \frac{\tilde{Y}_b^{n^2}}{(\tilde{Y}_b^{max} - \tilde{Y}_b)(\tilde{Y}_b - \tilde{Y}_b^{min})} \quad (3.11)$$

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

Finalement, les six relations (3.6),(3.7),(3.8) et (3.11) permettent d'obtenir les six paramètres de la Pdf suivant [66]:

$$\begin{aligned}\xi_a &= \tilde{\xi} - \sqrt{\frac{(1-\alpha)}{\alpha}} \tilde{\xi}^{n2} \\ \xi_b &= \tilde{\xi} + \sqrt{\frac{\alpha}{(1-\alpha)}} \tilde{\xi}^{n2}\end{aligned}\quad (3.12)$$

$$\begin{aligned}Y_{a1} &= \tilde{Y}_a - \sqrt{\frac{(1-\beta)}{\beta}} \tilde{Y}_a^{n2} \\ Y_{a2} &= \tilde{Y}_a + \sqrt{\frac{\beta}{(1-\beta)}} \tilde{Y}_a^{n2}\end{aligned}\quad (3.13)$$

$$\begin{aligned}Y_{b1} &= \tilde{Y}_b - \sqrt{\frac{(1-\gamma)}{\gamma}} \tilde{Y}_b^{n2} \\ Y_{b2} &= \tilde{Y}_b + \sqrt{\frac{\gamma}{(1-\gamma)}} \tilde{Y}_b^{n2}\end{aligned}\quad (3.14)$$

Les trois paramètres toujours inconnus sont les amplitudes α , β et γ des distributions de Dirac. Trois relations, permettant de les exprimer, sont nécessaires pour que les paramètres de la Pdf soient entièrement déterminés.

Deux méthodes sont proposées. Dans la première, on considère que les expressions des amplitudes, lorsque les pics sont sur les bords du domaine, sont valables quelles que soient leurs positions. Les amplitudes s'expriment alors par les relations suivantes [66]:

$$\alpha = \frac{\xi_{max} - \tilde{\xi}}{\xi_{max} - \xi_{min}} \quad \beta = \frac{Y_a^{max} - Y_a}{\tilde{Y}_a^{max} - \tilde{Y}_a^{min}} \quad \gamma = \frac{Y_b^{max} - Y_b}{\tilde{Y}_b^{max} - \tilde{Y}_b^{min}} \quad (3.15)$$

Les valeurs maximales et minimales sont déterminées à partir du domaine de définition de la Pdf.

Cette méthode peut poser des problèmes lorsque les positions des distributions s'écartent de leurs positions limites. En effet, on peut se retrouver dans des situations où on obtient la valeur moyenne avec des amplitudes des distributions très différentes [82]. La seconde méthode, proposée par Champion et Libby [83], consiste à utiliser le moment du troisième ordre. Afin d'éviter de dériver des équations de transport supplémentaires, le moment d'ordre 3 est exprimé en fonction des deux premiers moments. La relation (3.16) est utilisée pour calculer le moment d'ordre 3, cette relation est issue des propriétés des fonctions β . Pour une variable H , comprise entre H_{min} et H_{max} , on montre que [83] :

$$\mathcal{H}^{n3} = 2\mathcal{H}^{n2^2} \frac{H_{max} - 2\tilde{H} + H_{min}}{(H_{max} - \tilde{H})(\tilde{H} - H_{min}) + \mathcal{H}^{n2}} \quad (3.16)$$

Le moment d'ordre 3 peut également être exprimé en considérant une PDF à 2 pics de Dirac H_1 et H_2 d'amplitude respective μ et $1 - \mu$ [66]:

$$\widetilde{H}^{n3} = \mu(1-\mu)(2\mu-1)(H_2 - H_1)^3 \quad (3.17)$$

A l'aide de ces deux relations on peut exprimer l'amplitude μ en fonction des deux premiers moments [66]:

$$\begin{aligned} \mu &= 0,5 \pm 0,5\sqrt{b} \quad \text{avec } b = \frac{\widetilde{H}^{n3^2}}{4\widetilde{H}^{n2^3} + \widetilde{H}^{n3^2}} \\ \text{et} & \\ b &= \frac{\widetilde{H}^{n2}(H_{max} - 2\tilde{H} + H_{min})^2}{\widetilde{H}^{n2}(H_{max} - 2\tilde{H} + H_{min})^2 + ((H_{max} - \tilde{H})(\tilde{H} - H_{min}) + \widetilde{H}^{n2})^2} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Cette relation est utilisée pour déterminer les amplitudes α , β et γ avec respectivement les premier et second moments $\tilde{\xi}$ et $\tilde{\xi}^{n2}$, \tilde{Y}_a et \tilde{Y}_a^{n2} , \tilde{Y}_b et \tilde{Y}_b^{n2} . Les valeurs maximales et minimales sont déterminées à partir du domaine de définition de la Pdf.

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

3.4. Comportement de la Pdf

La méthode de construction de la Pdf permet de retrouver les différents cas limites, comme illustré par la figure 3.3. Tout d'abord, lorsque la variance de fraction de mélange est nulle, la Pdf se réduit à deux pics de Dirac positionnés sur une droite verticale (cas 1 sur la figure 3.3) ; c'est le cas d'un prémélange parfait. Les positions des différentes distributions sont alors uniquement contrôlées par la fraction massique moyenne de combustible et sa variance. Si la variance de fraction massique est également nulle, tous les pics sont sur le point moyen (cas 2 sur la figure 3.3). Si la variance de fraction massique tend vers sa valeur maximale, les pics sont rejetés près des bords du domaine (cas 3 sur la figure 3.3). Dans ce cas, la combustion a lieu en régime de flammelettes, le modèle LW-P tend vers le modèle BML et les formes finales des taux de réaction chimique moyen sont les mêmes [84].

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

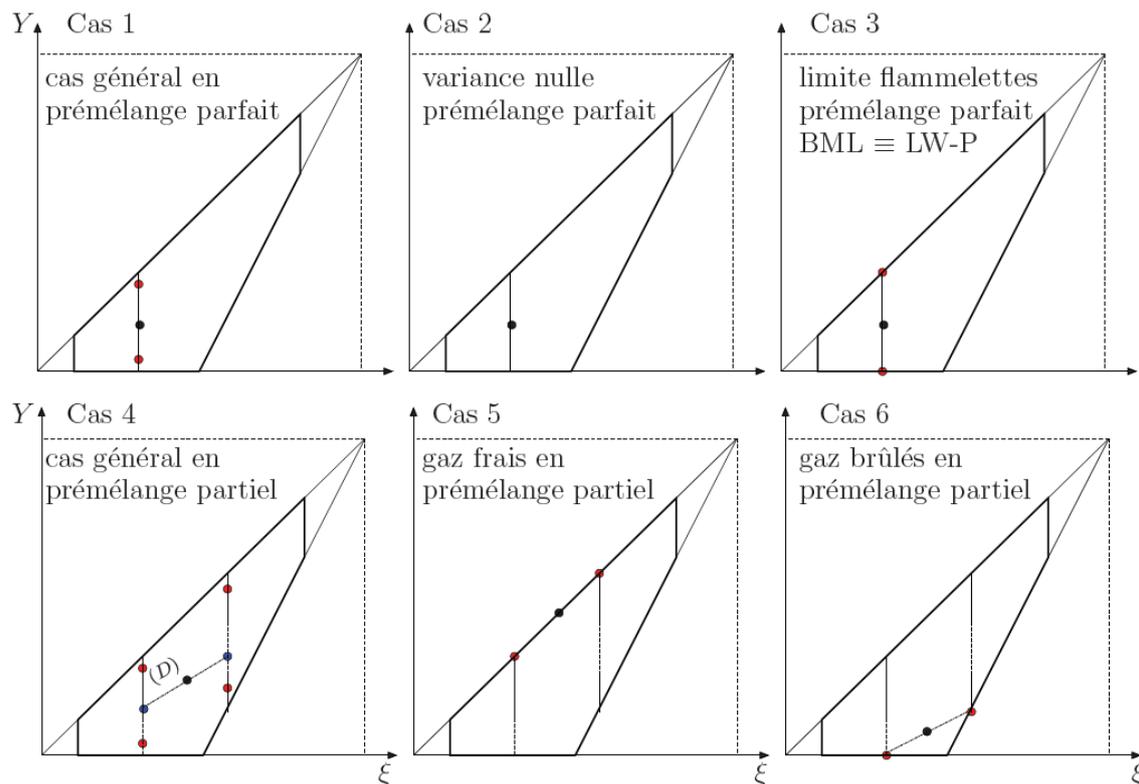


Figure 3.3 : Comportement de la PDF

Lorsque la variance de fraction de mélange est non nulle et que le point moyen est dans les gaz frais (cas 5 sur la figure 3.3) ou dans les gaz brûlés (cas 6 sur la figure 3.3), la PDF se réduit encore à deux pics de Dirac. Dans ces cas, deux des quatre pics de Dirac sont sur la moyenne conditionnelle \tilde{Y}_a et les deux autres sur la moyenne conditionnelle \tilde{Y}_b .

Le modèle à Pdf présumée présenté dans ce chapitre, qui consiste à répartir de quatre distributions de Dirac dans l'espace des compositions permet une analyse approfondie des phénomènes induits par la combustion à richesse variable. Un deuxième avantage de cette approche mathématique est la simplicité avec laquelle les différents termes non fermés des équations de transport peuvent être modélisés.

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

$$\tilde{\xi} = \sum_{q=1}^4 \alpha_q \xi_q \quad \tilde{Y} = \sum_{q=1}^4 \alpha_q Y_q \quad \tilde{u}_i = \sum_{q=1}^4 \alpha_q \bar{u}_{i,q} \quad (3.19)$$

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

$$\begin{aligned} \alpha_1 = \alpha_{a1} = \alpha\beta & \quad \alpha_2 = \alpha_{a2} = \alpha(1-\beta) \\ \alpha_3 = \alpha_{b1} = (1-\alpha)\gamma & \quad \alpha_4 = \alpha_{b2} = (1-\alpha)(1-\gamma) \end{aligned} \quad (3.20)$$

3.5. Expression des flux turbulents

Pour rappel, en plus des équations de continuité, de quantité de mouvement et de l'énergie (sans compter une équation pour l'énergie cinétique et une équation pour sa dissipation), le modèle LW-P résous cinq équations de transport pour les variables thermochimiques, leurs variances et la covariance [66] :

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

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\xi}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{\xi}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' \xi''} \right) \quad (3.21)$$

- L'équation d'évolution de la fraction massique moyenne

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{Y}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' Y''} \right) + \bar{\omega} \quad (3.22)$$

- L'équation d'évolution pour la variance de fraction de mélange

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \xi''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\tilde{u}_k \overline{\rho \xi''^2}) &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial \xi''^2}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' \xi''^2} \right) + \\ - 2 \overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} - 2 \overline{\rho u_k'' \xi''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k} & \end{aligned} \quad (3.23)$$

- L'équation d'évolution pour la variance de fraction massique

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho Y''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\tilde{u}_k \overline{\rho Y''^2}) &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Y''^2}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' Y''^2} \right) + \\ - 2 \overline{\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k} \frac{\partial Y''}{\partial x_k}} - 2 \overline{\rho u_k'' Y''} \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_k} + 2 \overline{Y'' \omega} & \end{aligned} \quad (3.24)$$

- L'équation d'évolution pour la covariance

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\overline{\rho Y'' \xi''} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\tilde{u}_k \overline{\rho Y'' \xi''} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Y'' \xi''}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' Y'' \xi''} \right) + \\ - 2 \overline{\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' Y'' \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} - \overline{\rho u_k'' \xi'' \frac{\partial Y''}{\partial x_k}} + \xi'' \overline{\omega} \end{aligned} \quad (3.25)$$

Les équations précédentes (3.21) à (3.25) contiennent des flux scalaires turbulents ($\widetilde{u_i'' \Phi''}$) qu'il faudrait fermer (par modélisation, ou par équation de transport).

3.5.1. Termes dus à la réaction chimique

La forme de la PDF présentée au cours du chapitre précédent et l'expression (3.1) pour le taux de production chimique permet de calculer les différents termes moyens faisant intervenir la réaction chimique. Tout d'abord, le terme de consommation $\overline{\omega}$ introduit par l'équation (3.22) pour la fraction massique de combustible moyenne s'exprime simplement en fonction des paramètres de la Pdf :

$$\overline{\omega} = \overline{\rho \widetilde{\Omega}} = \overline{\rho} \iint \Omega(\xi, Y) \tilde{P}(\xi, Y) d\xi dY = \overline{\rho} \sum_{q=1}^4 \alpha_q \Omega(\xi_q, Y_q) \quad (3.26)$$

De la même façon le terme $\overline{Y'' \omega}$ intervenant dans l'équation (3.24) pour la variance de fraction massique de combustible s'exprime par :

$$\overline{Y'' \omega} = \overline{\rho \widetilde{Y'' \Omega}} = \overline{\rho} \sum_{q=1}^4 \alpha_q (Y_q - \tilde{Y}) \Omega(\xi_q, Y_q) \quad (3.27)$$

Enfin, le terme $\overline{\xi'' \omega}$ intervenant dans l'équation (3.25) pour la covariance s'écrit :

$$\overline{\xi'' \omega} = \overline{\rho \widetilde{\xi'' \Omega}} = \overline{\rho} \sum_{q=1}^4 \alpha_q (\xi_q - \tilde{\xi}) \Omega(\xi_q, Y_q) \quad (3.28)$$

3.5.2. Termes dus à la diffusion

Pour le modèle LW-P du premier ordre, tous les termes de diffusion turbulente sont modélisés par une loi gradient :

$$\overline{\rho u_k'' \xi''} = -\overline{\rho} D_T \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k} \quad \overline{\rho u_k'' Y''} = -\overline{\rho} D_T \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_k} \quad (3.29)$$

Les flux turbulents des variances des scalaires s'écrivent alors :

$$\overline{\rho u_k'' Y''^2} = -\overline{\rho} D_T \frac{\partial \tilde{Y}''^2}{\partial x_k} \quad \overline{\rho u_k'' \xi''^2} = -\overline{\rho} D_T \frac{\partial \tilde{\xi}''^2}{\partial x_k} \quad \overline{\rho u_k'' \xi'' Y''} = -\overline{\rho} D_T \frac{\partial \tilde{\xi}'' Y''}{\partial x_k} \quad (3.30)$$

Le coefficient de diffusion turbulente D_T est le rapport de la viscosité turbulente μ_T sur le nombre de Schmidt turbulent σ_T : $D_T = \mu_T / \sigma_T$ où $\mu_T = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}}$ et $C_\mu = 0,09$.

3.5.3. Termes de dissipation scalaire

Pour le transport des variances, des termes additionnels se font apparaître, en sus des flux turbulents scalaires : ce sont des termes traduisant des fluctuations à petites échelles, appelés dissipation scalaires :

Pour la dissipation scalaire de la fraction de mélange :

$$\bar{\rho} \tilde{\varepsilon}_\xi = \overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} \quad (3.31)$$

Pour la dissipation scalaire de la fraction massique du combustible :

$$\bar{\rho} \tilde{\varepsilon}_Y = \overline{\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k} \frac{\partial Y''}{\partial x_k}} \quad (3.32)$$

Pour la dissipation scalaire de la covariance :

$$\bar{\rho} \tilde{\varepsilon}_{Y\xi} = \overline{\rho D \frac{\partial Y''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} \quad (3.33)$$

Développer des expressions de fermeture pour ces termes, est l'une des tâches les plus cruciales dans le domaine de la combustion turbulente. En effet, ces termes décrivent le mélange, la production chimique et l'interaction entre chimie et turbulence à petites échelles [85]. Pour le cas de la fraction de mélange (scalaire passif), la dissipation scalaire est tout le temps exprimée grâce à un modèle de relaxation linéaire [86] :

$$\bar{\rho} \tilde{\varepsilon}_\xi = D \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k} = \frac{1}{C_\xi} \overline{\rho \xi''^2} \cdot \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \quad (3.34)$$

La constante C_ξ est de l'ordre de 0.5 [86].

Pour la fraction massique du combustible et la covariance, la fermeture dépend en fait du régime de combustion (structure interne de la flamme) où la grandeur du nombre de Damkohler est décisive.

Dans le cas d'un temps chimique infiniment grand (chimie lente) devant le temps de mélange turbulent, ce qui revient à dire que pour des petits nombres de Damkohler ($Da = \tau_{turb}/\tau_{chem}$), la dissipation des fluctuations de la variable réactive et passive sont similaires [87] ce qui permet d'écrire :

$$\bar{\rho} \tilde{\epsilon}_Y^{(s)} = D \overline{\frac{\partial Y''}{\partial x_k} \frac{\partial Y''}{\partial x_k}} = \frac{1}{C_Y} \overline{\rho Y''^2} \cdot \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \quad (3.35)$$

$$\bar{\rho} \tilde{\epsilon}_{Y\xi}^{(s)} = D \overline{\frac{\partial Y''}{\partial x_k} \frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} = \frac{1}{C_{Y\xi}} \overline{\rho Y'' \xi''} \cdot \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \quad (3.36)$$

Les constantes sont du même ordre que celle de la fraction de mélange et l'exposant (s) est relatif à la chimie lente. L'emploi de cette fermeture revient à considérer que les spectres des fluctuations scalaires sont pleinement développés et que les taux de mélange aux petites échelles sont contrôlés par la production des fluctuations aux grandes échelles. En revanche, lorsque la chimie est infiniment rapide (hauts nombres de Damkohler), les fluctuations scalaires sont contrôlées par la réaction chimique et les expressions des dissipations peuvent se mettre sous la forme [88] :

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \tilde{\epsilon}_Y^{(f)} = & -(\tilde{Y}_{max} - 2\tilde{Y} + \tilde{Y}_{min}) \cdot \bar{\omega} + \overline{2Y'' \omega} - \frac{(1+\tilde{A})(1-\tilde{A})}{\tilde{Y}_{max} - \tilde{Y}_{min}} \frac{\overline{\rho \xi''^2}}{\bar{\rho}} \cdot \bar{\omega} + \\ & + (1+\tilde{A}) \left\{ \lambda + (1-\lambda)\tilde{A} \right\} \left\{ \bar{\rho} \epsilon_\xi + 2\overline{\rho u_k'' \xi''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k} \right\} + \tilde{A} \cdot \bar{\rho} \epsilon_\xi + \\ & + (1+\tilde{A}) \left\{ -\overline{\rho u_k'' \xi''} \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' Y''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k} \right\} \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \tilde{\epsilon}_{Y\xi}^{(f)} = & \overline{\xi'' \omega} + \left\{ \lambda + (1-\lambda)\tilde{A} \right\} \left\{ \bar{\rho} \epsilon_\xi + 2\overline{\rho u_k'' \xi''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k} \right\} + \\ & - \overline{\rho u_k'' \xi''} \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_k} - \overline{\rho u_k'' Y''} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k} - \frac{1-\tilde{A}}{\tilde{Y}_{max} - \tilde{Y}_{min}} \frac{\overline{\rho \xi''^2}}{\bar{\rho}} \bar{\omega} \end{aligned} \quad (3.38)$$

avec $\lambda = \frac{\tilde{Y} - \tilde{Y}_{min}}{\tilde{Y}_{max} - \tilde{Y}_{min}}$, $\tilde{A} = \frac{\tilde{Y}_{min}}{\tilde{\xi} - \xi_{st}}$ et l'exposant (f) est relatif à la chimie infiniment rapide.

Sachant que dans les cas du prémélange partiel, des gradients locaux de richesse se rencontrent pour des raisons de « mauvais » mélanges entre combustible et oxydant

ou des effets d'entraînement entre gaz frais et gaz brûlés, toutes les notions relatives à la structure de la flamme (épaisseur thermique de flamme, hauteur de flamme, vitesse laminaire de propagation, nombre de Damkohler, ...) ne seront que locales. La combustion peut alors passer d'un régime de flamelettes à un régime de flammes épaissies et ce, dans le même mélange.

Afin de retrouver les deux limites précédentes, à savoir la chimie lente et la chimie infiniment rapide, une technique de pontage (Bridging technique) via un facteur de ségrégation S est utilisé, et proposons d'exprimer les formes générales des dissipations scalaires comme :

$$\bar{\rho} \tilde{\epsilon}_Y = (1-S) \bar{\rho} \tilde{\epsilon}_Y^{(s)} + S \bar{\rho} \tilde{\epsilon}_Y^{(f)} \quad (3.39)$$

$$\bar{\rho} \tilde{\epsilon}_{Y\xi} = (1-S) \bar{\rho} \tilde{\epsilon}_{Y\xi}^{(s)} + S \bar{\rho} \tilde{\epsilon}_{Y\xi}^{(f)} \quad (3.40)$$

Le facteur de ségrégation s'annule quant le temps chimique est infini et tend vers l'unité pour une chimie infiniment rapide.

Les équations moyennes pour la fraction massique du combustible (3.22) et pour la fraction du mélange (3.21) font apparaître des flux scalaires turbulents $\widetilde{u_k'' Y''}$ et $\widetilde{u_k'' \xi''}$. Ce cas est identique à l'équation pour la variable moyenne d'avancement (\tilde{c}), qui dans le cas d'un prémélange parfait, fait apparaître un terme de flux de type $\widetilde{u_k'' c''}$.

Ces termes sont souvent modélisés par une approximation de "transport gradient", qui conduit à une relation de type :

$$\widetilde{u_k'' c''} = -D_T \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_k} \quad (3.41)$$

Nous allons illustrer par un exemple simple, que le flux turbulent peut - dans certaines régions de l'écoulement - avoir le même signe que le gradient moyen, ce qui conduit à une invalidité de la fermeture (3.40).

Considérons un écoulement 1D, turbulent réactif normal au front de flamme moyen, comme représenté dans la figure 3.4.

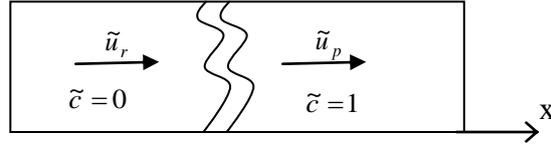


Figure 3.4 : Représentation d'une flamme de prémélange turbulente

La variable d'avancement moyenne \tilde{c} augmente à la traversé de la flamme moyenne ($\tilde{c} = 0 \rightarrow 1$), le gradient $\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x}$ est donc positif. D'autre part, la Pdf jointe de la vitesse et de l'avancement s'exprime comme [66] :

$$\tilde{P}(u_k, c; x, t) = \alpha(x, t) \delta(c) P(u_k |_{c=0}) + \beta(x, t) \delta(1-c) P(u_k |_{c=1}) + O(1/D_a) \quad (3.42)$$

On montre que le flux turbulent selon la forme de la Pdf, s'exprime comme [66] :

$$\widetilde{u_k'' c''} = \tilde{c}(1 - \tilde{c})(\bar{u}_p - \bar{u}_r) \quad (3.43)$$

où

$$\bar{u}_p = \int u P(u |_{c=1}) du; \bar{u}_r = \int u P(u |_{c=0}) du \quad (3.44)$$

sont les vitesses moyennes conditionnées dans les gaz brûlés et dans les gaz frais, respectivement.

Le principe de conservation de la masse, qui se traduit par une divergence nulle de la vitesse, s'écrit dans le cas d'une flamme stationnaire [66] :

$$\rho_p \bar{u}_p = \rho_r \bar{u}_r \quad (3.45)$$

et l'équation d'état des gaz parfaits, donne :

$$\rho_p = \frac{\rho_r}{1 + \tau} < \rho_r \quad (3.46)$$

où $\tau = \frac{T_p}{T_r} - 1$ est le taux d'expansion thermique.

On voit bien que $\rho_p < \rho_r$; ce qui nécessite $\bar{u}_p > \bar{u}_r$ pour pouvoir satisfaire la continuité (3.45). La vitesse moyenne conditionnée dans les gaz brûlés est susceptible d'être plus importante que dans les gaz frais. L'équation (3.43) conduit donc, à un signe positif pour le flux $\widetilde{u_k'' c''}$.

Le transport turbulent dans ce cas est dit “ à contre gradient “, puisque $\widetilde{u_k''c''}$ et $\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x}$ sont de même signe, et ne peuvent être liés par la relation (3.41).

Lorsque le facteur d’expansion τ augmente, l’écart entre \bar{u}_p et \bar{u}_r augmente aussi : le phénomène de transport turbulent contre gradient sera donc d’autant plus important que τ est élevé.

Dans le cas où les hypothèses de Shvab-Zeldovitch sont applicables, la température dans les gaz brûlés est identique à la température adiabatique ; qui est fonction de la richesse $T_p = TFA(\phi)$. Sachant qu’en configuration de prémélange partiel, la richesse est variable d’un point à l’autre dans les gaz frais (stratification), le taux d’expansion thermique $\tau(x)$ désignera une quantité spatiale dont dépendra la compétitivité entre le transport gradient et le transport contre-gradient. Le champ dynamique (\bar{u}_p, \bar{u}_r) en présence de flamme ($0 < \tilde{c} < 1$) sera perturbé en accord avec l’avancement $\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x}$ des réactions chimiques ; c’est l’un des effets de la flamme sur l’écoulement (ou sur la turbulence). En revanche, à mesure que le rapport u'/S_L augmente, la diffusion du scalaire devient contrôlée par le mélange turbulent gradient. Cela a été bien confirmé par les simulations numériques directes (DNS) [93].

Chapitre 4

Modélisation numérique / Etudes
de cas

Au cours de ce chapitre, on va tenter d'analyser quelques applicatifs en combustion turbulente. Ces tentatives serviront d'abord, à prédire la structure des flammes turbulentes en utilisant les modèles appropriés, parmi ceux présentés au niveau des deux précédents chapitres ; puis à mesurer la capacité des sous modèles de turbulence, de chimie ; mais aussi des méthodes numériques à reproduire, aussi bien des situations génériques et académiques, que des configurations industrielles.

La différence entre les cas qui vont être présentés réside non seulement dans les régimes de combustion, la configuration réelle ou les points de fonctionnement en modes dynamiques (vitesses d'injection, niveau de turbulence, existence ou non de swirl,...) et thermochimiques (fraction de mélange/fraction massique du combustible, température des réactifs, existence ou non de flamme pilote,...) ; mais aussi dans le type de flammes, le traitement statistique des variables d'état (forme de la Pdf), les modèles numériques ainsi que les outils de calcul.

4.1. Cas applicatif N°1 : Flamme issue d'un brûleur industriel

Ce premier cas concerne une flamme de diffusion, à échelle industrielle issue du brûleur coaxial du four de la cimenterie de Chlef.

On a commencé à s'intéresser à cette flamme en raison des problèmes techniques signalés par les ingénieurs de process concernant la sensibilité de la flamme à des variations de débit et de température de l'air secondaire [25]. En plus, la direction technique stipule à travers ces bulletins internes qu'une liaison étroite existe entre le taux de pollution (spécifiquement les NOx) en sortie du four et la qualité du clinker produit.

L'analyse menée a été orientée donc, vers la prédiction de la structure de la flamme et du taux d'oxydes d'azotes (NOx) au niveau du plan de sortie du four.

4.1.1. Points de fonctionnement

Il est important de signaler que le four fonctionne sur plusieurs points de fonctionnement, relatifs aux conditions d'injection des réactifs [89]. Plusieurs conditions correspondent soit à un régime de démarrage ou de pré-extinction du four,

et sont donc physiquement instationnaires. Aussi, quelques plages de débit de méthane (combustible) ne permettent pas d'entretenir une combustion stable, et provoquent des soufflages de la flamme [90].

Afin de se placer dans un cas purement stationnaire, on s'est pris un point correspondant à un fonctionnement stable de trente jours.

Le four de la cimenterie de Chlef est de forme cylindre, ayant un diamètre interne de cinq(5) mètres et s'étale sur une distance de cents (100) mètre (figure 4.1).



Figure 4.1 : Vue d'ensemble d'une ligne du four de l'ECDE, Chlef

Le jet turbulent du combustible (CH_4) est entouré d'un courant d'air primaire. Ce dernier, est englobé d'une importante proportion de gaz brûlés (appelée air secondaire ou Co-courant), qui sont réinjecté parallèlement en entrée du four. La sortie du four débouche sur une zone à pression ambiante. La symétrie de la géométrie et de l'écoulement fait qu'il est possible d'adopter un modèle axisymétrique pour cette configuration (figure 4.2).

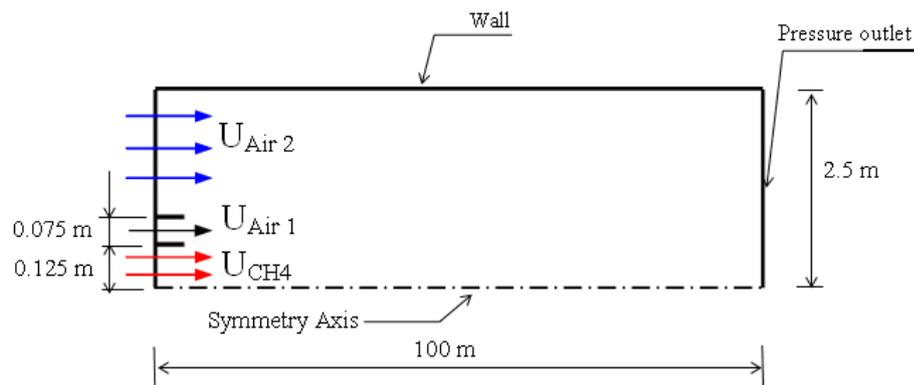


Figure 4.2 : Modèle géométrique et conditions aux limites

Les conditions de fonctionnement sont résumées dans le tableau 4.1.

TAB. 4.1 : Conditions utilisées dans la simulation

Conditions	Air primaire	Air secondaire	Combustible (CH ₄)
Température (K)	298,15	1000-1300	273,15
Vitesse d'injection (m/s)	330,00	0,265	72,44
Intensité de turbulence (%)	10	2	10
Fraction de mélange	0,0	0,0	1,0

Les conditions de vitesse ont été évaluées à partir des débits volumiques moyennés sur une période de un (01) mois. En absence de mesures locales de niveau de turbulence, on a du procéder par tâtonnement en se donnant des intensités de turbulence (RMS en %), et en calculant k et ε (pour le modèle $k-\varepsilon$) selon les formules d'écoulements internes développés [48].

Les réactifs sont issues d'une paire de jets coaxiaux, pris à 10% de turbulence, alors que l'air secondaire à très faible vitesse, aura parcouru une centaine de mètres, entraîné par un ventilateur de tirage de faible puissance, est considéré comme quasi-laminaire ($I_{turb} \approx 2\%$)

4.1.2. Modélisation de l'aérothermochimie

La production des espèces polluantes de type NO_x est très dépendante de l'ambiance thermique à l'intérieur du four. Cette dernière étant la conséquence d'une

compétition entre la chimie et la turbulence. Il a été montré via une analyse paramétrique [25], que la structure de la flamme et l'étendue de la zone de recirculation étaient bien prédites si l'on utilisait un modèle de turbulence de type $k-\epsilon$ avec une correction de Pope ou bien un modèle $k-\omega$. Le modèle de rayonnement à ordonnées discrètes (DO) a été utilisé en raison de la faible valeur de l'épaisseur optique moyenne [24] des gaz brûlés. Ce modèle utilise une discrétisation en angles solides pour résoudre l'équation de transferts radiatifs (RTE) en termes d'intensité de rayonnement [91]. Une chimie complète (réaction à une étape) est adoptée pour décrire l'évolution spatiale des fractions massiques des espèces chimiques majoritaires ($\text{CH}_4, \text{O}_2, \text{N}_2, \text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}$) en plus du monoxyde d'azote (NO). L'interaction chimie-turbulence est modélisée par une expression algébrique de type Eddy-Break up [67] du taux moyen de réaction, dont l'intensité est supposée inversement proportionnelle au temps caractéristique du mélange turbulent (relation 2.5.1.c). Les mécanismes de formation des NOx peuvent être classés en trois grandes parties, le NO thermique, le NO précoce et le NO combustible. Le NO thermique se forme lorsque l'azote et l'oxygène atmosphériques coexistent en un endroit à forte température, son taux de production dépend exponentiellement de la température [43] ce qui le rend énormément sensible au mélange turbulent et aux fluctuations acoustiques; le NO précoce est produit au voisinage du front de la flamme par le biais des radicaux libres et dépend exponentiellement de la température et de la richesse locales, le NO combustible résultant de l'oxydation de l'azote atomique inclus dans le combustible, ne sera pas considéré dans le présent travail. Le NO thermique est considéré comme une espèce polluante dominante (par rapport au NO précoce) lorsque la température dépasse 1700 K sous un dosage quasi-stœchiométrique. Il résulte à partir du mécanisme étendu de Zeldovitch [92] gouverné par les deux réactions :



Le calcul du taux de réaction net du NO thermique s'exprime comme une fonction densité de probabilité (Pdf) de la température et suppose un équilibre partiel du

radical O issu de la réaction du troisième corps (où M est un partenaire collisionnel) [93] :



Il été aussi montré que dans l'industrie du ciment, l'uniformité radiale de la température en sortie du four est un critère de combustion stable [43].

En effet une stratification radiale de la température serait synonyme de gradient dans la fraction de mélange au voisinage du brûleur (non uniforme couche de mélange), mais aussi révélateur de perte thermiques aux parois, ou bien extinction ou allumages locales. Plus le profil radial est plat, plus la combustion est stable et l'air secondaire efficace lors de son réinjection. En l'occurrence, on définit un facteur OTDF (comme Overall Temperature Distribution Factor), mesurant l'uniformité de la température radiale, lié étroitement à l'efficacité de la combustion et définit par :

$$OTDF = \frac{T_{sortie}^{max} - \langle T \rangle_{entrée}}{\langle T \rangle_{sortie} - \langle T \rangle_{entrée}} \quad (4.3)$$

Dans une situation idéale où le profil de température serait plat sur toutes les stations radiales, le facteur OTDF serait égale à l'unité (OTDF=1)

La première démarche dans un calcul de mécanique de fluide numérique (CFD) consiste à construire un maillage et à s'assurer que la solution est indépendante du nombre de cellules. Le domaine axisymétrique est couvert initialement par un ensemble structuré de cellules (38750) sur lequel un raffinement local est opéré sur la base du gradient de la température radiale, permettant d'atteindre un nombre important (environ 70000) de cellules (figure 4.3) ce raffinement est effectué après un premier calcul sous Ansys-Fluent [68]. Des tests sur des maillages plus fins n'a relevé qu'un écart relatif non supérieur à 7% quant à la valeur de la température [25].

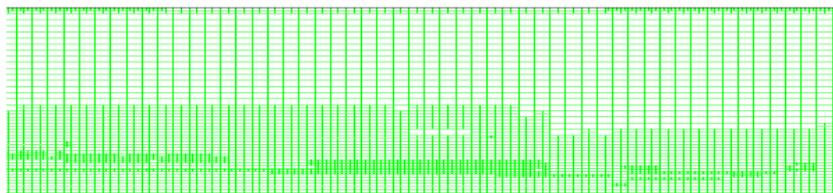


Figure 4.3: Raffinement local du maillage 2D axisymétrique.

L'analyse thermochimique de la combustion du méthane dans l'air (21% O₂, 79% N₂) révèle que le point stœchiométrique (correspondant à une température maximale) se trouve déplacée vers les rapports de mélange élevés (figure 4.4) lorsque l'oxydant (air) a une teneur faible en oxygène (cas des gaz brûlés injectés).

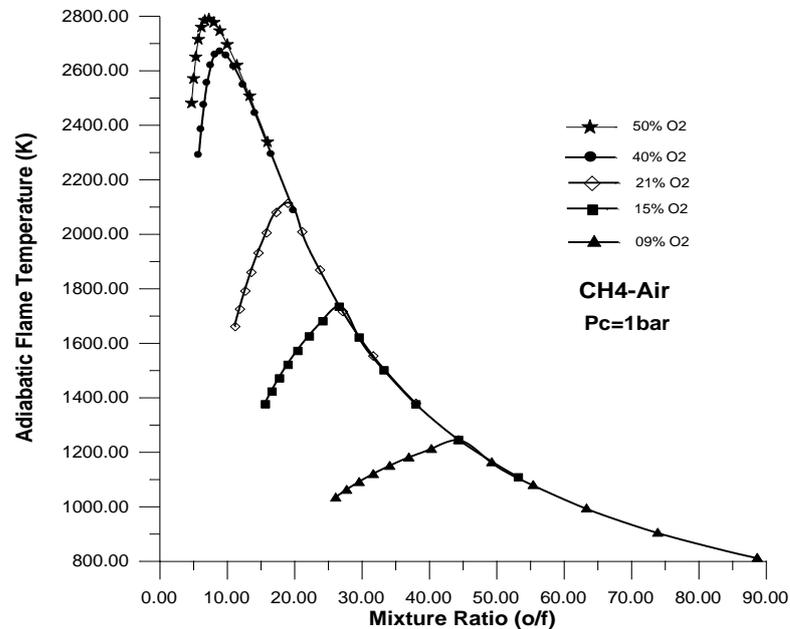


Figure 4.4 : Influence de la composition de l'air sur la stœchiométrie de combustion

Ce comportement justifie l'utilisation d'un Co-courant chaud (réinjection des gaz brûlés) dans le but de réduire la température de flamme adiabatique.

Dynamiquement, on note l'existence d'une zone de recirculation pariétale, qui est en fait une conséquence du cisaillement entre le jet central froid tendant à s'épanouir et le Co-courant chaud injecté parallèlement à l'axe du four (figure 4.5).

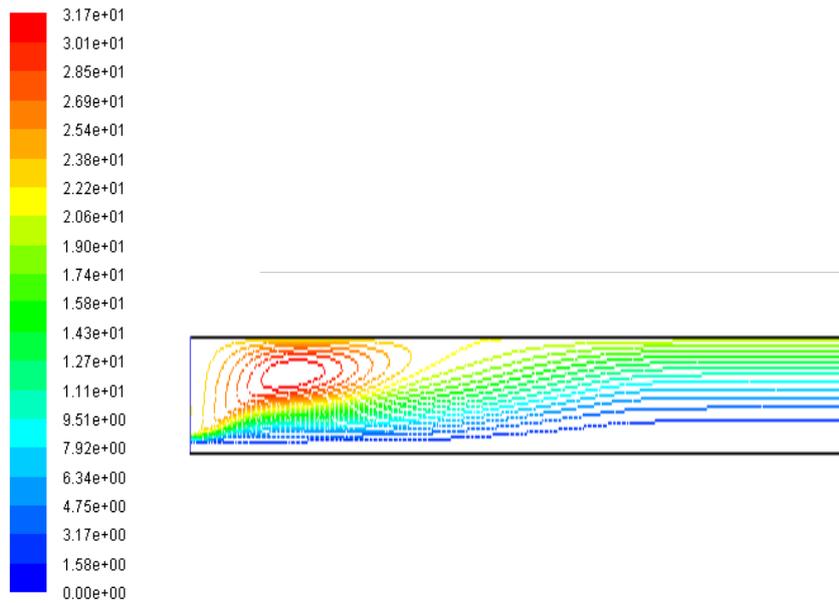


Figure 4.5 : Contour spatial des lignes de courant

Cette zone a pour effet d'entraîner le combustible vers le courant comburant ce qui donnera naissance à une flamme proche de la paroi, du moment que la combustion est sensée être contrôlée par la turbulence (Eddy Break-up).

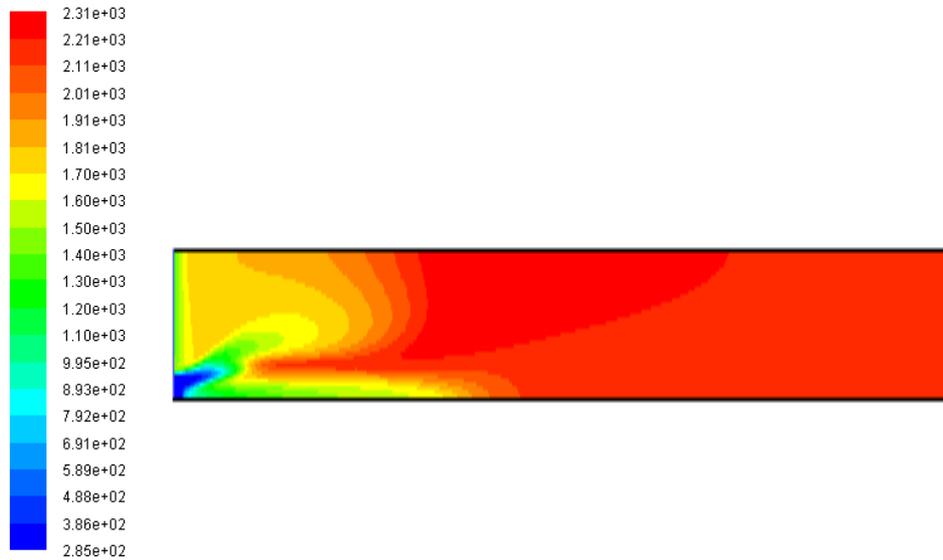


Figure 4.6 : Champ de température statique

La température statique atteint un maximum en cette zone (figure 4.6) située à une distance axiale de l'injecteur avoisinant 30 mètres, celle-ci étant proche de l'estimation (25 mètres) de l'étendue de la zone d'instabilités aérodynamiques où la chute du revêtement a été notée [70].

La production la plus significative du NO est notée en une zone « liftée » et localisée à 25 mètres de l'entrée du four. C'est la zone où la température est élevée (figure 4.7) et les fractions massiques de l'azote moléculaire (N_2) et de l'oxygène sont importantes. La distribution radiale du taux de NO à la sortie (quantifiée en ppm) observe une tendance quasi-uniforme avoisinant les 1750 ppm, celle-ci étant légèrement supérieure (de 5%) à la valeur mesurée (1670 ppm) par le capteur installé en sortie du four [89].

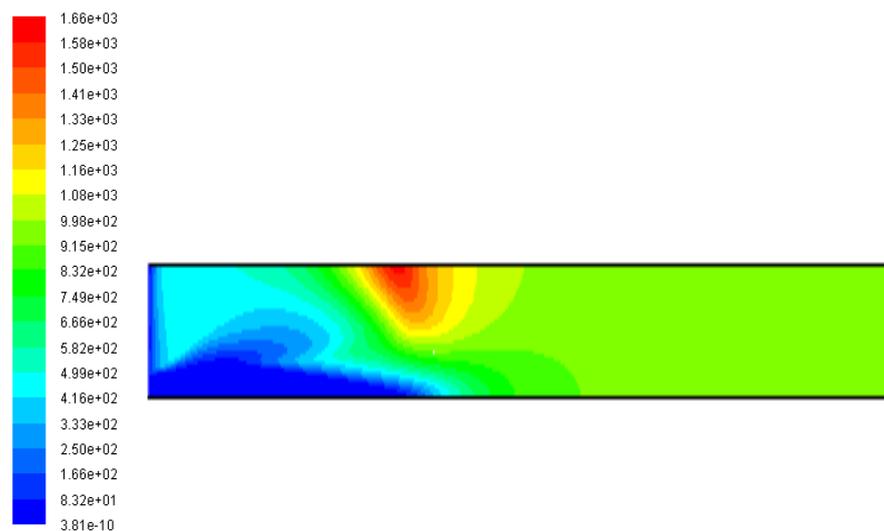


Figure 4.7 : Contour spatial de la fraction massique (ppm) du NO

Il est évident que la température de l'air récupéré du refroidisseur (air secondaire) varie en fonction du débit et la qualité de la matière cuite (clinker), cette dernière causant des transferts de chaleur (endothermiques puis exothermiques) avec le fluide environnant. En l'occurrence, il est intéressant d'analyser l'effet du niveau thermique des gaz brûlés sur le niveau des émissions polluantes en sortie du four.

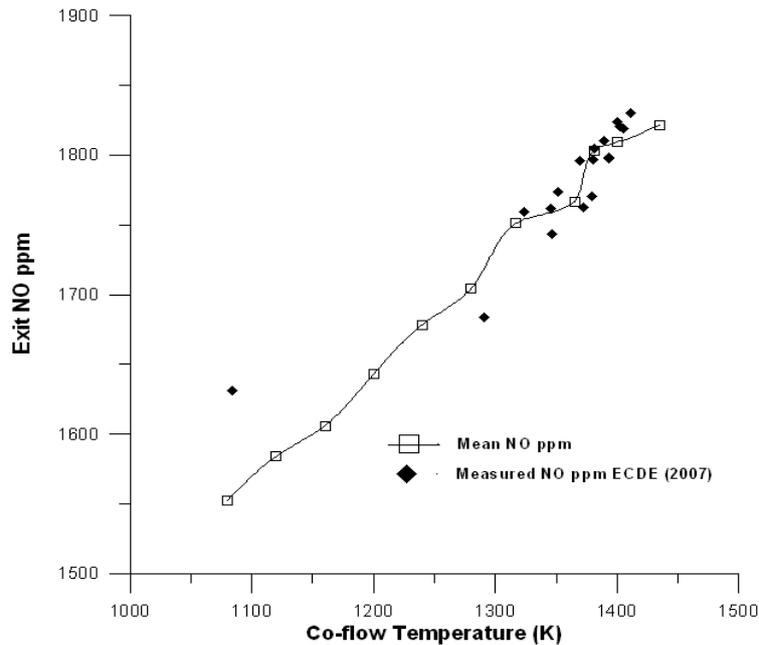


Figure 4.8 : Effet de la température de l'air secondaire sur le taux d'émissions

La confrontation entre les résultats de la simulation numérique et les mesures relevées sur le site de la cimenterie (figure 4.8) est assez satisfaisante vers les températures de l'air secondaires supérieures à 1300K. Une dispersion est visible en dessous de la valeur 1300K, chose qu'on peut justifier par une surestimation (dans le modèle numérique) de la température à cause du caractère complet de la combustion et de l'adiabacité imposée aux parois du four. La quantité de chaleur négligée dans cette considération est compensée par l'élévation de la température du Co-courant (air secondaire). Un comportement antagoniste est observé quant au taux de pollution au niveau de la sortie et l'efficacité de la combustion, représentée par le facteur OTDF (figure 4.9).

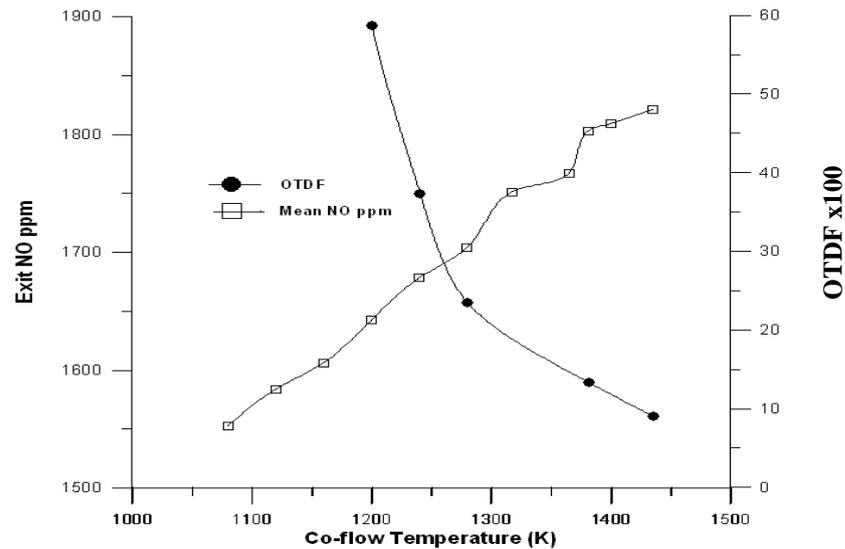


Figure 4.9 : Taux d'émissions et facteur OTDF

En effet, il est important de remarquer que toute diminution de la température du Co-courant, entrainera un affaiblissement du niveau de pollution en sortie du four (figure 4.9). Cependant, le facteur de distribution de température se trouvera nettement augmenté, ce qui affecte considérablement l'efficacité de la combustion. En plus, la température des gaz brûlés lors de leur réintroduction dans le four n'est pas prévisible à-priori. De ce fait, il est judicieux de maintenir (pour l'air secondaire) un seuil thermique capable d'assurer une bonne efficacité de combustion tout en agissant sur d'autres paramètres (aérodynamiques, par exemple) afin de faire abaisser le niveau du NO en sortie du four.

Etant donné que la technique de dilution de la flamme (section 1.5.3.1), ne parait pas très adaptée à la configuration actuelle du brûleur, il est important de penser à une méthode primaire, qui pourrait contribuer à la réduction du niveau du NO, sans altérer l'efficacité de combustion, ni la qualité du produit. Dans ce contexte, les techniques à viciage d'air semblent bien répondre à ces critères.

Les jets « viciés » résultent de l'application d'un mouvement se développant en spirales, une composante de vitesse swirlée étant imposée par l'utilisation d'une entrée axiale et d'une entrée tangentielle (voir chapitre 1, paragraphe 1.5.3.5).

Par ailleurs, des études expérimentales [43] ont montré que l'utilisation du swirl dans un brûleur à flamme de diffusion peut conduire à une réduction des émissions de polluants et notamment celle des oxydes d'azote par le biais de l'amélioration de la qualité du mélange. De plus, le fait d'augmenter le nombre de swirl revient à diminuer le temps de séjour dans les zones chaudes du fait des fortes vitesses dans la zone de recirculation, ceci a également pour effet de limiter la production de NOx. Ces résultats conduisent naturellement à penser que l'on a intérêt à faire tourbillonner le plus possible l'écoulement.

Technologiquement parlant, il s'agit de proposer une technique de tourbillonnement à l'injection des réactifs, compatible avec les diffusions qui pourrait être montrée sur le brûleur. Le méthane étant soufflé à partir du canal central, il ne serait pas judicieux de lui imposer un swirl car ceci ne lui permettra pas de se mélanger correctement avec l'air primaire, ayant une vitesse quadruple que celle du combustible. En plus, l'air secondaire avec sa faible vitesse et son grand débit, ne pourrait pas trop s'épanouir radialement, car initialement injecté en proche paroi. En l'occurrence, on choisit d'introduire un viciage (swirl) de l'air primaire au niveau de l'injecteur seulement. On analyse ensuite la répercussion résultante de l'augmentation du swirl à un niveau élevé (utilisé dans les brûleurs industriels) $S_0=0,8$, sur la dynamique de l'écoulement et par conséquent, sur le taux du NO en sortie du four.

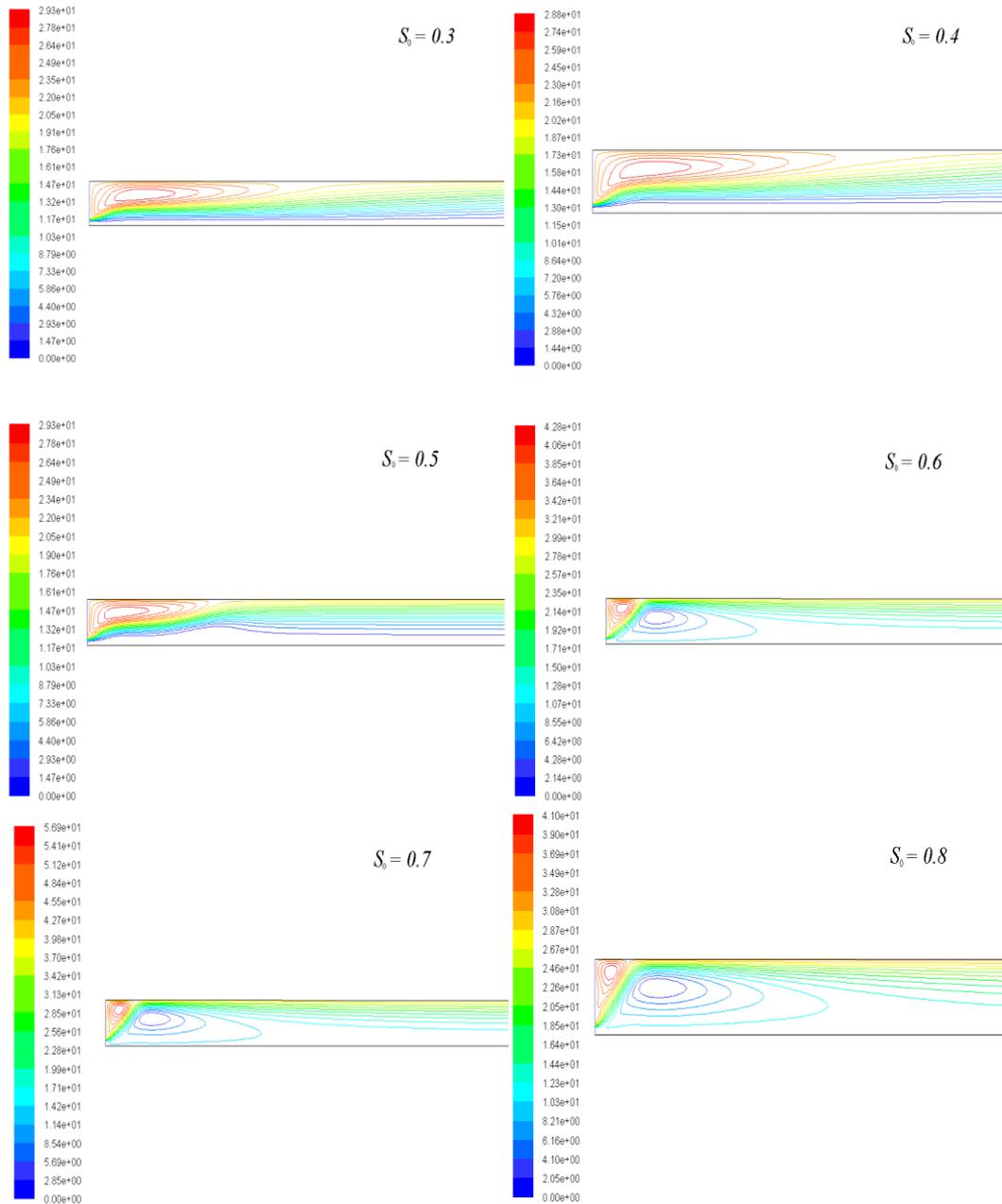


Figure 4.10 : Effet du swirl sur le développement des zones de recirculation

En ce qui concerne la dynamique du jet, il est remarqué qu'aux faibles ou modérées intensités du swirl ($S_0 \leq 0,4$), la zone de recirculation centrale s'élargie dans le sens axial. L'accroissement du nombre de swirl au delà de valeur $S_0 = 0,7$ induit une seconde zone de recirculation toroïdale centrale (CTRZ) qui commence à se développer avec apparition de son premier noyau aux valeurs $S_0 = 0,6$ (figure 4.10). Cette recirculation a pour effet de réduire la longueur de la flamme caractérisée comme la position axiale du maximum de la température statique (figure 4.11).

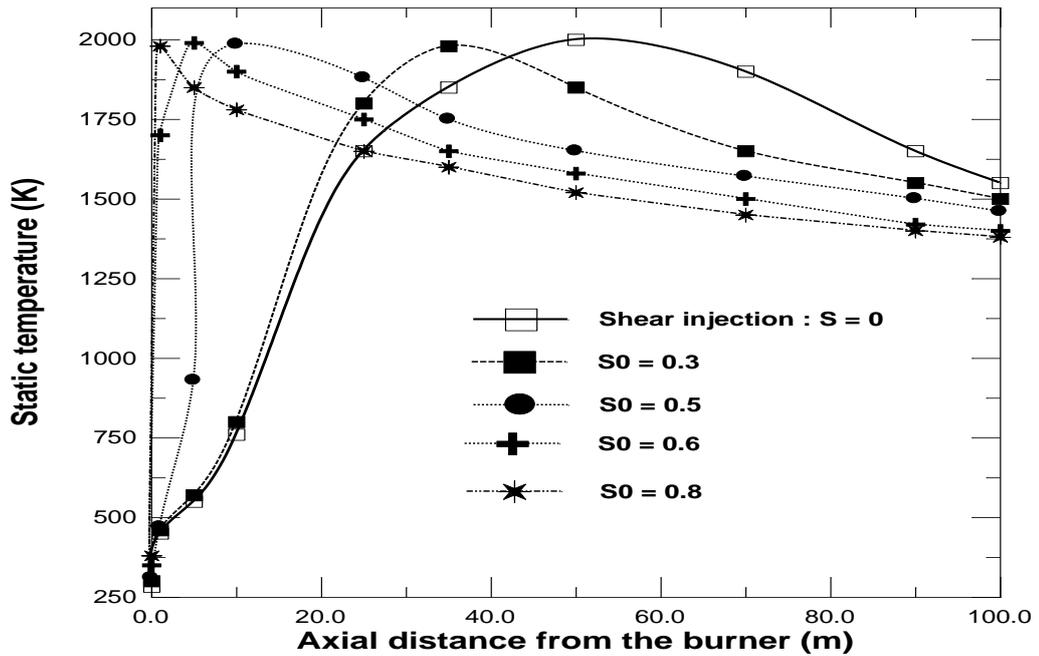


Figure 4.11: Profil de la température axiale pour différents taux de swirl

En sortie du four, le taux (en ppm) du NO se trouvera aussi diminué lorsque le degré du swirl est élevé. En effet, on note une diminution proche de 60% (figure 4.12), lorsqu'on passe de l'écoulement cisailé ($S_0 = 0$) à un écoulement à fort taux de swirl ($S_0 = 0,7$).

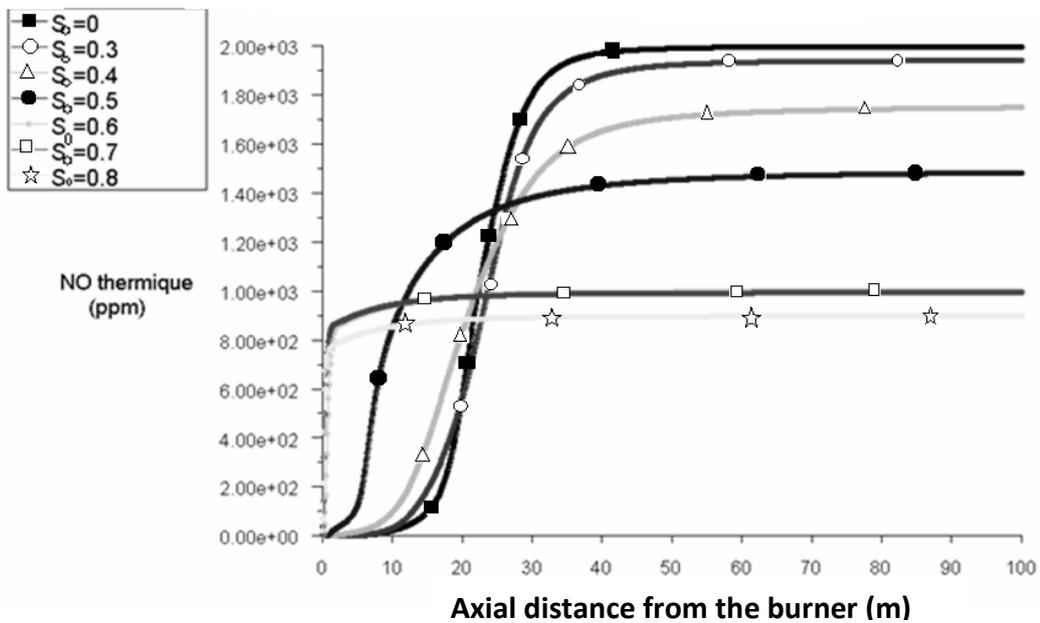


Figure 4.12 : Taux du NO pour diverses valeurs du nombre de swirl

Du point de vue implémentation industrielle, il est important de noter que l'utilisation du swirl requiert de nouveaux dispositifs d'injection (swirler, ailettes à calage variable,...) et par conséquent un investissement supplémentaire. En plus, augmenter le swirl conduit à rapprocher la flamme de la zone de l'injecteur (figure 4.11) et favorise donc une remontée de la flamme (cas d'un prémélange local), voire son accrochage sur les lèvres de l'injecteur. Les risques d'endommagement des installations sont donc très présents dans ce cas de figure [92].

En l'occurrence, il est nécessaire de trouver une intensité du swirl qui réalise un compromis entre le niveau de pollution en sortie du four et la distance de la flamme à l'injecteur. La figure 4.13 montre qu'il est possible d'arriver à une flamme relativement distante (de dix mètres) de l'injecteur sans que le niveau du NO en sortie ne dépasse les 1200 ppm.

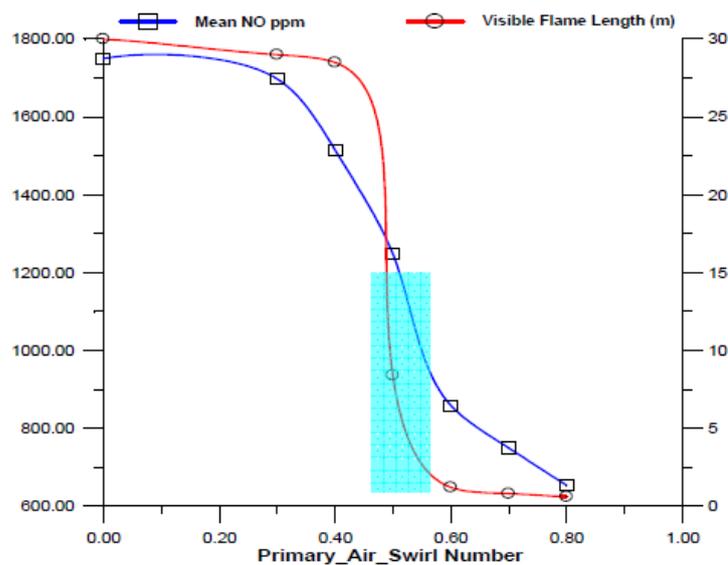


Figure 4.13 : Taux d'émissions et longueur de flamme en fonction du nombre de swirl

C'est ainsi que la configuration avec un nombre de swirl proche de la valeur $S_0=0,5$ représente une solution qui réduit de 28% le taux d'émissions par rapport à la configuration sans swirl (actuellement utilisée).

Dans cette partie de travail, on s'intéresse à la combustion turbulente dans une flamme non-prémélangée (de diffusion) simulée avec une chimie à une étape, une turbulence standard ($k-\omega$) et un modèle algébrique pour l'interaction chimie-turbulence. Un modèle de type ordonnées discrètes (*DO*) a été adopté pour prendre en compte les pertes par radiation dans le bilan thermique global.

On s'intéresse aussi à la longueur de flamme visible pour un rapport de mélange donné, au contrôle de la distribution de la température à la sortie du four et au taux de production du NO et sa relation avec l'efficacité de la combustion.

La simulation montre que la longueur de flamme visible et la distribution de la température dépendent fortement des caractéristiques de la turbulence et sont assez bien captées. Cependant, la combustion sous les conditions de fonctionnement actuelles du four, présente un niveau élevé d'émissions qui peut être réduit par un tourbillonnement de l'air primaire, sans que l'efficacité de la combustion soit altérée.

Le taux prédit de pollution (~1200 ppm) en présence de swirl, pourrait éventuellement encore diminuer en utilisant une technique secondaire, qui pourrait s'implémenter au niveau process (SNCR, SCR), ou au niveau terminal (tour/cheminée d'éjection), où l'on a à placer des filtres (électrostatique, à manches) pour fixer les émissions d'espèces NO.

4.2. Cas applicatif N°2 : flamme de prémélange stabilisée par une flamme pilote

Le second cas applicatif, consiste en une flamme de prémélange turbulente à échelle de laboratoire. Il s'agit de la flamme CH₄-air du brûleur de l'institut ICARE, Orléans, France. Le brûleur est susceptible de fonctionner dans une plage de pression allant jusqu'à 1MPa [23], avec des flammes de prémélange pauvres (richesse~0,6).

En raison de la vulnérabilité des flammes de prémélange aux instabilités de combustion, plus spécifiquement aux phénomènes de retour (flash back), des mécanismes de stabilité doivent accompagner les installations utilisant ce type de flammes. Dans le cas du brûleur ICARE, c'est une flamme pilote CH₄-air, stœchiométrique qui est utilisée non seulement pour éviter le flash back, mais aussi pour assurer un accrochage permanent du front de flamme, sur les lèvres du brûleur.

Sur le volet de la modélisation, on va inclure la flamme pilote dans les calculs du mélange et de l'avancement chimique, et ne pas se contenter de considérer uniquement son effet thermique (gaz brûlés) [94]. A cette fin, on propose d'utiliser le modèle de Libby-Williams-Poitiers (LW-P) pour comptabiliser la forte variation de richesse qui existe entre la flamme principale ($\phi < 1$) et la flamme pilote ($\phi = 1$).

Pour rappeler que le modèle LW-P est un modèle conçu pour prendre en compte les hétérogénéités de richesse dues de possibles stratifications de mélange, ou à des mélanges locaux entre gaz frais /combustible et gaz brûlés/air de dilution. Le modèle LW-P, introduit la première fois par Robin et al. [79] a été utilisé pour reproduire une couche de mélange réactive, stabilisée par des courants parallèles de produits de combustion [95]. Robin et Champion [79] ont réussi à capter et à ajuster les richesses des deux canaux de prémélange, pour stabiliser un seul front, puis reproduire deux flammes de prémélange, stabilisées par un élargissement brusque (banc d'essai ORACLES, ENSMA, Poitiers). Les mêmes auteurs se sont investis pour tenter de simuler le comportement d'une flamme en V (CORIA, Rouen), stratifiée en richesse et stabilisée par un Bluff-body rond [80]. Les auteurs ont pu reproduire l'extinction locale et la vitesse de stabilisation pour éviter le flash-back.

Dans cette partie du chapitre, le modèle LW-P est utilisé pour la première fois en vue de reproduire l'aérothermochimie de la flamme ICARE ; une flamme de prémélange pauvre (CH_4 -air), stabilisée par une flamme pilote à richesse unité ($\phi=1$).

4.2.1. Description du montage et modélisation géométrique

La figure 4.14 donne une vue générale sur la chambre de combustion du montage d'Orléans utilisé pour l'étude des flammes. Celle-ci est constituée de blocs en acier d'environ 600 mm de haut chacun et d'un diamètre intérieur de 300 mm. Les accès optiques servent en premier lieu pour le passage du faisceau laser nécessaire aux mesures ADL. Le brûleur dispose d'un diamètre interne de $D=25\text{mm}$, de longueur 230mm, équipé d'une grille de turbulence placée à 50mm en amont de la sa sortie. La grille est de type plaque perforée avec une maille de $M=3,5\text{mm}$ et un diamètre de trous de 2,5mm. Une flamme pilote annulaire de largeur 2mm entoure la flamme principale (Figure 4.15).



Figure 4.14 : Vue d'ensemble de la chambre de combustion [23]

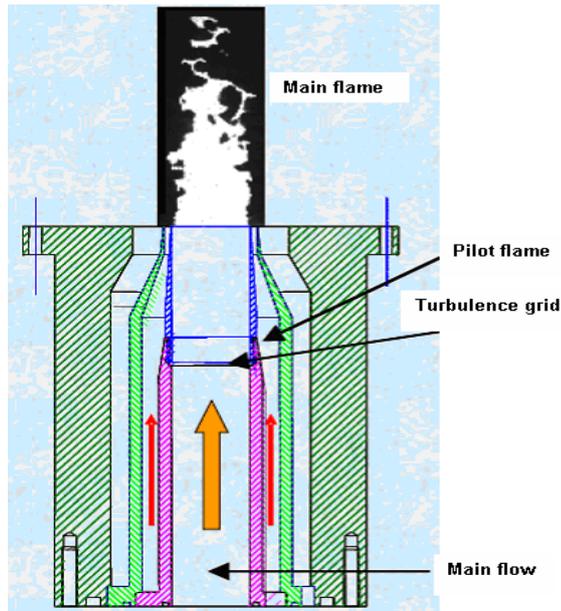


Figure 4.15. Schémas descriptif du brûleur [23]

L'écoulement en sortie du brûleur ne débouche pas sur une atmosphère totalement calme et infinie, la chambre de combustion est le siège de zones de recirculation. Si nous considérons que la totalité du débit à l'intérieur de la chambre recircule, la conservation de la masse permet d'avoir une estimation de la vitesse de recirculation qui est de l'ordre de 0,7% de la vitesse débitante, étant donné que le diamètre de la chambre de combustion étant environ 12 fois supérieur à celui du brûleur [96]. Ceci permet de modéliser le jet comme étant turbulent, libre et axisymétrique.

Le domaine de calcul (Figure 4.16) est composé de deux entrées fluide (écoulement principale et flamme pilote), d'un axe de symétrie, d'une sortie libre supérieure et d'une sortie libre radiale.

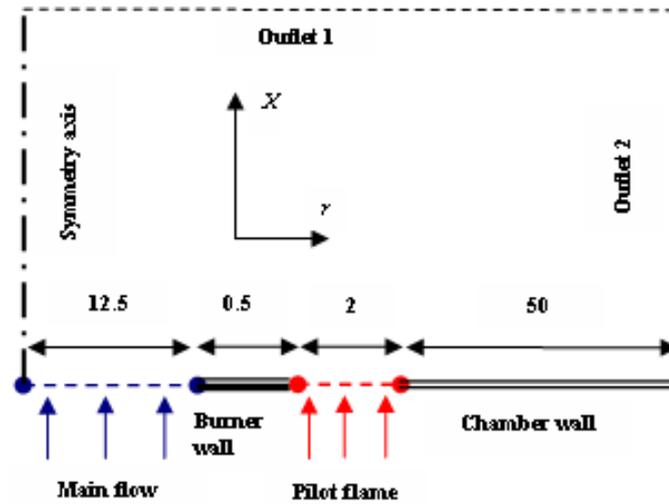


Figure 4.16 : Modèle géométrique et domaine de calcul

Les dimensions du domaine de calcul (5 mm dans le sens radial, 150 mm dans le sens axial) ont été choisies après plusieurs tentatives, permettant de s'assurer de la vérification de gradient nul à ces limites.

4.2.2. Maillage et conditions aux limites

Sur la base d'un critère de taille (fixé à 0,1 mm) appliqué dans la zone de mélange (étendu à la paroi brûleur), une grille structurée a été générée par utilisation du mailleur GMSH [97]. La grille est ensuite relâchée radialement et axialement, pour aboutir à un maillage contenant approximativement 76000 cellules quadrilatérales. C'est la grille utilisée après plusieurs tests de sensibilité par rapport à la température sur l'axe du domaine, qui affiche un écart relatif inférieur à 2% (figure 4.17)

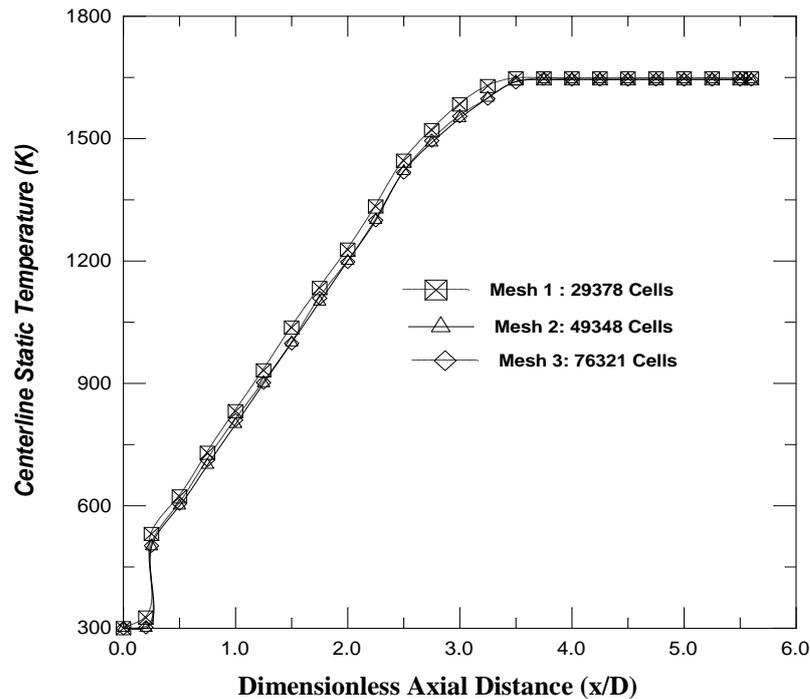


Figure 4.17 : Etude de la sensibilité de maillage

Pour conserver une vitesse débitante constante, le profil de vitesse pour l'écoulement à l'entrée principal est de type [95]:

$$u(r) = u_0(1 - r/r_b)^n \quad (4.4)$$

u_0 et r_b désignent respectivement, la vitesse sur l'axe et le rayon interne du brûleur.

L'énergie cinétique turbulente k ainsi que son taux de dissipation ε pour l'entrée principale, sont exprimés en profils polynomiales (de degré deux et trois) en fonction de la distance radiale, la longueur intégrale est supposée constante et de l'ordre la taille de la maille (3 mm) utilisée dans la grille de turbulence [94]. Pour la flamme pilote, la vitesse axiale est prise constante et la turbulence est exprimée en termes d'intensité et de diamètre hydraulique. Cette dernière étant laminaire, une faible constante intensité de turbulence ($\sim 5\%$) s'est avérée suffisante pour reproduire numériquement son effet thermique sur la flamme principale [96]. Le tableau 4.2 résume les paramètres utilisés dans la simulation.

TAB. 4.2. Paramètres utilisés dans la simulation

	$u(r)$ [m/s]	k [m ² /s ²]	ε [m ² /s ³]	T [K]	Richesse
Ecoulement principal	$u_0 = 2,56$ $n = 0,2818$	Polynôme en r^2	Polynôme en r^3	300	0,6
Flamme pilote	$5\%(u_d)$	$k = k(I = 5\%)$	$\varepsilon = \varepsilon(I = 5\%)$	$T_{eq}(\xi_{st})$	1,0

Les calculs volumes finis sont entrepris par le biais du code de calcul Code saturne [98] développé par EDF, France. Le code résout les équations de Navier-Stokes moyennées au sens de Favre, avec l'équation de l'énergie, des équations pour les quantités turbulentes et de possible scalaires transportés.

Le calcul en chimie froide (sans allumage), permet non seulement de valider le bon modèle de turbulence et de capter les caractéristiques du mélange turbulent des réactifs où va se s'initier la flamme, mais constitue aussi un champ de solutions « initiales » pour les calculs réactifs. L'initialisation de la solution avec une fraction massique du combustible égale à la fraction de mélange ($Y = \xi$) de l'écoulement principal permet dans le modèle LW-P, de se placer sur la droite de mélange (chapitre 3, Figure 3.1), sans combustion. Bien que l'écoulement en sortie du brûleur soit à tendance axiale, on remarque une valeur faible mais non nulle de la vitesse radiale ($u_x = -0.085$ m/s) à une distance axiale de 5mm traduisant le début de l'épanouissement du jet (Figure 4.18).

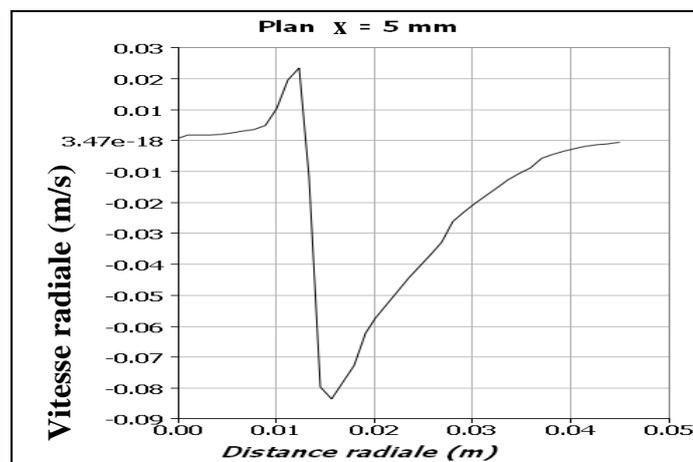


Figure 4.18 : Allure de la vitesse radiale

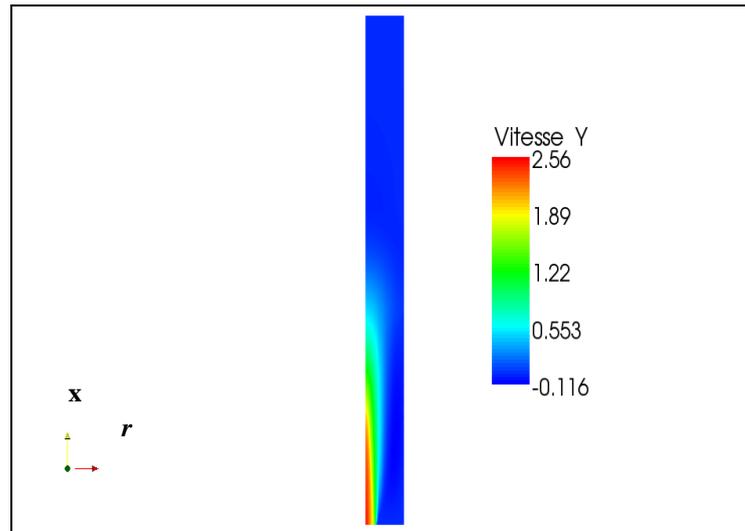


Figure 4.19 : Contour de la vitesse axiale

L'écoulement des gaz brûlés en sortie de la flamme pilote est à très faible vitesse ($\approx 5\%$ de la vitesse débitante) n'affectant pas trop la vitesse axiale au centre de la chambre de combustion. Cette dernière atteint son maximum au centre mais diminue et devient même négative (Figure 4.19) au fur et à mesure qu'on s'éloigne dans la direction radiale. Ce comportement traduit l'existence effective (comme nous l'avons supposé dans le calcul du débit dans la chambre de combustion) de zones de recirculation dans la direction radiale à l'axe de la chambre. Par ailleurs, le cisaillement au niveau de la couche de mélange entre les deux écoulements à une part importante dans la dissipation de l'énergie cinétique de turbulence (Figure 4.20) avec un effet qui s'étale sur une grande distance en aval de la sortie du brûleur. L'allure de la vitesse axiale (Figure 4.21) observe un changement de pente visible à une distance proche de 80 mm ($x/D = 3,2$) alors que les mesures [23] donnent un rapport de 3. Cette surestimation ($\sim 6,5\%$) est certainement due à l'isotropie dynamique considérée dans le modèle $k - \varepsilon$ standard. L'énergie cinétique de turbulence (Figure 4.22) diminuent axialement jusqu'à une valeur minimale située aux alentours de 70 mm, passés cette zone, ils augmentent continuellement jusqu'à une zone lointaine (300 mm) non affectée par l'écoulement en sortie du brûleur. C'est donc la zone du cœur potentiel du jet et l'apparition du phénomène d'entraînement, où le jet perd sa quantité de mouvement au profit du fluide ambiant.

Cet échange de quantité de mouvement se traduit par la diminution de la vitesse du jet à sa périphérie jusqu'à l'endroit où la vitesse axiale commence à décroître. La simulation en froid montre que les profils selon l'axe de l'énergie cinétique de turbulence et de son taux de dissipation (Figure 4.23) convergent vers une taille relativement constante pour le cœur potentiel du jet (entre 60 et 80 mm). Cependant, une sous-estimation du niveau du taux de dissipation $\tilde{\epsilon}$ par rapport aux mesures expérimentales est remarquée dans nos calculs, chose que nous relierions à l'utilisation d'une longueur intégrale l_t constante (moyenne) en sortie du brûleur.

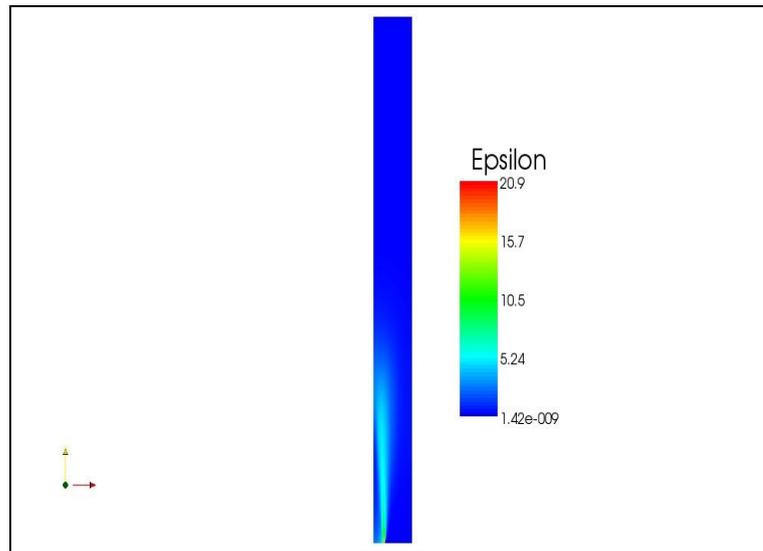


Figure 4.20 : Contour du taux de dissipation $\tilde{\epsilon}$

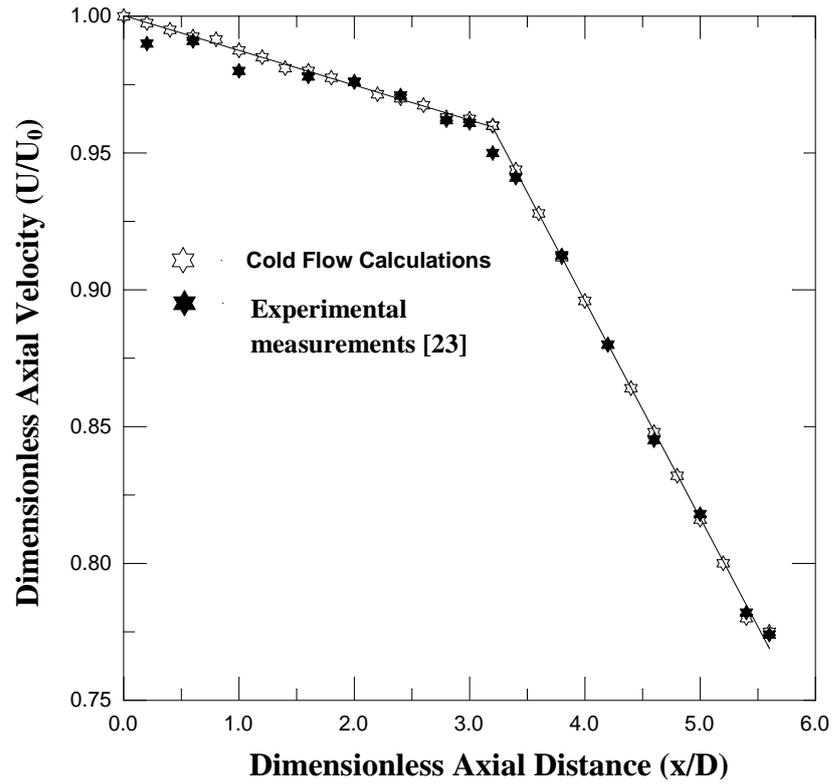


Figure 4.21 : Allure de la vitesse sur l'axe de la chambre de combustion [99]

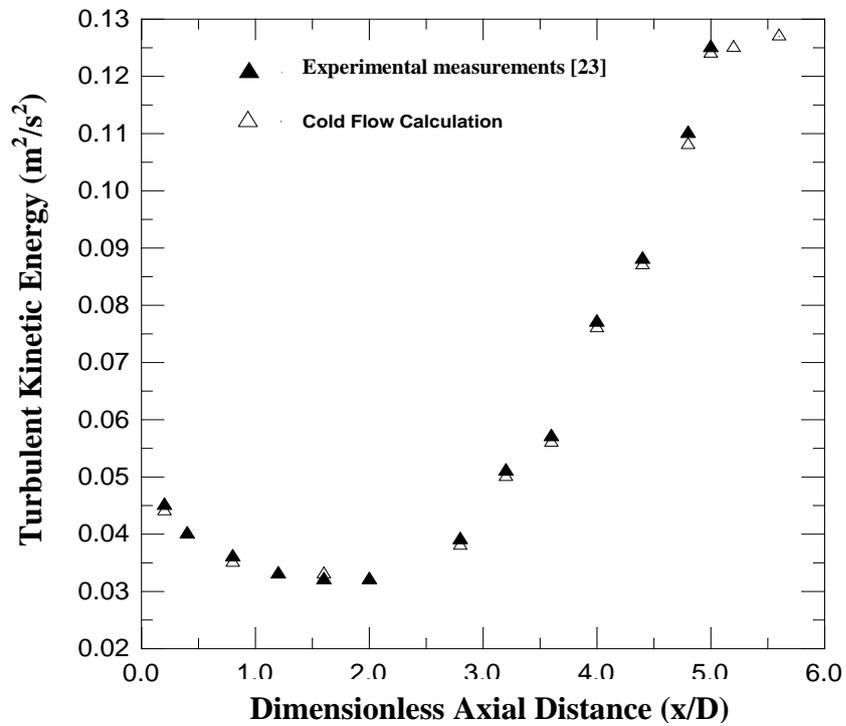


Figure 4.22 : Allure de \tilde{k} sur l'axe du brûleur [99]

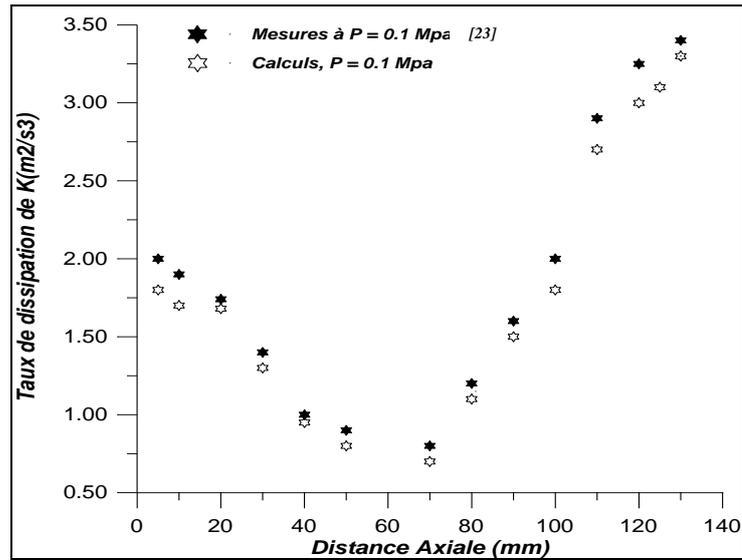


Figure 4.23 : Confrontation entre calculs et mesures de $\tilde{\epsilon}$

La fraction massique du combustible conserve sa valeur dans les gaz frais (égale à la fraction de mélange) jusqu'à une distance équivalente au cœur potentiel du jet, avant de diminuer et s'annuler au-delà du front moyen de la flamme (Figure 4.24).

Par analogie avec les flammes de prémélange parfait, on pourrait définir une variable adimensionnelle basée sur la fraction massique du combustible et définie comme [87]:

$$\tilde{c} = 1 - \tilde{Y} / \xi'' \quad (4.5)$$

où $\xi'' = 0,0338$ est la fraction de mélange dans les gaz frais. Cette variable adimensionnelle prend une valeur unitaire dans les gaz brûlés et s'annule dans les gaz frais, son contour spatial (Figure 4.25) est analogue à celui de la variable d'avancement utilisée dans les configurations de prémélange parfait.

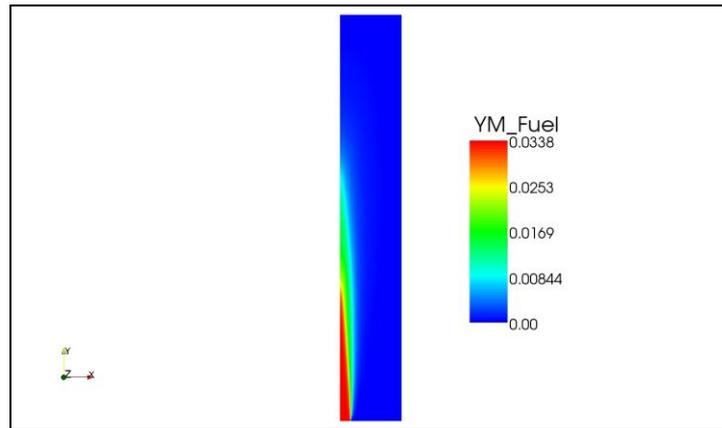


Figure 4.24 : Contour de la fraction massique du fuel [96]

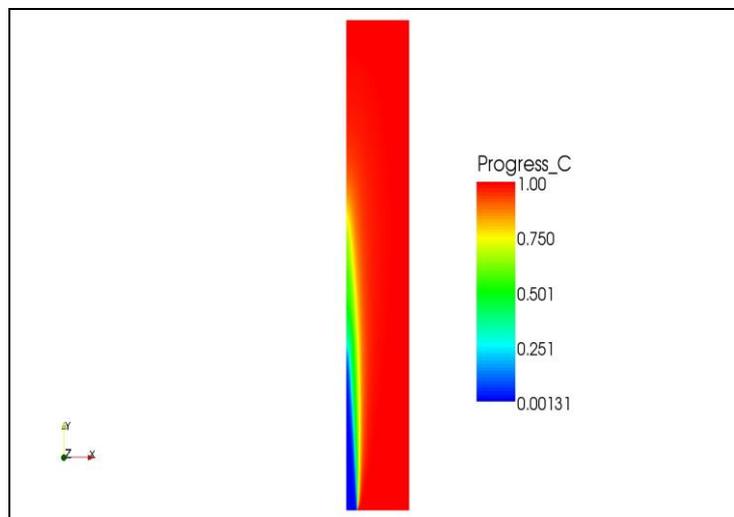


Figure 4.25 : Contour de la variable d'avancement [99]

Le contour spatial de la température statique révèle bien une forme conique pour la flamme en sortie du brûleur (figure 4.26). La flamme pilote est bien reproduite comme les deux zones localisées à température maximale (~ 2318 K), ce qui est évident puisque cette dernière est issue d'une réaction complète ($\phi = 1$). Cependant son effet thermique sert effectivement à élever la valeur de S_L et accrocher la flamme principale, sans autant influencer thermiquement le reste de la chambre de combustion. En effet, les gaz brûlés dans le domaine de calcul restent à un niveau thermique (~ 1640 K) assez bas par rapport à celui de la flamme pilote.

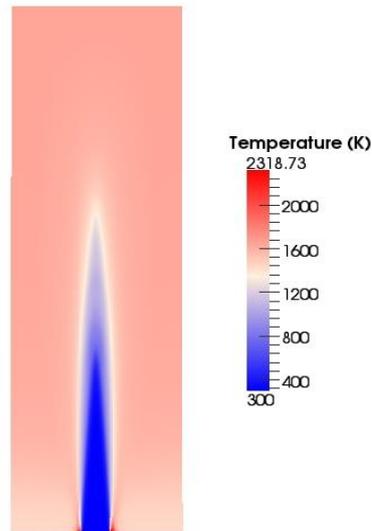


Figure 4.26 : Contour spatial de la température statique [99]

La contribution de la dissipation scalaire dans le terme source chimique, fait que la zone réactionnelle est assez précisément localisée par le modèle LW-P du premier ordre (Figure 4.27). La flamme paraît mince s'étalant sur une enveloppe accrochée aux bords du brûleur. Ceci est justifié par le fait qu'on se trouve dans un cas de chimie rapide avec un Damkohler qui est avoisine la valeur de 10 [94] sans que la zone réactionnelle soit totalement contrôlée par la turbulence, où la relaxation linéaire (de type EBU) de la dissipation scalaire (représentée par la variance maximale de \tilde{c}) induit une forte surestimation de la taille de la zone réactionnelle (Figure 4.28).

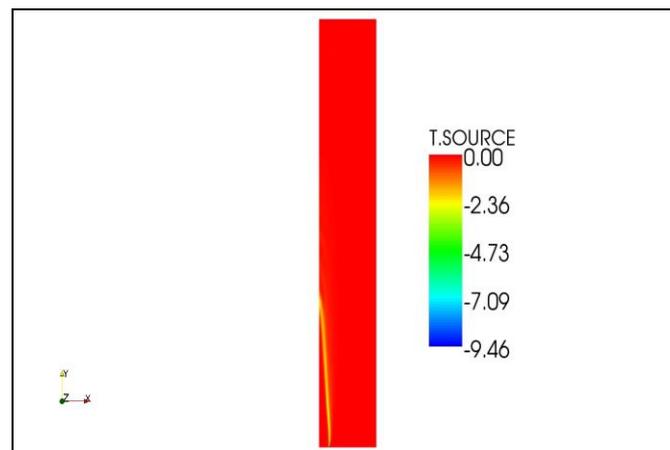


Figure 4.27 : Localisation de la zone réactionnelle dans le cas du modèle LW-P [96]

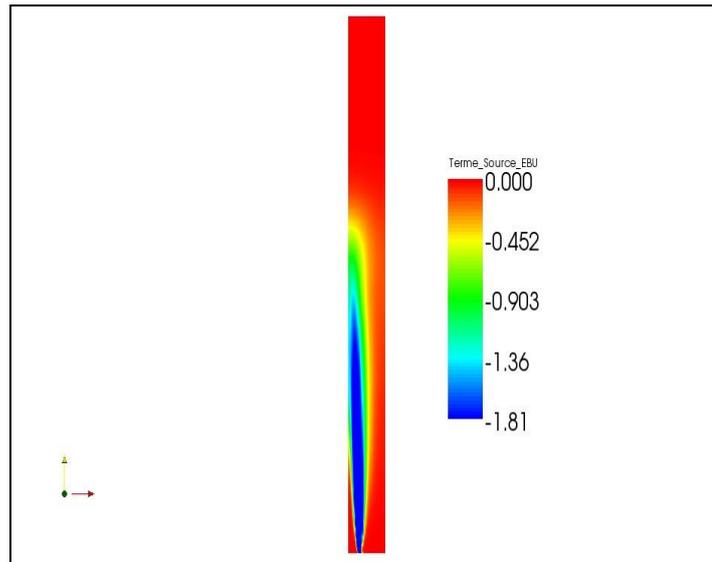


Figure 4.28 : Zone de réaction dans le cas du modèle EBU

En effet, dans des modèles de type EBU, la variance de la variable d'avancement $\overline{\rho c''^2} = \overline{\tilde{\rho} \tilde{c}''^2}$ de par, la nature bimodale de la Pdf ($\delta(c); \delta(1-c)$) qui ne considère que les états frais et brûlés, sans comptabiliser les états intermédiaires (gaz entrain de brûler) ; ne peut qu'être maximale ($\overline{\rho c''^2} \rightarrow \overline{\tilde{\rho} \tilde{c}''(1-\tilde{c})}$). Ceci induit évidemment, pour des Damkohler qui ne sont pas assez élevés ($1/D_a$ pas très inférieur à 1), une surestimation de la zone réactive, car la production chimique se fait sur la base des grandes échelles (gaz frais, gaz brûlés) et confond souvent entre zone thermique et zone réactionnelle de la flamme de prémélange. Le terme source chimique tel qu'il est visible sur la figure 4.28, correspond aussi au terme source prédit pour le LW-P, en utilisant une Pdf à deux (02) pics et non pas à quatre (04) pics de Dirac.

La distribution sur l'axe du brûleur, des valeurs de la variable d'avancement (Figure 4.29) montre que la zone des gaz entrain de brûler ($0,9 \geq c \geq 0,1$) est légèrement surestimée par rapport aux mesures effectués, chose que nous attribuons à l'effet du mélange entre la flamme pilote et la flamme principale pris en compte lors du transport de la covariance $\overline{\rho Y'' \cdot \xi''}$ dans le modèle LW-P.

A partir de la courbe de la distribution axiale de \tilde{c} , il est possible de définir l'épaisseur apparente de la flamme turbulente δ_f comme la distance pour laquelle la

variable d'avancement moyenne est comprise entre $0,99 \geq \tilde{c} \geq 0,01$. Ainsi, pour une épaisseur mesurée de $\delta_f = 62,5$ mm, on note une surestimation proche de 10% ($\delta_f = 70$ mm) pour les calculs de simulation. L'évolution de l'avancement de la réaction dans l'épaisseur de flamme (Figure 4.30) caractérisée via la variable spatiale adimensionnelle $Z = (x - x|_{\tilde{c}=0,5}) / \delta_f$ révèle un comportement linéaire avec une pente $a = 4,28$, qui traduit bien la relation $\tilde{c} = 1 / (1 + \exp(-a.Z))$ qui a été proposée par Lipatnikov et al. [93]. La valeur de la pente est assez voisine de celle retrouvée ($a = 4,3$) par Pavé [94] et par ($a = 4,02$) Shepherd [100].

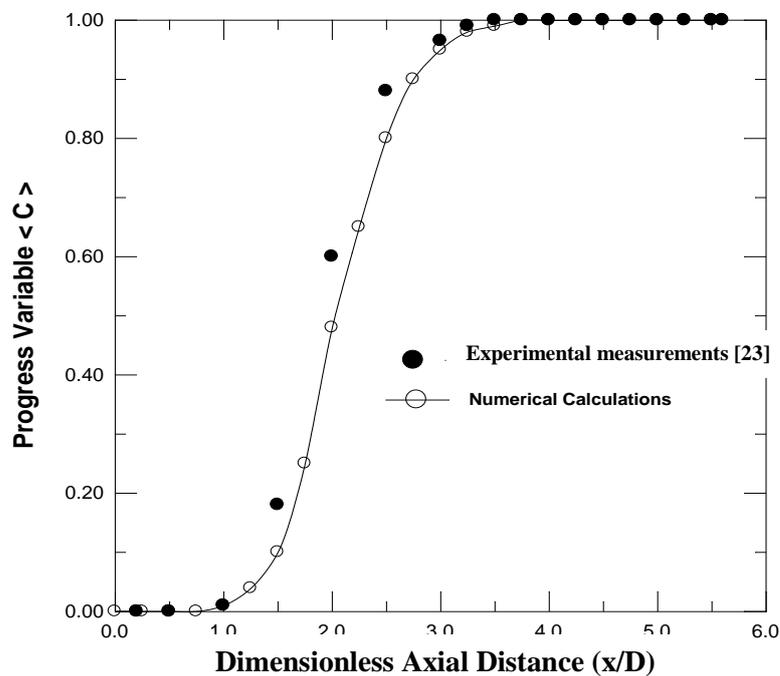


Figure 4.29 : Distribution de \tilde{c} sur l'axe du brûleur

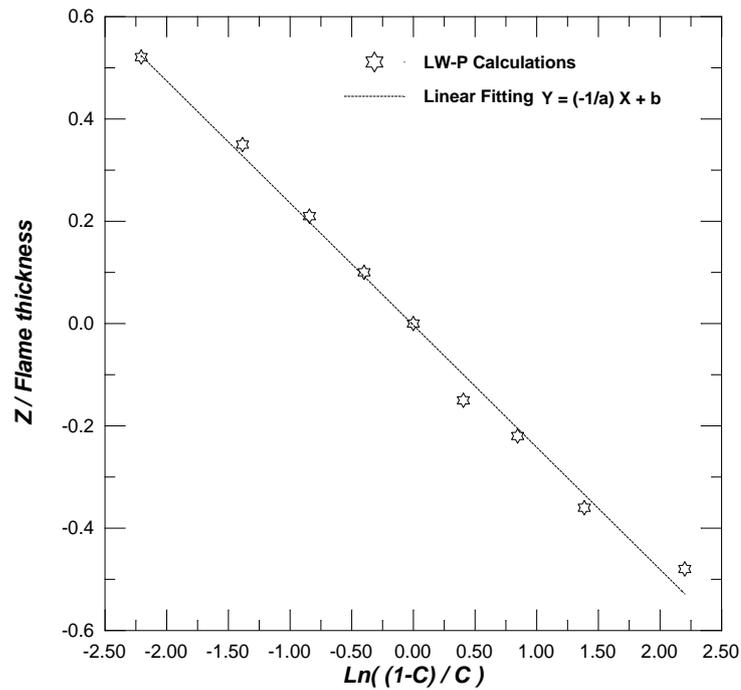


Figure 4.30 : Evolution de Z en fonction de \tilde{z}

Pour la configuration expérimentale étudiée (ICARE), le modèle LW-P de premier ordre a permis de reproduire assez fidèlement le champs thermique et l'avancement chimique. Une légère surestimation de 6% a été noté sur la température statique et ce, en raison de la chimie complète (réaction CH_4 -air à une seule étape) utilisée dans le modèle de combustion.

Le contour spatial du pseudo variable d'avancement, montre une forme conique pour la flamme principale. En utilisant une expression de pontage ($S=0,85$) pour les termes de covariance, les valeurs de \tilde{z} affichent un bon accord avec les mesures.

Pour la simulation en écoulement froid (sans combustion), un bon accord est noté avec l'expérimental, notamment pour la taille du cœur potentiel de l'écoulement ainsi que la dispersion de la turbulence suivant l'axe de la chambre de combustion. De plus, le profil de la vitesse moyenne en aval de la flamme convient parfaitement avec l'expérimental, bien qu'une faible sous-estimation dans la région des gaz frais, est notée.

Des efforts sont encore nécessaires pour améliorer la prédiction du mélange turbulent par un modèle de turbulence du second ordre. Un tel modèle va permettre de traiter la turbulence générée par la flamme, et la diffusion contre-gradient dans des conditions de prémélange partiel. L'extension du modèle LW-P pour prendre en compte les effets des schémas cinétiques détaillés dans les calculs de flammes, tel que des phénomènes d'extinction ou de le réallumage, reste un défi majeur en combustion turbulente.

4.3. Cas applicatif N°3 : la flamme Sandia-D

Dans cette troisième application, il est question d'analyser puis de prédire numériquement la structure d'une flamme de prémélange riche, stabilisée par des gaz brûlés en sus d'un Co-courant d'air. C'est une configuration donc de prémélange partiel. La différence avec le cas de la flamme précédente (ICARE), réside dans le fait d'une part, de la chimie de combustion du CH₄ dans l'air, pour laquelle un mécanisme réactionnel réduit (16 espèces, 41 réactions) est adopté et d'autre part, du régime de combustion, qui par de simples calculs sur $\delta_L, L_t, S_L, \sqrt{u''^2}$ s'avère se localiser dans la zone des flammes plissées-épaissies. La structure interne de la flamme, est donc relativement modifiée par la turbulence, qui fait que le modèle LW-P (conçu essentiellement pour un régime de flammelettes) ne semble pas plus adapté.

En l'occurrence, le solveur Ansys-Fluent sera utilisé pour la description de la dynamique de la flamme et de la chimie de combustion. Il est important de se placer dans un code de chimie tabulée, où on supposera d'une part un équilibre chimique pour construire à-priori- une liste de fraction de mélange pour le cas d'une Pdf(ξ) présumée de type Bêta, et d'une part, pour générer une table de fraction de mélange/variable d'avancement lors d'une chimie réduite (ISAT) pour le cas d'une Pdf transportée [101], munie de deux sous-modèles de micro-mélange (Curl, IEM) [72,76].

4.3.1. Description du montage et points de fonctionnement

Dans le cadre du projet TNF (Turbulent Non-premixed Flame), une série de flammes accrochées par pilote ont fait l'objet de multiples mesures expérimentales. Cette campagne de mesure constitue un vivier important mis à la disposition des numériciens pour la validation de solveurs ou de modèles. Le dépouillement des mesures expérimentales a fait l'objet de nombreuses publications, notamment celles dédiées à la structure de flamme, Barlow *et al.* [22,102]. La configuration retenue pour valider le modèle précédemment exposé est une de ces flammes : la flamme de Sandia-D. Une visualisation de la flamme est montrée en figure 4.31. Cette configuration est caractérisée par trois jets. Le jet annulaire central est formé d'un mélange riche composé à 25% de méthane et 75% d'air en volume et à une

température de 291 K. Ce jet est entouré de 72 flammes pilotes pauvres d'un mélange de C_2H_2 , H_2 , air, CO_2 et N_2 avec la même enthalpie et le même équilibre qu'un mélange méthane/air à une richesse de 0,77. Dans le cadre de ces travaux, cet écoulement est considéré comme une solution homogène de gaz brûlés issue d'une combustion méthane/air à une richesse de 0,77 [102].



Figure 4.31: Photographie de la flamme Sandia-D [102]

L'ensemble évolue dans un Co-courant d'air à 294 K. Les propriétés thermodynamiques de chacun des trois écoulements peuvent être décrites par une fraction de mélange, dont les propriétés sont recensées dans le tableau 4.3. Sachant que le mélange frais (jet principal) est riche, le combustible pourrait brûler en diffusion en aval du front de prémélange, ce qui rend la définition de la fraction de mélange relativement différente de celle utilisée classiquement lors de présence de deux courants (fuel, oxydant) [102] :

$$\xi = \frac{b - b_{ox}}{b_{fuel} - b_{ox}} \quad (4.6)$$

où

$$b = 2 \frac{Y_C}{M_{w,C}} + 0,5 \frac{Y_H}{M_{w,H}} - \frac{Y_O}{M_{w,O}} \quad (4.7)$$

Y_C , Y_H et Y_O sont respectivement ; les fractions massiques du carbone, d'hydrogène et d'oxygène atomique, et $M_{w,C}$, $M_{w,H}$, $M_{w,O}$ leurs poids moléculaire. b_{ox} et b_{fuel} sont les valeurs de b aux entrées oxydant et carburant.

Pour la configuration actuelle, cette définition prend en considération aussi les espèces qui composent les gaz brûlés issues de la flamme pilote. La valeur stœchiométrique $\xi_{st} = 0,351$ a bien été confirmée par les mesures [102].

TAB. 4.3: Composition du mélange frais

	Fuel	Oxydant
ξ	1,0	0,0
Y_{CH_4}	0,1576	0,0
Y_{O_2}	0,198	0,2321
Y_{N_2}	0,6428	0,7555
Y_{AR}	0,0016	0,0124

Le domaine géométrique ainsi que les conditions aux limites sont schématisés dans la figure 4.32. L'injection de fuel se fait par un tube de diamètre $D = 7,2$ mm. Le diamètre d'injection des flammes pilotes est lui, égal à $2,53 \times D$.

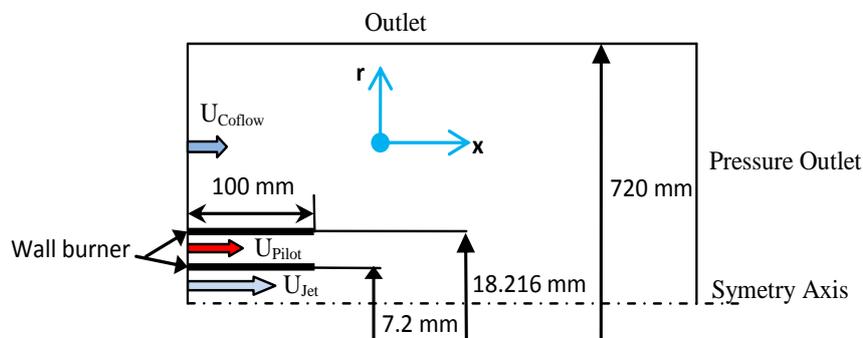


Figure 4.32 : Modèle géométrique et conditions aux limites

Les vitesses moyennes et les fractions de mélange de chaque écoulement sont précisées dans le tableau 4.4. Dans les conditions décrites, les flammes pilotes contribuent à hauteur de 6% à l'énergie thermique produite par le brûleur et le nombre de Reynolds basé sur l'écoulement dans le tube d'injection est égal à 22 400 [102]. Les mesures expérimentales concernant les espèces et la température sont effectuées avec la méthode de Raman-Rayleigh et sont disponibles à différentes hauteurs : $1 \times D$,

2×D, 3×D, 7.5×D, 15×D, 30×D, 45×D, 60×D et 75 ×D. La précision accordée à ces mesures est de l'ordre de 3% pour la température, 5% pour les espèces majoritaires et 15% pour le NO [102]. Les mesures des composantes de la vitesse sont disponibles aux mêmes hauteurs ainsi que dans le plan de sortie. Ces mesures, effectuées avec la méthode LDV à deux composantes, proviennent de TU Darmstadt [104].

TAB. 4.4: Conditions aux limites de la flamme Sandia-D.

	Jet principal	Flammes pilotes	Co-courant d'air
Diamètre (mm)	7,2	18,12	720
Vitesse moyenne (m.s ⁻¹)	49,6	11,4	0,9
Fraction de mélange	1	0,271	0

Plusieurs campagnes de mesures de mesures ont intéressé la configuration de la flamme Sandia-D. les vitesses moyennes telles qu'elles figurent sur le tableau 4.4, sont relatives au mélange principal, aux gaz brûlés de la flamme pilote ainsi qu'au Co-courant d'air frais. Il est à noter que les fluctuations mesurées sur les vitesses $\sqrt{u''^2}$ sont très dispersées et peuvent affecter le point de fonctionnement du brûleur, en termes de fraction de mélange ou de richesse. Afin de se situer globalement par rapport à un régime de combustion plutôt qu'un autre, les quantités dynamiques $\sqrt{u_k''^2}$, l_T , l_K et thermochimiques δ_L , S_L sont à spécifier puisqu'elles mesurent le degré de compétitivité qui existe entre la chimie et la turbulence. En se référant aux courants respectifs, du prémélange partiel, de la flamme pilote et du Co-courant d'air, il est possible de distinguer trois différents point de fonctionnement, dont les caractéristiques figurent sur le tableau 4.5 (pour une viscosité cinématique de $\nu = 1,58 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$).

TAB. 4.5: Points de fonctionnement et thermochimie

	Point 1	Point 2	Point 3
$l_T (mm)$	7,2		
$\delta_L (mm)$	$9,18 \times 10^{-5}$		
$S_L (m/s)$	$24,5 \times 10^{-2}$		
$\sqrt{u_k'^2} (m^2/s^2)$	6,1	2,5	1,3
$l_K (mm)$	$1,8807 \times 10^{-5}$	$3,6717 \times 10^{-5}$	$5,9961 \times 10^{-5}$
K_a	16,737	04,3913	01,6466
D_a	3,1501	7,6863	14,7813

Il est important de signaler que les valeurs obtenues pour le nombre de Damkohler et Karlovitz ne servent qu'à caractériser le régime de combustion pour la configuration D de la flamme Sandia, et ne sont nullement des quantités spatiales ou temporelles.

En dressant ces trois points sur un diagramme de combustion (dit de Borghi-Peters), il s'avère clair qu'on se situe globalement dans la zone des flammes épaissies et non pas dans une zone de flammellettes (figure 4.33)

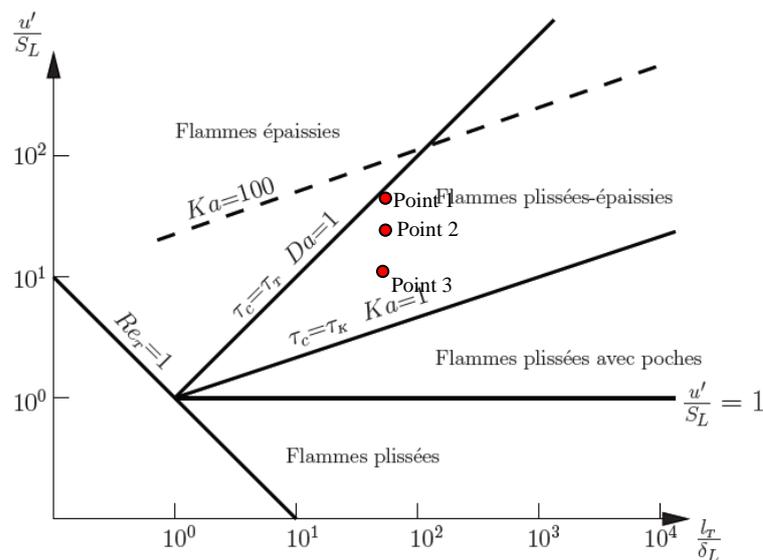


Figure 4.33 : Emplacement des trois points de fonctionnement sur le diagramme de combustion

4.3.2. Calculs par simulation

Les calculs de la flamme seront entrepris par le biais du solveur Ansys-Fluent [68] en configuration axisymétrique ; où l'on aura à résoudre une équation de continuité, deux équations de quantité de mouvement, (selon r , x), une équation d'énergie, deux équations pour la turbulence, en sus d'une équation d'état algébrique. Pour le cas de l'équilibre chimique, on résout une équation sans terme source pour la fraction de mélange moyenne et une autre pour sa variance.

Pour le cas de la chimie réduite, on résout en plus une équation pour la fonction densité de probabilité (Pdf de Favre) avec intégration dans l'espace des phases, des termes sources chimiques (algorithme ISAT). Le domaine de calcul est discrétisé en 25200 cellules structurés dans lequel, un raffinement est effectué près de la paroi du brûleur (figure 4.34), mais aussi au voisinage de l'axe central, où la flamme est censée se développer.

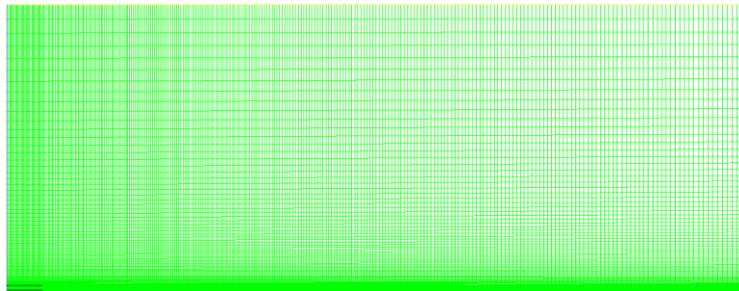


Figure 4.34 : Grille structurée des calculs

Pour le courant principal (prémélange), un profil de vitesse est imposé au plan de sortie du brûleur, (figure 4.35) il est donnée par :

$$\frac{v}{v_{max}} = \frac{1}{\beta} \left(\frac{r}{0.5D} \right)^{\frac{1}{n}} \quad (4.8)$$

avec $n = 6,6$ et $\beta = 0,807$ [105], v est la vitesse axiale et v_{max} est la vitesse sur l'axe du brûleur. La turbulence est initialisée par deux profils de $k(r)$ et de $\varepsilon(r)$ interpolés à partir des mesures en utilisant des polynômes de degré deux(02) [106].

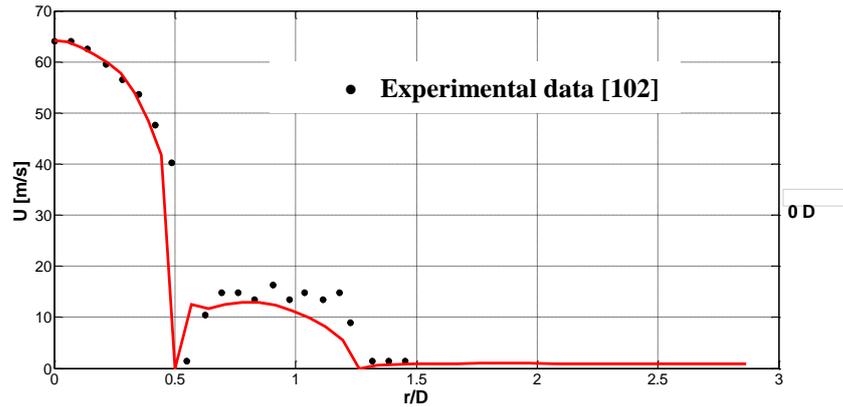


Figure 4.35 : Profil de la vitesse axiale en sortie du brûleur

Pour cette étape, l'approche statistique à Pdf présumée de type *Beta* est appliquée pour l'interaction chimie-turbulence. Les modèles standards $k-\varepsilon$, avec et sans correction de Pope, basés sur l'hypothèse d'une turbulence isotrope, sont adoptés pour la fermeture des termes de flux turbulents. Les résultats d'une simulation de la même configuration tirés de [107], par le modèle RSM en 3D, est montrée à titre comparatif.

Les équations des bilans moyennées au sens de Favre seront résolues à l'aide du solveur ANSYS-FLUENT [68]. Pour toutes les simulations, le schéma de discrétisation du second ordre est utilisé pour les équations de conservations de masse, de l'énergie cinétique k , de la dissipation ε , de la fraction de mélange ξ , de la variable moyenne d'avancement c et de la variance $\xi^{\prime 2}$. Pour l'interpolation de la pression, le schéma PRESTO est adopté et l'algorithme SIMPLE est choisi pour le couplage pression-vitesse [48].

Dans cette partie, l'état thermochimique de l'écoulement est défini par deux variables scalaires. Une variable de progression \tilde{c} pour caractériser l'avancement des réactions chimiques (gaz frais, gaz brûlés) et s'exprimant comme une température (ou une fraction massique d'un produit) réduite $\tilde{c} = (\tilde{T} - T_u) / (T_b - T_u)$ où T_u , T_b désignent respectivement les températures des gaz frais et des gaz brûlés. Cette variable obéit à une équation de transport avec un terme source chimique [69] :

$$L(\tilde{c}) = \bar{\rho} \tilde{\omega}_c = \rho_u \tilde{U}_t |\nabla \tilde{c}| \quad (4.9)$$

L représente un opérateur moyen d'advection-diffusion, ρ_u est la masse volumique des gaz frais et \tilde{U}_t est la vitesse de flamme turbulente, qu'on exprime dans ce travail via le modèle de Zimont [108]. Une seconde variable appelée fraction de mélange $\tilde{\xi}$ est utilisée pour caractériser le mélange à grandes échelles entre l'air et le combustible. Dans le cas où les hypothèses de Shvab-Zeldovitch sont vérifiées, on montre que la fraction de mélange est une variable passive :

$$L(\tilde{\xi}) = 0 \quad (4.10)$$

Sachant que le mélange peut se faire à petites échelles (micro-mélange), on résout souvent une équation de transport pour la variance $\widehat{\xi'^2}$ de la fraction de mélange. Les deux variables d'état définissent complètement la fonction densité de probabilité jointe qui dans le cas d'une flamme infiniment mince, s'exprime comme [77]:

$$P(c, \xi) = [(1 - \tilde{c})\delta(c) + \tilde{c}\delta(1 - c)]\text{Beta}(\xi) \quad (4.11)$$

L'examen de la figure 4.36 montre que la fraction moyenne de mélange $\tilde{\xi}$, conserve une valeur unitaire jusqu'à une distance avoisinant $x/d=10$. Ceci révèle un retard dans le mélange du combustible avec l'oxydant au niveau de l'axe central en raison du caractère rond du jet en sortie du brûleur. En aval de cette station, la décroissance commence à se ressentir par mélange d'abord avec les produits de la flamme pilote, puis avec le Co-courant d'air. La limite atteinte par la fraction moyenne de mélange correspond à une valeur inférieure ($\tilde{\xi} \approx 0,1$) à sa valeur à l'injection de la flamme pilote ($\tilde{\xi} = 0,271$). Cette valeur confirme bien que l'air du Co-courant arrive à atteindre (par entrainement) l'axe central à partir de la station axiale ($x/d > 50$). La valeur stœchiométrique ($\xi_{st} = 0,35$) de la fraction de mélange telle qu'elle est donnée par les mesures de Barlow et al. [102] est atteinte en niveau de la station axiale $x/d=50$. En cette position, une partie du front moyen de la flamme est sensée se positionner ($\tilde{\xi} = \xi_{st}$).

Quant à l'avancement des réactions chimiques, la figure 4.37 dresse le contour spatial de la variable d'avancement moyenne. On peut constater que la flamme est

bien accrochée aux lèvres du brûleur malgré l'existence d'une flamme pilote à l'intérieur même du canal secondaire. Aussi, il est important de signaler que la hauteur moyenne de la flamme, telle qu'elle correspond à la limite de zone des gaz frais, vaut 50 cm. Cette valeur représente une surestimation relative de 6 % par rapport à la hauteur mesurée expérimentalement [102].

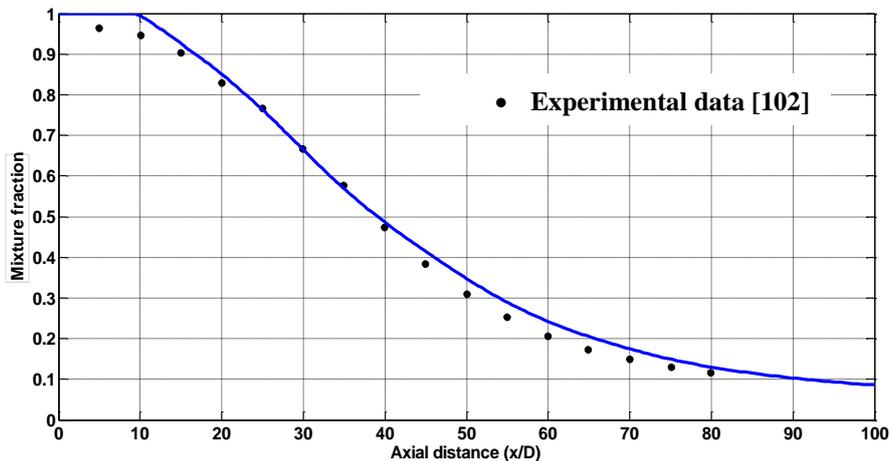


Figure. 4.36 : Profil axial de la fraction de mélange moyenne

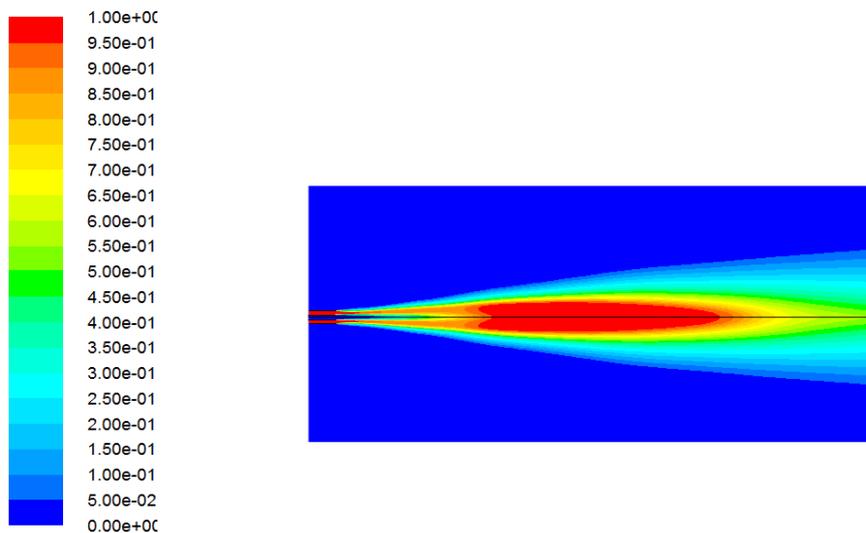


Figure 4. 37 : Contour spatial de la variable d'avancement

La figure 4.38 dresse différents profils de température statique sur l'axe central du domaine de calcul. Ces profils sont issus de calculs via différents modèles de turbulence ; à savoir, $k-\varepsilon$ standard, avec correction de Pope et le modèle à contraintes

de Reynolds. Pour le pic de température atteint, le modèle $k-\varepsilon$ avec et sans correction de Pope, affiche une surestimation relative de 11% par rapport aux mesures, chose qu'on pourrait attribuer au non prise en compte des pertes radiatives dans l'équation de l'énergie. Pour le cas du modèle RSM, le développement du mélange dans la troisième direction implique un épanouissement plus important et une diffusion thermique conséquente. Pour ce cas, le maximum de température s'avère plus proche (-3%) de la valeur mesurée (~1940 K).

Quant à l'allure des profils thermiques (Figure 4.38) relatifs aux modèles $k-\varepsilon$ standard (avec une valeur par défaut $C_{1\varepsilon} = 1,44$) et RSM, un décalage axial est noté par rapport aux mesures. Pour les deux modèles, la tranche relative à l'élévation de température se manifeste en amont de l'allure expérimentale. Aussi, la décroissance de la température notée en aval de la station $x/d=50$ s'avère plus raide par rapport aux mesures, affichant entre autre une importante sous estimation.

Une correction de Pope opérée sur le modèle $k-\varepsilon$ et consistant à utiliser des valeurs non standards $C_{1\varepsilon} = 1,52$, $Sc_T = 1,0$ permet d'avancer vers l'aval la position du pic de température, tout en gardant un écart assez faible (<5%) avec les mesures, dans la partie de décroissance de la température statique.

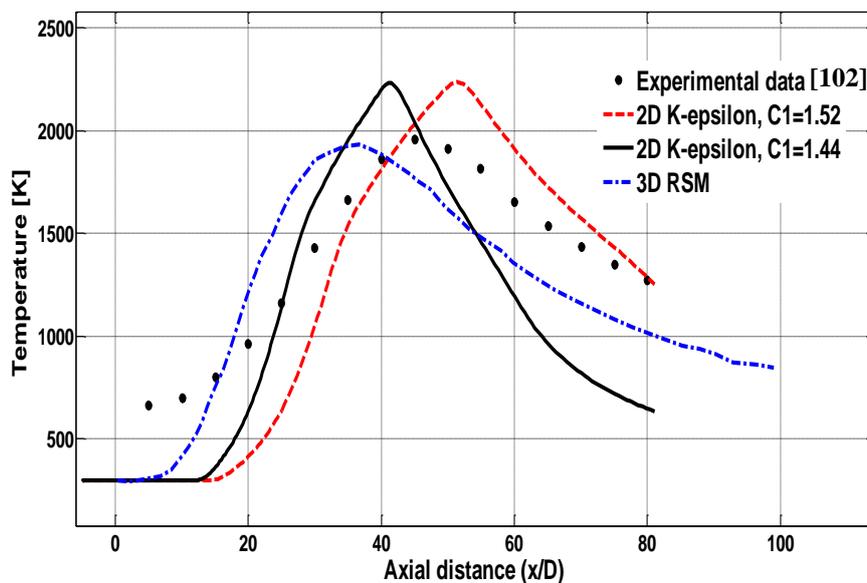


Fig. 4.38. Profil axial de la température statique

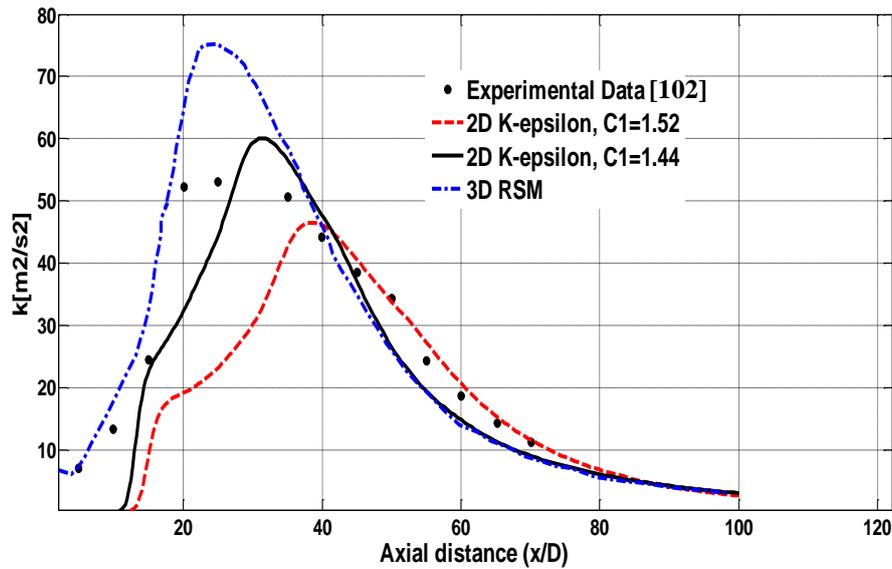


Figure 4.39 : Profil de l'énergie cinétique de turbulence sur l'axe central.

L'effet du changement des valeurs des constantes $C_{1\epsilon}$ et Sc_T est montré sur la courbe de la figure 4.39. Il est remarqué que les simulations utilisant le modèle de turbulence $k-\epsilon$ avec les paramètres standards, surestime l'énergie cinétique turbulente au centre et à la traversée (en aval de la station $x/d=50$) du front moyen de la flamme. Par contre, la correction de Pope permet de reproduire assez raisonnablement la perte d'énergie cinétique de turbulence, telle qu'elle est mesurée dans le prolongement aval au front moyen. En effet, le fait d'augmenter la valeur de la constante $C_{1\epsilon}$ liée au terme positif de production de l'énergie cinétique de la turbulence dans l'équation de dissipation du modèle $k-\epsilon$, revient à accentuer la dissipation qui se manifeste par une perte de l'énergie de turbulence par frottement rotationnel.

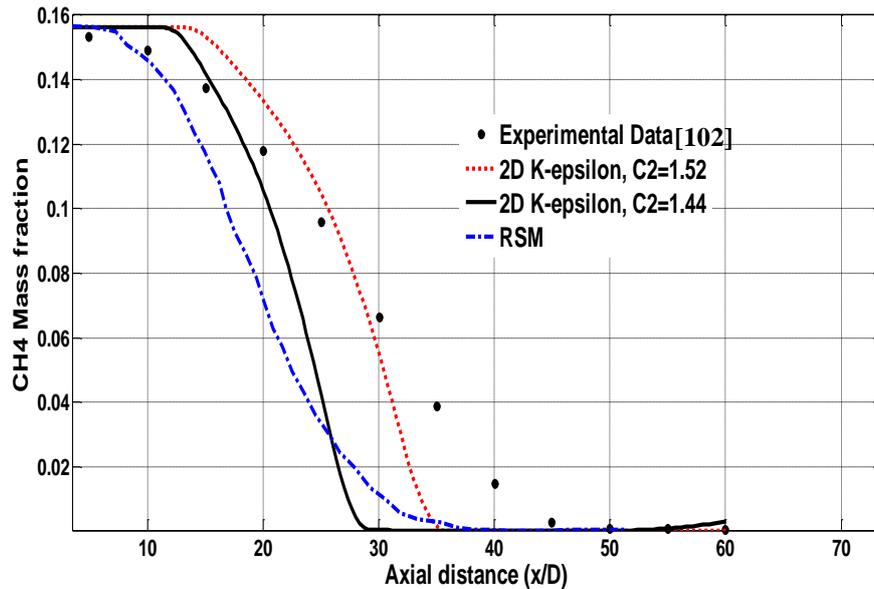


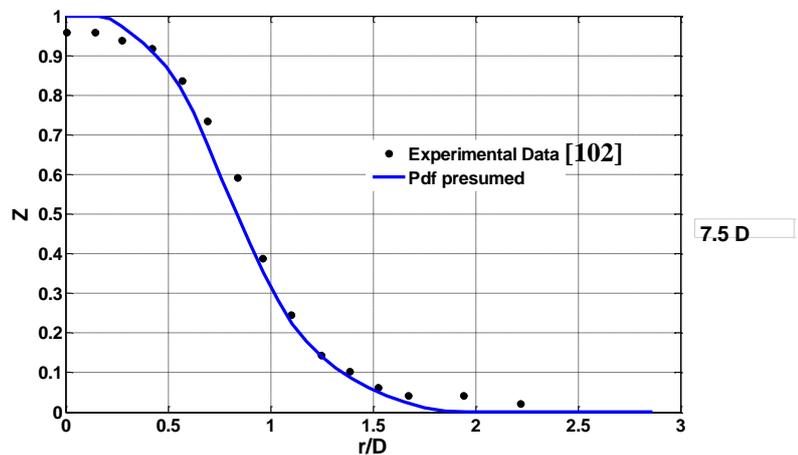
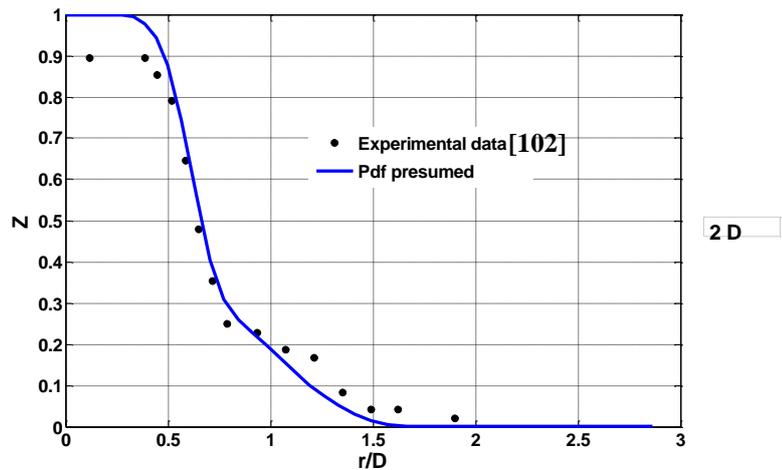
Figure 4.40 : Profil axial de la fraction massique du méthane

Dans cette configuration, la chimie est fortement couplée avec la turbulence où, une faible turbulence diminue le mélange entre le méthane et l'air, ce qui conduit à une faible consommation du méthane. La figure 4.40 montre la distribution de la fraction massique du méthane suivant l'axe. En comparaison avec l'expérimental, tous les calculs montrent une diminution rapide de la fraction massique du méthane et ce, en utilisant des valeurs standards $C_{1\epsilon} = 1,44$, $Sc_T = 0,8$ des modèle $k-\epsilon$ et RSM. Cette rapide consommation est captée au plan $x/d=40$, alors que les données expérimentales et les simulations par la correction de Pope montrent une consommation totale au plan $x/d=50$, ce qui s'avère plus raisonnable, puisqu'en cette station, une stœchiométrie ($\xi = \xi_{st}$) est assurée.

Pour l'analyse précédente, il s'agissait de tenter de reproduire globalement la dynamique et la thermique de la flamme Sandia-D, par ajustement des constantes du modèle de turbulence $k-\epsilon$, afin de prendre en compte les effets de l'étirement tourbillonnaire sur le développement du mélange, et par conséquent, sur la stœchiométrie de la flamme. Dans ce cas, la fonction densité probabilité (Pdf) était présumée, et se présentait sous forme d'un produit de deux (02) Pdf, statistiquement

indépendantes (relation 4.11), alors que le taux de réaction moyen était modélisé selon l'approche de Zimont (relation 4.9).

Sur un ordinateur personnel de type (CPU I3, RAM 4GO), les calculs volumes finis sur une grille de 2500 cellules ont nécessités 60 minutes pour converger. Si on se réfère au diagramme de combustion précédent (figure 4.33). La flamme Sandia-D semble être affectée dans sa structure interne, par les structures turbulentes. La chimie ne peut donc pas être en équilibre, ni infiniment rapide.



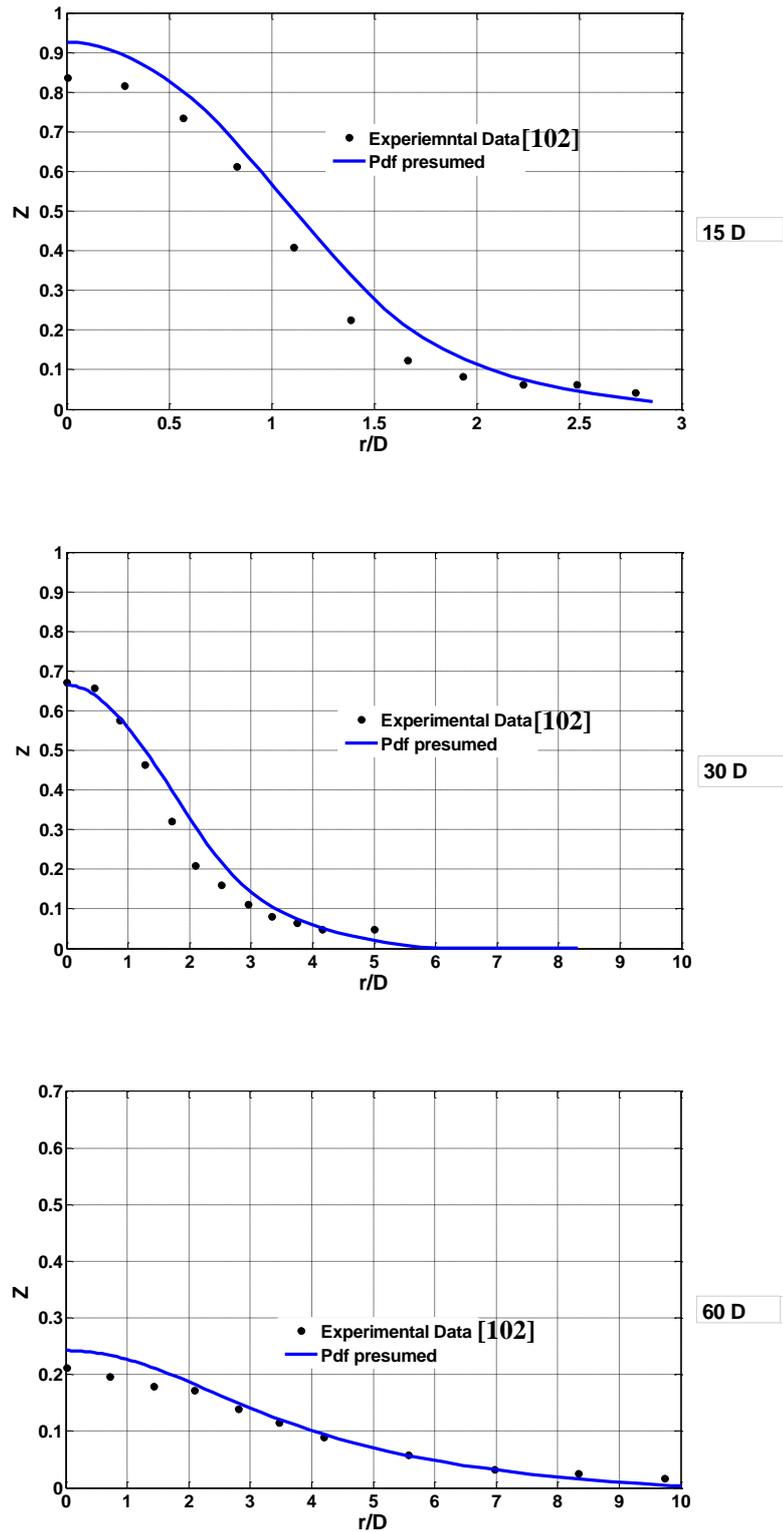


Figure 4.41 : Profils radiaux de la fraction de mélange à différentes stations axiales

La figure 4.41 dresse la distribution radiale de la fraction moyenne de mélange $\tilde{\xi}$, à différentes stations axiales ($2 \times D \rightarrow 60 \times D$). Pour rappel, les stations ont été choisies sur la base des données de mesures disponibles dans la littérature [102].

Il est notée que la fraction de mélange maximale ($\xi = 1$) correspondant au courant du prémélange (jet principal) n'est jamais atteinte par les mesures, puisque ces dernières ne sont disponibles qu'à partir de la station axiale $2 \times D$ située à l'extérieur du brûleur. Cette valeur expérimentale maximale diminue au fur et à mesure qu'on avance dans la direction axiale, passant de $\xi_{max} = 0,9$ en $x/D=2$ à $\xi_{max} = 0,2$ en $x/D=60$. La diminution est due au mélange entre le courant central (prémélange), les gaz brûlés et l'air frais ; qui s'accroît au fur et à mesure du développement de l'écoulement dans la direction axiale. Les valeurs numériques par contre, arrivent à reproduire des valeurs unitaires $\tilde{\xi} = 1$, étant donné que les schémas numériques ont pu, dans notre cas, respecter la condition à la limite (tableau 4.4) pour le prémélange, en entrée du domaine de calcul.

Dans ce qui suit, la Pdf ne sera plus présumée, mais transportée via une équation de transport, qui fait apparaître des termes de micro-mélange, qu'on modélisera par les sous modèles Curl et IEM [72,76]. Comme il est connu, l'équation de la Pdf est *a priori*- valable dans n'importe quel régime de combustion, puisqu'aucune hypothèse n'est émise sur les temps caractéristiques (τ_t, τ_{ch}) ou sur les échelles spatiales (l_T, l_K, δ_L) [101].

Dans notre cas, un mécanisme réactionnel de 16 espèces et 41 réactions chimiques [14] a été adopté en combinaison avec un modèle de micro-mélange pour la simulation. Deux différents modèles (IEM et Curl modifié) ont été utilisés pour tester leur effet sur le champ thermique et le calcul de la concentration du monoxyde de carbone CO.

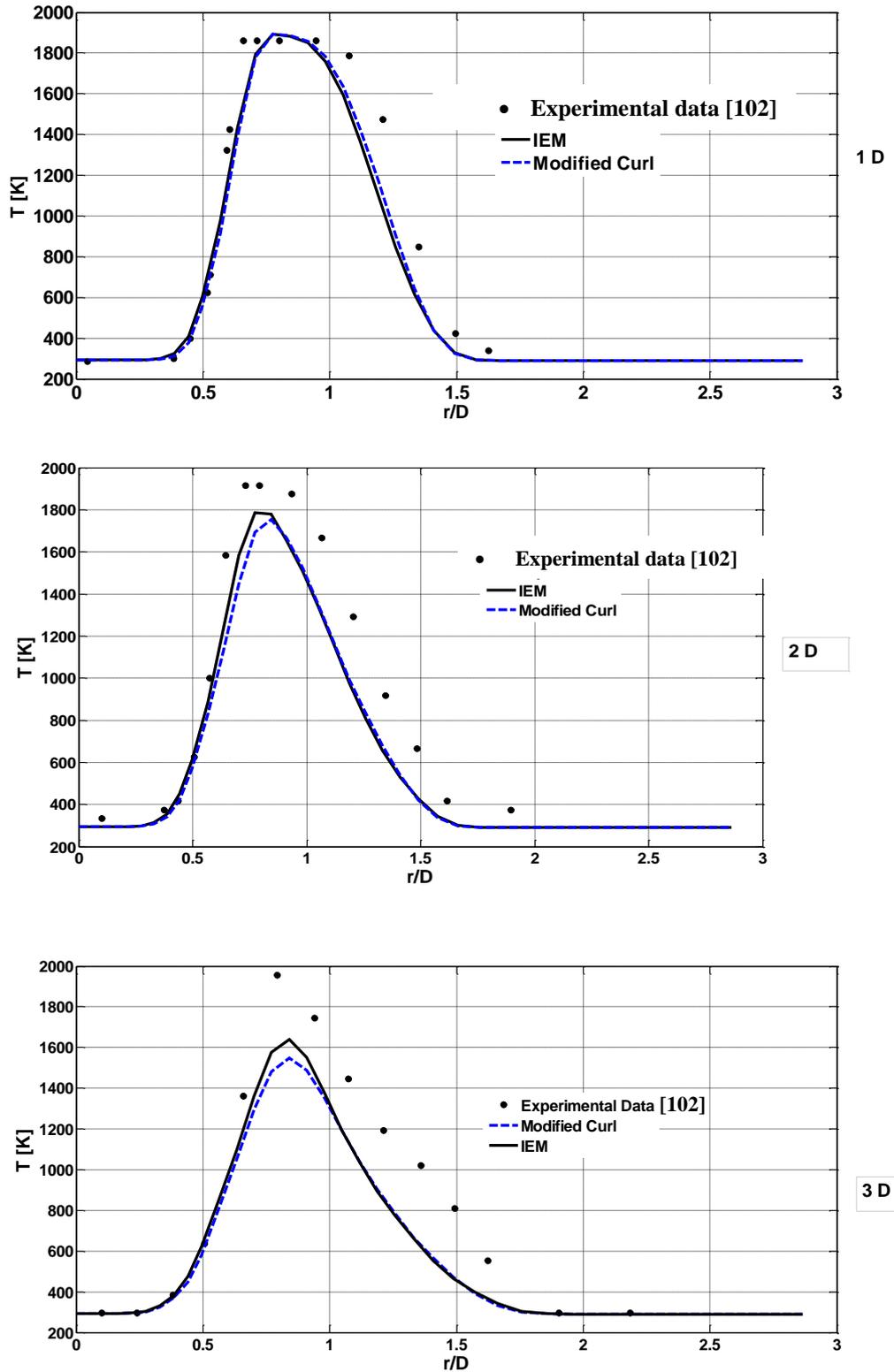


Figure 4.42: Profils radiaux de la température à différentes stations axiales ($x/d=1$; $x/d=2$; $x/d=3$)

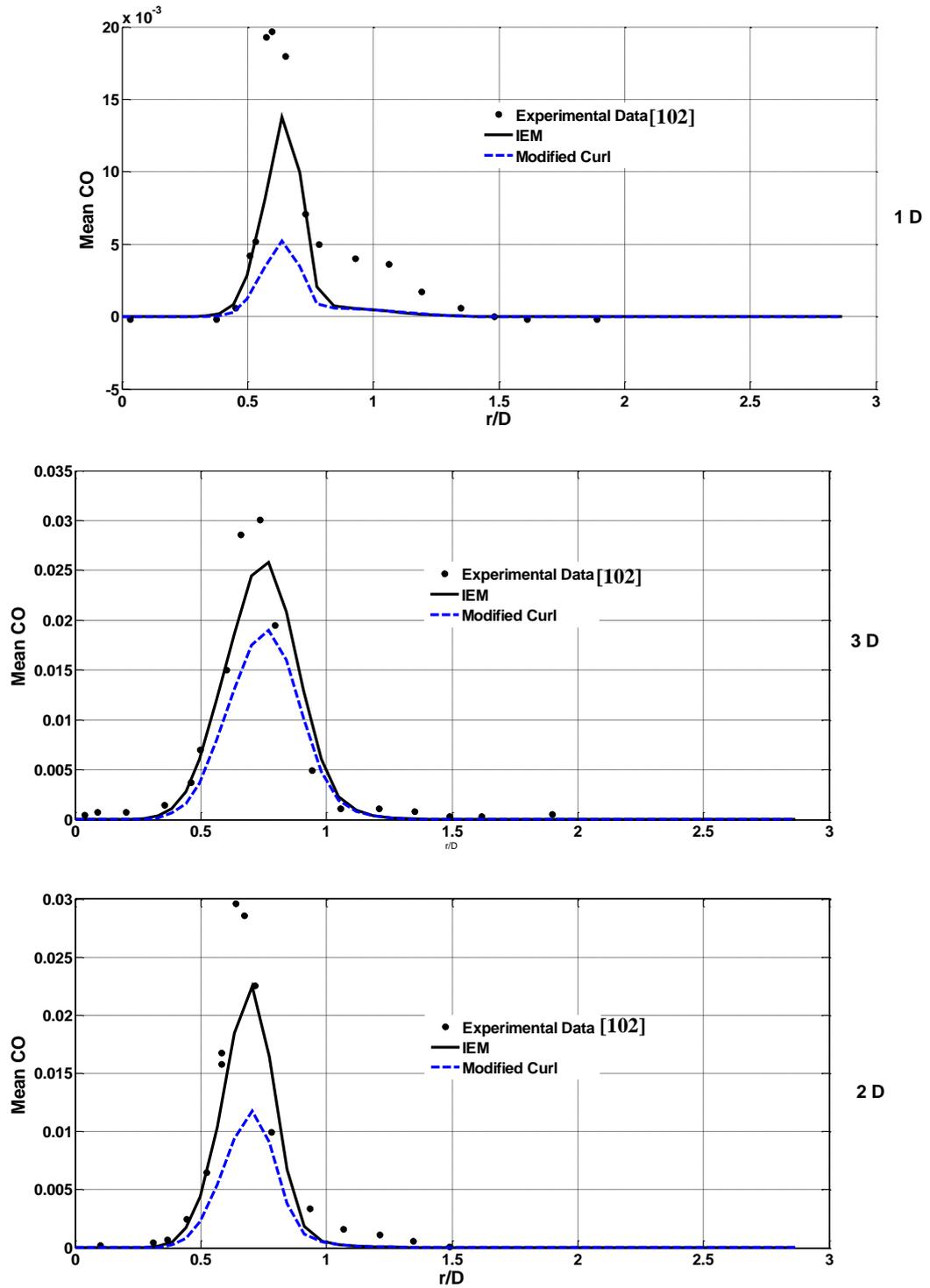


Figure 4.43 : Profils radiaux de monoxyde de carbone à différentes stations axiales ($x/d=1$; $x/d=2$; $x/d= 3$)

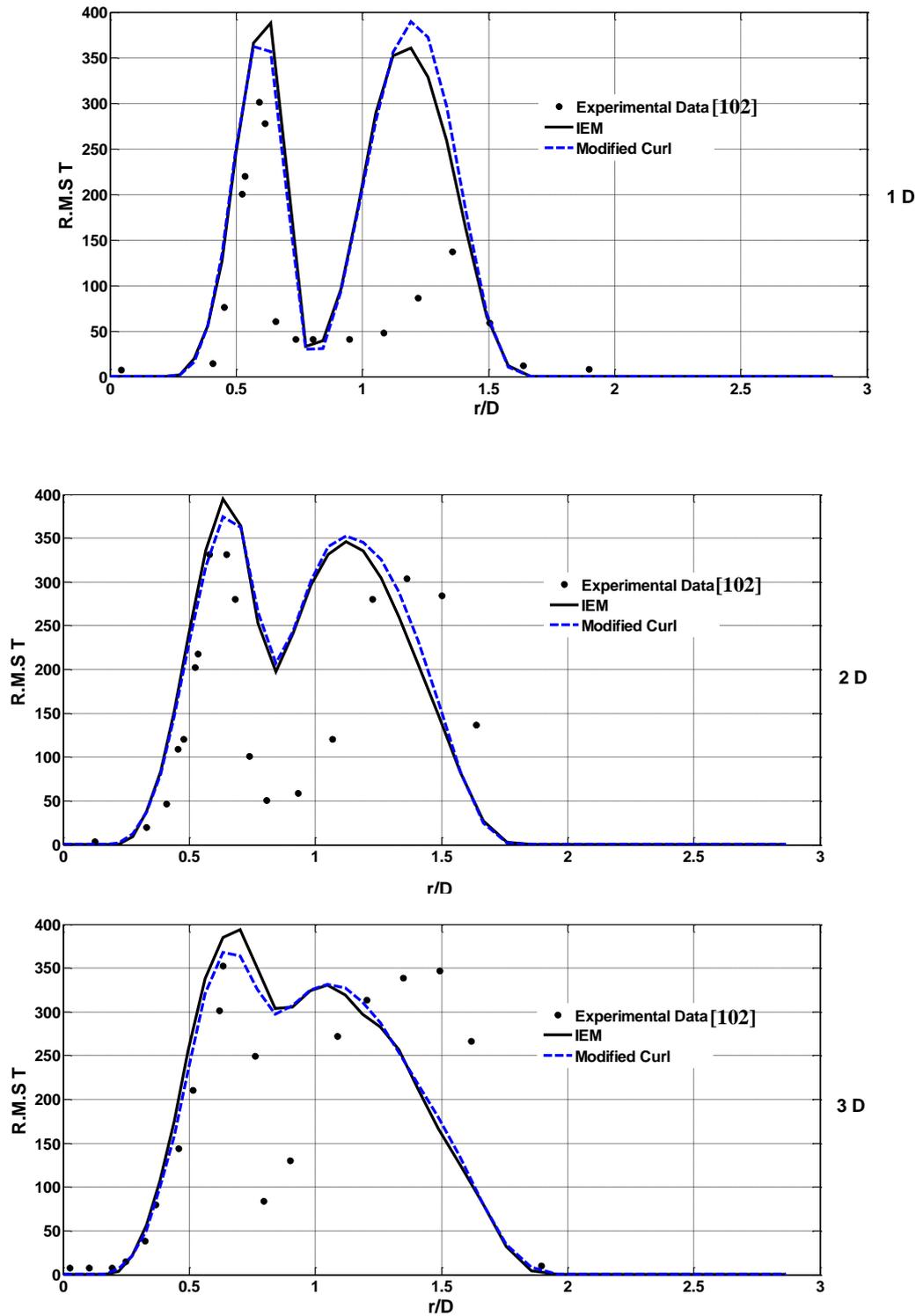


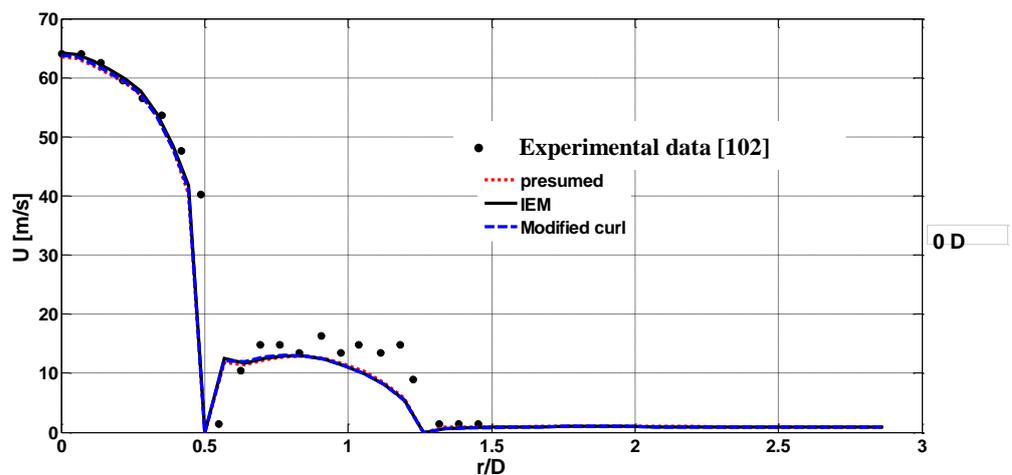
Figure 4.44 : Profils radiaux des fluctuations de la température à différentes stations axiales ($x/d=1$; $x/d=2$; $x/d=3$)

Les figures 4.42, 4.43 et 4.44 montrent que les deux modèles de micro-mélange donnent de bons résultats pour la température moyenne et pour sa variance sur toutes

les stations radiales. Cependant le modèle IEM apporte une meilleure prédiction du CO par rapport au modèle Curl modifié.

Par la suite, la simulation a été effectuée en utilisant le modèle de turbulence adapté $k-\varepsilon$ standard et le modèle IEM de micro-mélange pour déterminer toutes les quantités aérothermochimique, ainsi que la prédiction du monoxyde d'azote (NO). La simulation a duré plusieurs jours sur la même configuration de PC personnel.

Pour les profils de vitesse, un bon accord avec les points de mesures est montré sur la figure 4.45 et 4.46 et ce, quelque soit le modèle de combustion adopté (le champ dynamique n'est pas affecté par la combustion), ce qui explique que dans la configuration étudiée, la diffusion contre-gradient est faible et seule la turbulence affecte le mélange turbulent ainsi la prédiction du champ thermique et la concentration des espèces, d'où une modélisation approprié de celle-ci doit être sélectionnée.



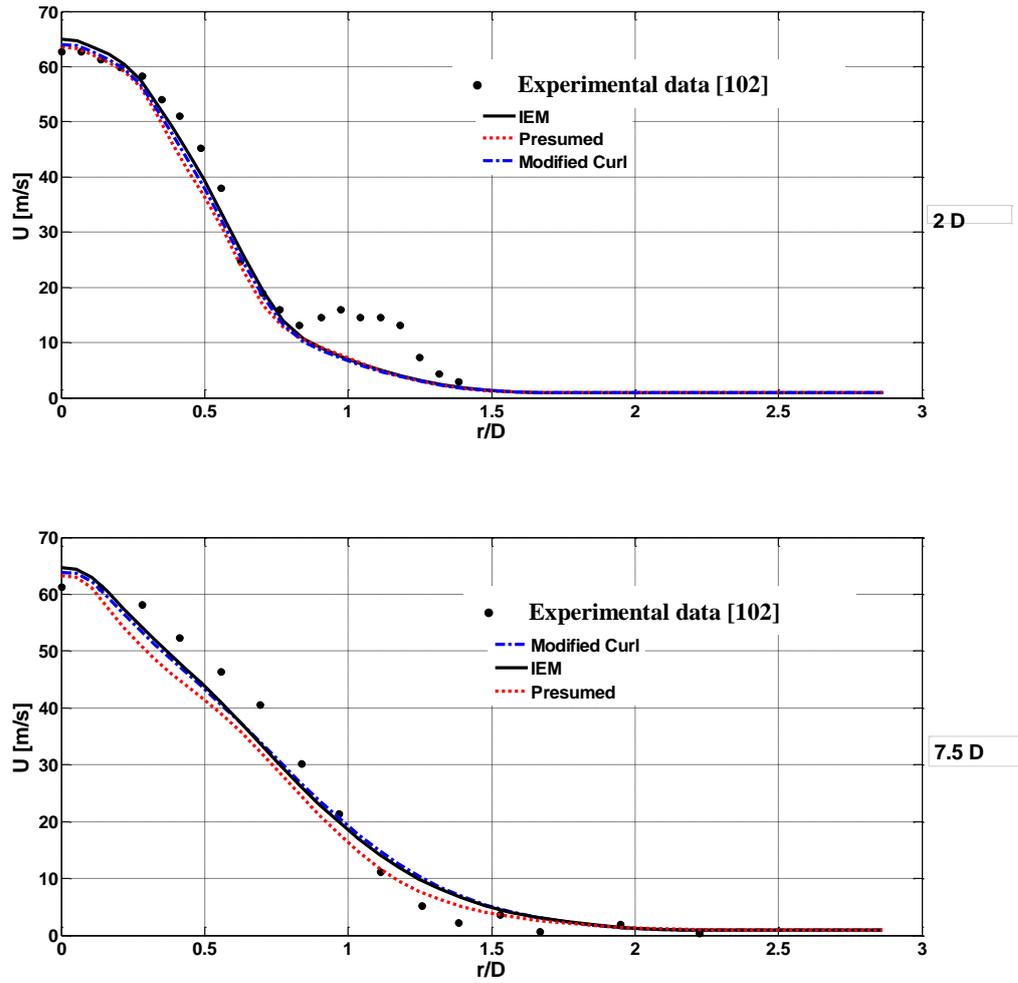


Figure 4.45: Profils radiaux de la vitesse moyenne à différentes stations axiales
($x/d=0$; $x/d=2$; $x/d=7,5$)

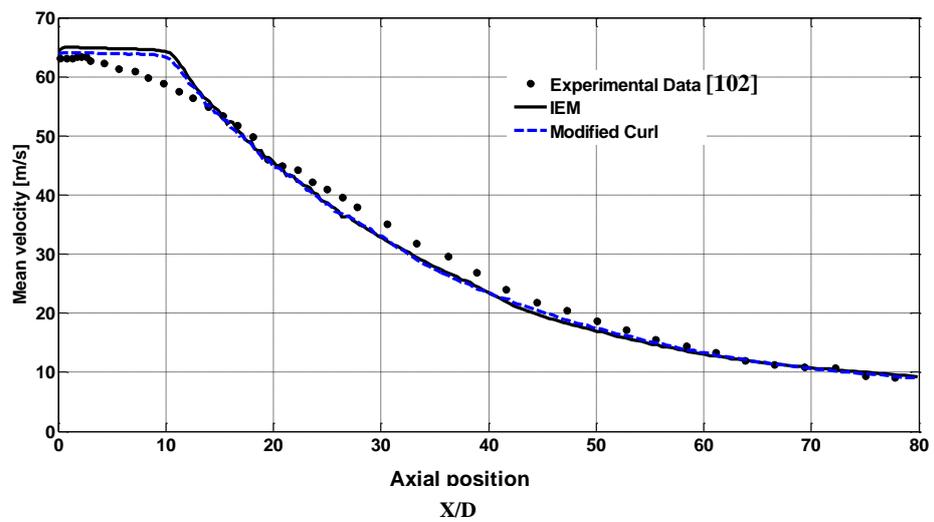
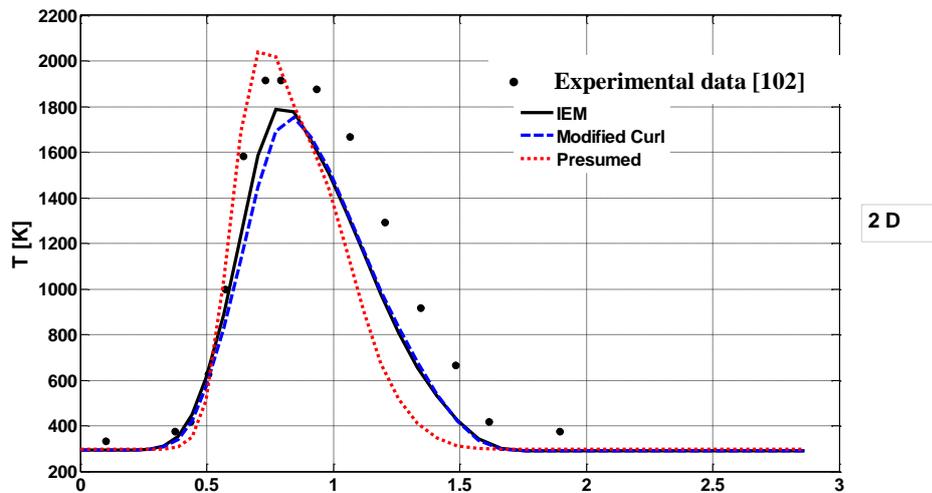
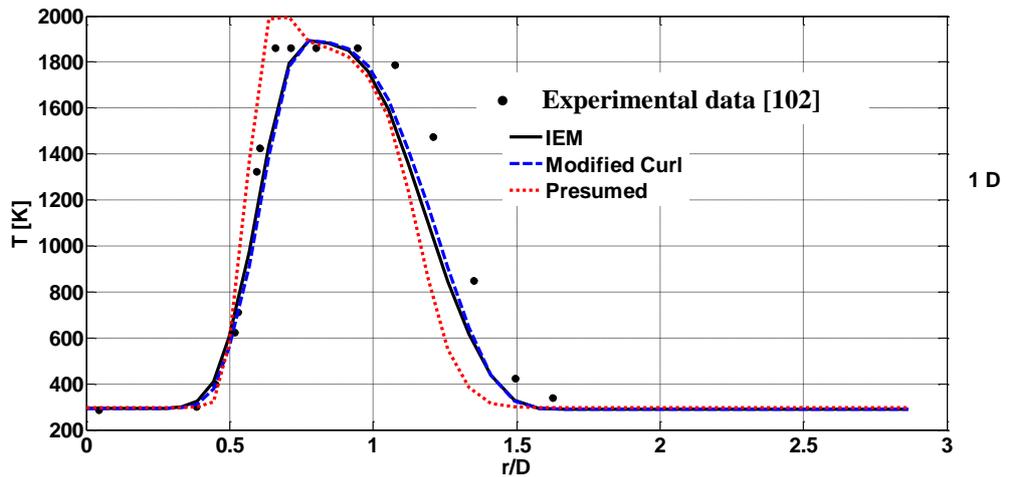
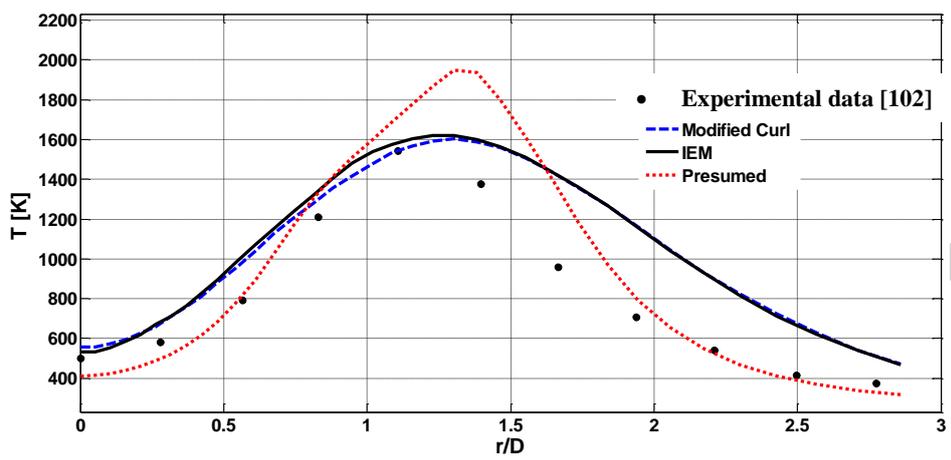
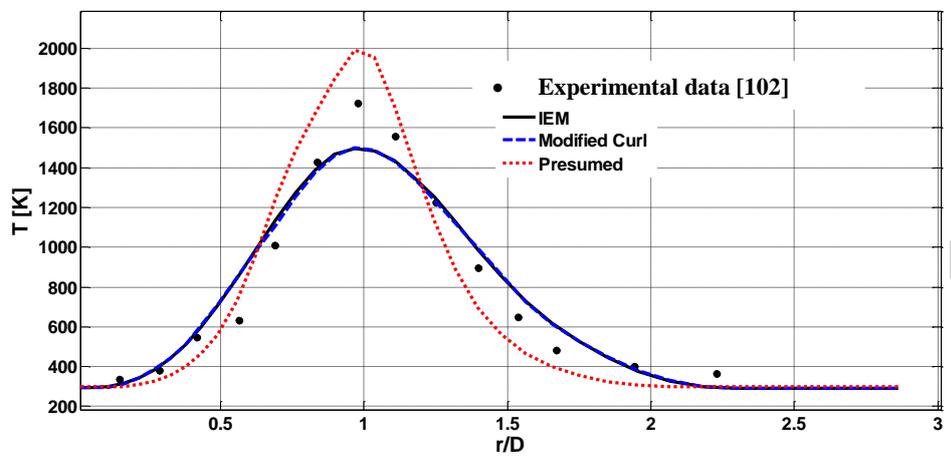
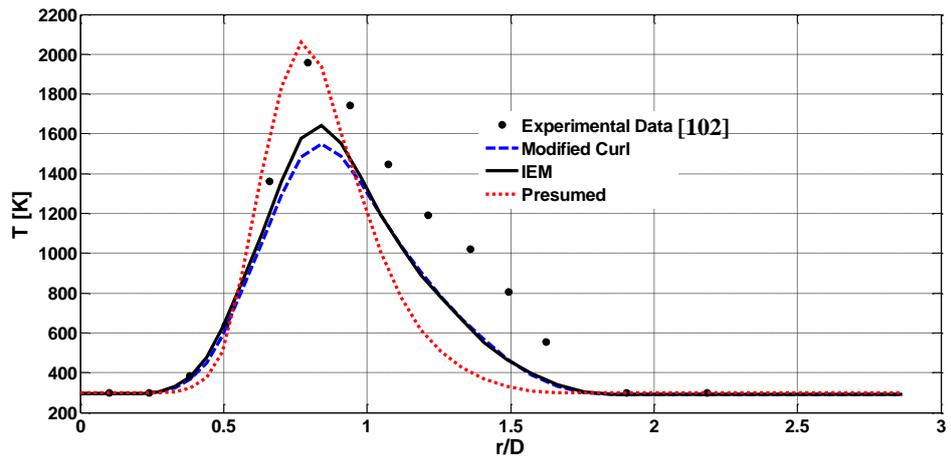
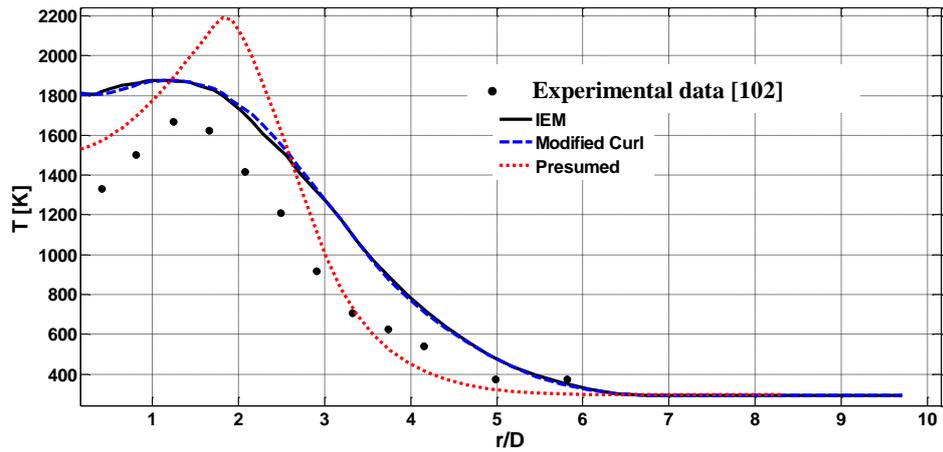


Figure 4.46 : Profil axial de la vitesse moyenne

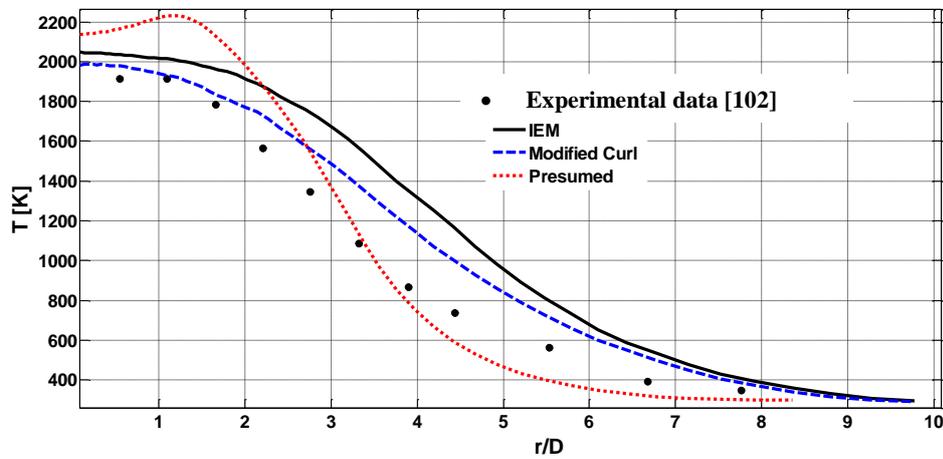
Les profils radiaux de la température (figure 4.47) montrent un bon accord avec les mesures expérimentales par les deux modèles de micro-mélange, avec une sous estimation de 5% aux positions $x/d = 3 \times D$ et $7,5 \times D$, puis une surestimation de 7% après ces positions, cela s'explique par un petit décalage dans la prédiction du cœur de la flamme.







30 D



45 D

Figure 4.47 : Profils radiaux de la température à différentes stations axiales

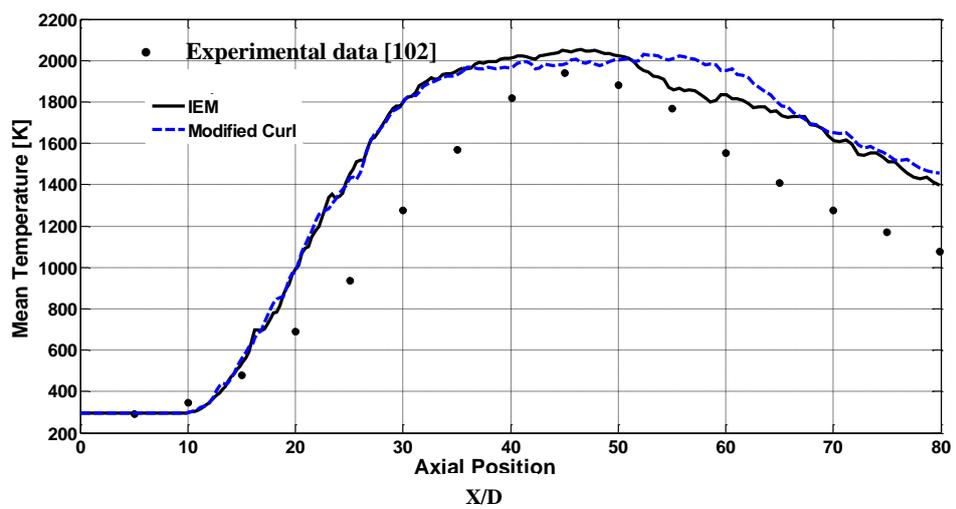


Figure 4.48 : Profil axial de la température statique

Une sous-estimation importante du NO thermique, obtenue par les deux modèles de micro-mélange est montrée dans la figure 4.49 et la figure 4.50, sur toutes les stations radiales et axiale, probablement due à l'instabilité dans les calculs du champ thermique (figure 4.48), engendrée par l'algorithme ISAT, utilisée pour le calcul intégral des taux de réaction chimique, bien que les résultats du modèle à Pdf présumée de type *Beta* donne une surestimation de 50 % à partir de la position $x/d=15$ où se positionne la flamme. Cette surestimation est due au non prise en compte de l'effet du rayonnement sur la flamme.

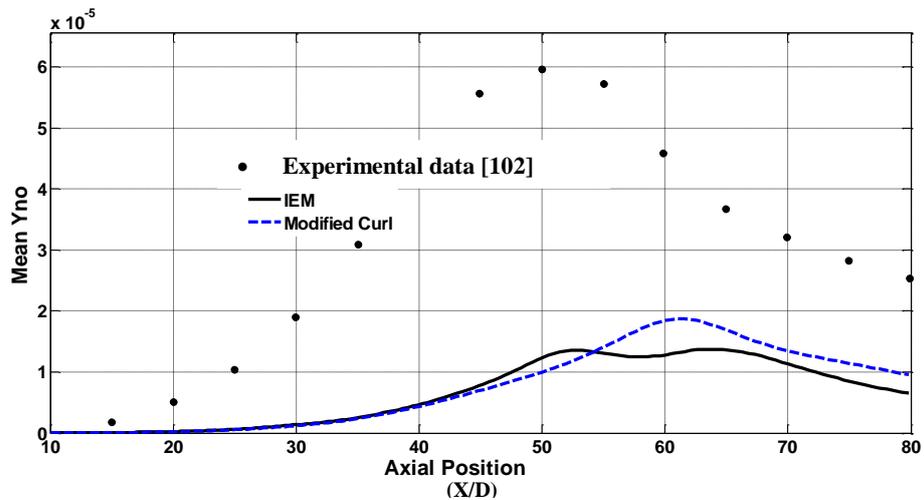
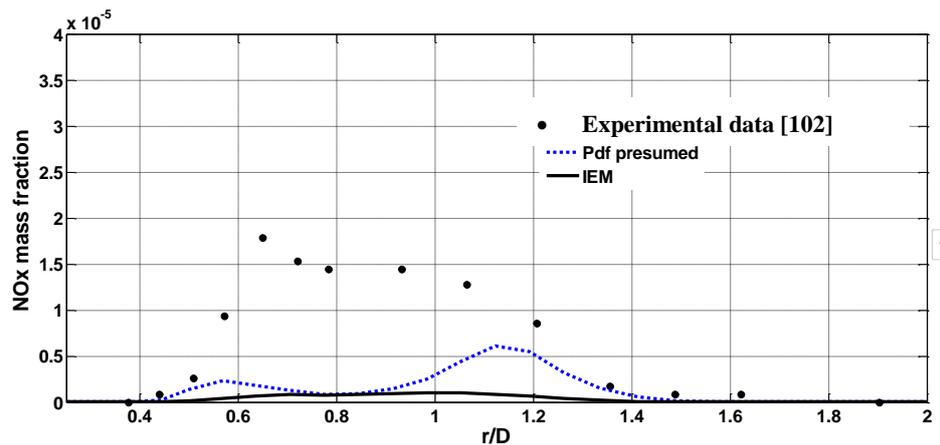


Figure 4.49 : Profil axial de la fraction massique moyen du NO



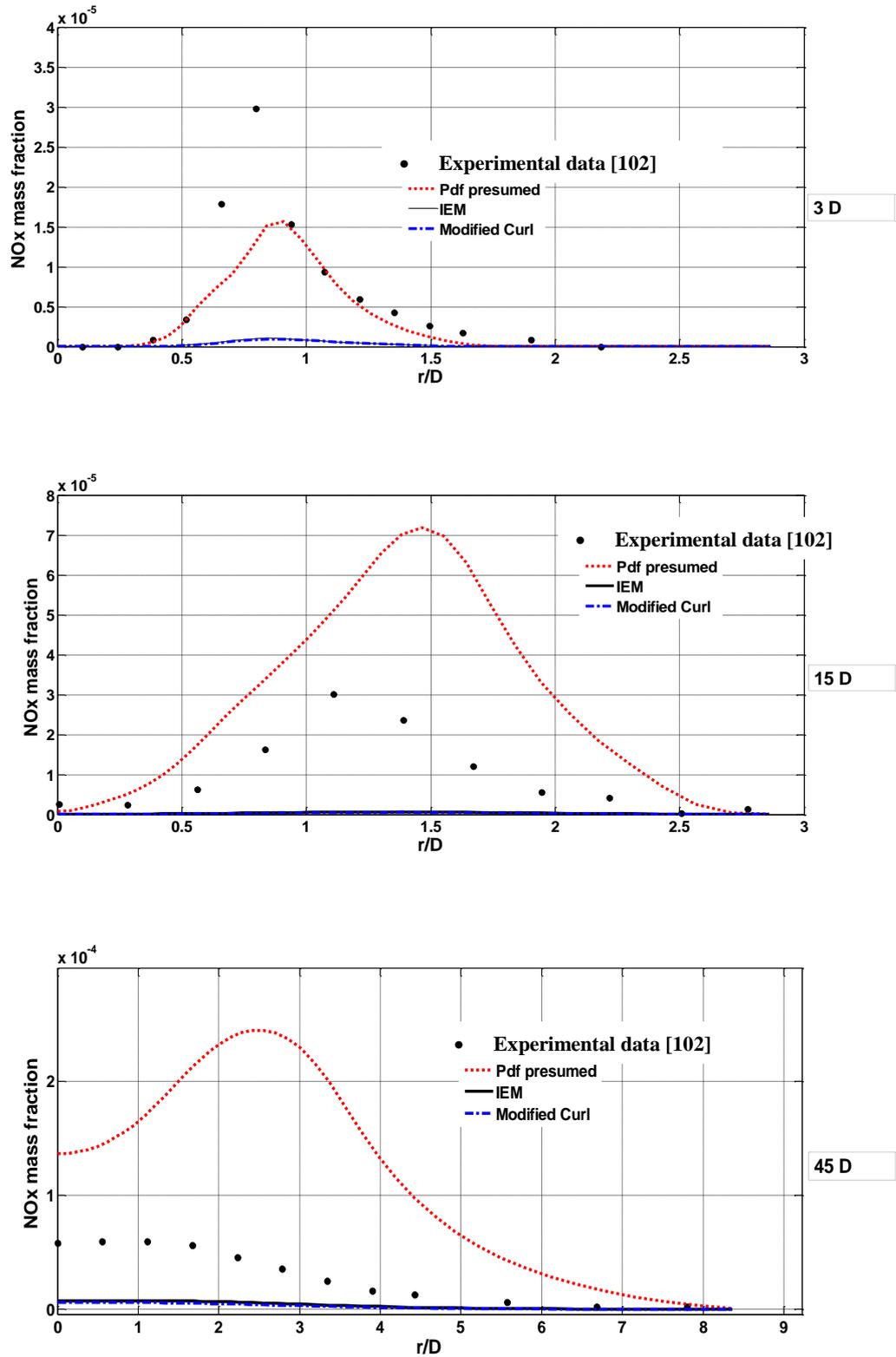


Figure 4.50 : Profils radiaux de la fraction massique du NO

Dans cette partie de travail, la simulation a été effectuée en trois étapes. La première étape consiste à une adaptation du modèle de turbulence $k-\varepsilon$ standard pour capter l'anisotropie locale de la flamme Sandia-D. L'approche apportée base sur la correction dite de Pope qui permette de bien reproduire les mesures expérimentales pour le champ thermique et dynamique, et ce, en adoptant un modèle à pdf présumée de type *Beta* pour l'interaction chimie-turbulence. Par la suite, l'effet du modèle de micro-mélange de la Pdf transportée a été testé d'une part, pour la prédiction du monoxyde de Carbone et le champ thermique, et d'autre par, sur la dynamique de l'écoulement, et ce par deux modèles différentes ; le modèle IEM et Curl modifié. Le modèle IEM apporte de bons résultats par rapport aux modèle Curl modifié en comparaison avec l'expérimental. Le modèle IEM est utilisé pour prédire le monoxyde d'azote dans la troisième et dernière étape de simulation.

Une faible instabilité numérique a été remarquée dans les calculs du champ thermique par le modèle à Pdf transportée et avec les deux modèles de micro-mélange (IEM et Modified Curl). Cette instabilité affecte la prédiction du NO thermique, puisque une sous-estimation importante par rapport aux résultats expérimentaux est notée.

Conclusions et perspectives

L'objectif principale de cette thèse était d'une part, de proposer une technique de dépollution sur une configuration à échelle réelle ; cas du four de l'ECDE, et ce en utilisant un tourbillonnement de l'air primaire, et d'autre part, de tester le pouvoir de deux modèles différentes de combustion turbulente, le modèle LW-P et le modèle de prémélange partiel à Pdf présumée et transportée, à modéliser les mélanges à gradient de richesse variable ou le régime de flammes partiellement prémélangées.

La simulation numérique dans le four a été effectuée par le modèle algébrique d'une chimie infiniment rapide pour l'interaction chimie-turbulence et le modèle $k-\omega$ pour la turbulence. L'étude paramétrique montre que la longueur de flamme visible et la distribution de la température dépendent fortement des caractéristiques de la turbulence et sont assez bien captées. Cependant, la combustion sous les conditions de fonctionnement actuelles du four, présente un niveau élevé d'émissions qui peut être réduit jusqu'à 30% par un tourbillonnement de l'air primaire, sans que l'efficacité de la combustion soit altérée.

Le modèle de combustion turbulente LW-P utilisé dans les simulations présentées dans ce mémoire est basé sur une PDF composée de quatre distributions de Dirac réparties dans l'espace des compositions. Par sa simplicité intrinsèque, ce modèle nous a permis de conduire une analyse détaillée des mécanismes physiques induits par la combustion de prémélange partiel en écoulement turbulent.

Le modèle LW-P a été validé par un calcul de la configuration du brûleur ICARE d'Orléans. Les résultats de la simulation numérique sont en très bon accord avec les observations et les données expérimentales. Le modèle prédit assez fidèlement la taille du cœur potentiel de l'écoulement non réactif ainsi que la hauteur et l'épaisseur apparente de la flamme turbulente en régime de prémélange partiel.

Le modèle de prémélange partiel utilise une Pdf présumée de type beta. Il est souvent utilisé comme étape d'initialisation pour le calcul par les Pdf transportée. Le modèle a été validé sur la configuration de la flamme Sandia-D avec une correction de Pope apportée sur le modèle $k-\varepsilon$ standard pour capter l'anisotropie de la turbulence. Les résultats de la simulation pour le champ dynamique montrent un bon accord avec

les résultats expérimentaux, seulement une surestimation a été observée pour le champ thermique due au non prise en compte de l'effet de rayonnement sur la flamme. Cette surestimation, affecte la prédiction des émissions polluantes de type NO_x, notamment, ces dernières ont une dépendance exponentielle à la température.

Par la suite, le modèle à Pdf transportée est utilisé avec une modélisation appropriée du terme de micro-mélange. Les résultats de la simulation présente un bon accord avec les résultats expérimentaux pour les quantités aerothermochimiques et la concentration du CO, seulement une souestimation importante du NO thermique a été observé probablement due à la faible instabilité numérique dans les calculs menant de l'algorithme ISAT d'intégration du taux de réaction chimique.

Les écoulements étudiés notamment le cas du four de l'ECDE présentent des caractéristiques instationnaires importantes qu'il est aujourd'hui envisageable de prédire par la simulation numérique. Ainsi, la méthode instationnaire de simulation numérique URANS disponible dans le solveur Ansys-Fluent et le *Code-Saturne* pourrait être utilisée avec le modèle LW-P ou le modèle de prémélange partiel pour calculer ce genre d'écoulement. De plus, les modèles présentés ici, notamment ceux concernant les termes de dissipation scalaire, pourraient tout aussi bien être utilisés dans le cadre d'une méthode instationnaire de simulation numérique de type LES, également disponible dans les deux codes. De telles méthodes instationnaires de simulation numérique nécessitent des modélisations précises des échelles non résolues et les modèles actuellement disponibles reposent généralement sur des lois gradients qui ne prennent pas en compte les effets de production de turbulence par la flamme ou ceux de diffusion non-gradient susceptibles d'être rencontrés dans les écoulements réactifs.

Le régime de combustion caractérisant les configurations utilisées pour valider les modèles présentés au cours de cette thèse est toujours très proche du régime des flammelettes. Comme les modèles sont théoriquement applicables à tous les régimes de combustion, il serait intéressant de les valider dans des configurations où le régime de combustion est le régime des flammes plissées-épaissies (tel est le cas de la flamme Sandia-D) voire même le régime des flammes épaissies. Il pourrait alors être envisagé d'améliorer la forme de la PDF en augmentant le nombre de distributions de Dirac réparties dans l'espace des compositions. Une augmentation du nombre de

distributions de Dirac dans l'espace des richesses serait particulièrement utile pour représenter de façon plus réaliste le mélange du combustible et de l'oxydant dans les flammes turbulentes non prémélangées.

En fin, l'hypothèse d'une réaction globale associée à la fraction massique de combustible comme variable d'avancement pour le modèle LW-P ne permette pas de la prédiction de certaines espèces polluantes dont le mélange soit loin de la stœchiométrie. Il faut alors envisager l'utilisation d'un mécanisme cinétique plus détaillé et l'introduction d'une variable d'avancement plus représentative de l'évolution des espèces chimiques dans la flamme.

Bibliographie

- [1] G.D. De Soete, 1997 Kinetics of combustion and combustion related nitrogen chemistry, Cours de DEA, université de Rouen, France.
- [2] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 28 :193–266, 2002.
- [3] V. K. Veera, M. Masood, S. Ruan, N. Swaminathan and H. Kolla, (2012) ” Modelling of Turbulent Premixed and Partially Premixed Combustion”, *Advanced Fluid Dynamics*, ISBN: 978-953-51-0270-0.
- [4] G. Godel, (2010) Modélisation de sous-maille de la combustion turbulente. Développement d’outils pour la prédiction de la pollution dans une chambre aéronautique, thèse de Doctorat des Sciences Appliquées, INSA de ROUEN, France.
- [5] P. Clavin, (2000) Dynamics of combustion fronts in premixed gases: from flames to detonations. *Proc. Combust. Inst.*, 28 :569–585.
- [6] R.W. Bilger, M. B Esler, S. H. Starner, (1991). Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames, *in* M. D. Smooke (ed.), *On reduced mechanisms and for methane-air combustion*, Springer-Verlag, Berlin, Germany.
- [7] S. P. Burke and T. E. Schumann. Diffusion flames. *Ind. And Eng. Chemistry*, 20:998–1004, (1928).
- [8] C. Lacour, 2006 Stabilité de flammes laminaires partiellement prémélangées thèse de Doctorat des Sciences Appliquées, INSA de ROUEN, France.
- [9] Dagaut, Ph., (2004) Formation et Réduction des Polluants en Combustion, Communication présentée lors de l’école de combustion, Oléron, France.
- [10] D.J. Hautman, F.L. Dryer, K.P. Schug, I. Glassman, (1981) *Combustion Sciences and Technologies*, pp.25- 219.
- [11] R.B. Edelman, O.F. Fortune, (1969) A.I.A.A., Paper 69-86.
- [12] Edelman,R.B., Harsha, P.T., (1978) *Progr. En. Comb. Sci.*, 4, 1.
- [13] J. Duterque, R. Borghi, H. Tichtinsky, (1981) *Combustion Science and Technology*, 26,1.
- [14] Warnatz, J., Maas, U., and Dibble, R. W. (1996). *Combustion*, Springer-Verlag, Berlin,Heidelberg.
- [15] Service de l’observation et des statistique, Chiffres clés du climat France et Monde (2015), www.statistiques.developpement-durable.gouv.fr.
- [16] M. Zheng, G.T. Reader, J.G. Hawley, (2004) Diesel engine exhaust gas recirculation – A review on advanced and novel concepts, *Energy Conversion and Management*, Vol.45, pp. 883-990.
- [17] CEMBUREAU, Association Européenne du Ciment, (1999) Le changement climatique, publication par CEMBUREAU, N° Editeur: D/1998/5457, Bruxelles.
- [18] L. Gasnot, A. Elbakali, J.F. Pauwels, « Réduction des oxydes d’azote », Communication présentée lors des journées GFC-GDR , Mai (2005), Rouen

(CORIA),France.

- [19] C.E. Baukal, (2003) « Industrial Burners », Handbook, CRC Press LLC, ISBN 0-8493-1386-4.
- [20] V. Faivre, « Etude expérimentale et numérique du control actif de jets dans des chambres de combustion », Thèse de Doctorat en Dynamique des fluides, L'Institut National Polytechnique de Toulouse, Décembre (2003), Toulouse, France.
- [21] A. Mokhtardidouche, A. Benarous, L. Loukarfi, H. Naji, Numerical prediction of NOx emissions in a full-scale furnace, ISSN 1392 - 1207. MECHANIKA. (2014).
- [22] R. S. Barlow, J. H. Frank, A. N. Karpetis, and J.Y. Chen, (2005) “ Piloted Methane/Air Jet Flames: Scalar Structure and Transport Effects”, Combustion and Flame 143:433-449.
- [23] T. Lachaux, (2004) Etude des effets de la haute pression sur la structure et la dynamique des flammes turbulentes de prémélange pauvre de méthane-air, thèse de Doctorat des Sciences Appliquées, université d'Orléans, France.
- [24] A. Mokhtar didouche, (2008) « Prédiction des émissions polluantes issues d'un four industriel : Cas de la cimenterie de Chlef », Mémoire de Magister, Département de Génie mécanique, UHB, Chlef, Algérie.
- [25] A. Mokhtar didouche, A. Benarous, L. Loukarfi, « Quantification des émissions polluantes dans un four de cimenterie», 7^{ème} Journée de Mécanique, Avril (2010), Ecole Militaire Polytechnique, Bordj Elbahri, Algérie
- [26] G. Albouze, (2009) Simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs non prémélangés, thèse de Doctorat, Université de Toulouse, France.
- [27] T. Poinso, and D. Veynante, Theoretical and Numerical Combustion. R.T. Edwards, 2nd edition, (2005).
- [28] D. Veynante, L. Vervisch, Turbulent combustion modeling. Prog. Energy Comb. Sci. 28 (2002), 193 – 266.
- [29] N. Peters, Turbulent combustion. Cambridge University Press, (2001).
- [30] T. Poinso, A. Trouvé and S. Candel, (1996) Applications of direct numerical simulations of premixed turbulent combustion. Prog. Energy Comb. Sci. 21 :531, 576.
- [31] L. Vervisch, and T. Poinso, Direct numerical simulation of non premixed turbulent flames. Ann. Rev. Fluid Mech. 30 (1998), 655–692.
- [32] T. Poinso, Using direct numerical simulation to understand turbulent premixed combustion (plenary lecture). Proc. Combust. Inst. 26 (1996), 219–232.
- [33] M. Lesieur and O. Metais, New trends in large-eddy simulations of turbulence. Ann. Rev. Fluid Mech. 28 (1996), 45 – 82.
- [34] C. Meneveau and J. Katz, Scale-invariance and turbulence models for large eddy simulation. Ann. Rev. Fluid Mech. 32 (2000), 1–32.
- [35] U. Piomelli and J. R. Chasnov, Large eddy simulations : theory and applications. In Turbulence and Transition Modelling, H. Hallback, D.

Henningson, A. Johansson, and P. Alfredsson, Eds. Kluwer Academic Publishers, (1996), pp. 269 – 336.

- [36] G. Boudier, L. Y. M. Gicquel, T. Poinso, D. Bissières and C. Bérat, Comparison of LES, RANS and experiments in an aeronautical gas turbine combustion chamber. Proc. Combust. Inst. 31 (2007), 3075–3082.
- [37] A. Giauque, L. Selle, T. Poinso, H. Buechner, P. Kaufman and W. Krebs, System identification of a large-scale swirled partially premixed combustor using LES and measurements. J. Turb. 6, 21 (2005), 1–20.
- [38] L. Selle, G. Lartigue, T. Poinso, R. Koch, K.U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufman, and D. Veynante, Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. Combust. Flame 137, 4 (2004), 489–505.
- [39] V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, and T. Poinso, Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. J. Comput. Phys. 202, 2 (2005), 710–736.
- [40] P. Schmitt, T. Poinso, B. Schuermans and K. Geigle, Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high pressure burner. J. Fluid Mech. 570 (2007), 17–46.
- [41] R. Borghi, (2003) la combustion turbulente, Technique de l'ingénieur, Section Mécanique, Vol.B8, pp.325.
- [42] J. O. Hinze, (1975) Turbulence, McGraw-Hill Publishing Co., New York.
- [43] B. Pesenti, (2006) caractérisation numérique et expérimentale d'un brûleur à gaz à swirl variable, these de Doctorat en sciences appliquées, Polytech, MONS, Bruxelles, Belgique.
- [44] B. E. Launder, D. B. Spalding, (1972) Lectures in Mathematical Models of Turbulence. Academic Press, London, England.
- [45] A. Benarous, A. Liazid, D. Karmed, (2007) H₂/O₂ Combustion under supercritical conditions, In proceeding of the third European combustion meeting, Crete, Greece.
- [46] S.B. Pope, (1978) An explanation of the turbulent round-jet / plane-jet anomaly, AIAA Journal, Vol.16, No.3, pp. 279-281.
- [47] T.H. Shih, W. W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang, and J. Zhu. "A New $k-\epsilon$ Eddy-Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows $k-\epsilon$ Model Development and Validation". Computers Fluids. 24(3). 227–238. (1995).
- [48] Fluent Inc, Fluent 14.0 User's Guide, Chapter 12, (2011) Modeling turbulence, Lebanon, New Hampshire, USA.
- [49] D. C. Wilcox, (2006) Turbulence Modeling for CFD, DCW Industries, Inc., La Canada, California.
- [50] G. Damköhler (1940), "Influence of turbulence on flame velocity in gaseous mixtures" ZH Electrochem., 46 :601.
- [51] R. Borghi (1985), "On the structure and morphology of turbulent premixed

flames”, *Recent Advances in Aerospace Sci.*, C. Casci, Ed., Plenum Publishing Corporation.

- [52] N. Peters (1986), “Laminar flamelet concepts in turbulent combustion”, *21st Symp. (Int.) on Combust.*, 1231-1250, The Combustion Institute, Pittsburgh.
- [53] A. Trouvé, Simulation of flame-turbulence interactions in premixed combustion. In Annual Research Briefs. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., (1991), pp. 273–286.
- [54] A. Trouvé and T. Poinso, The evolution equation for the flame surface density. *J. Fluid Mech.* 278 (1994), 1–31.
- [55] V. Zimont (1979), “Theory of turbulent combustion of a homogeneous mixture at high Reynolds numbers”, *Fiz Goreniya Vzryva*, 15(3):23 :32.
- [56] F.A. Williams (1976), “Criteria for existence of wrinkled laminar flame structure of turbulent premixed flames”, *Combust. Flame*, 26:269-270.
- [57] A.M. Klimov (1963), *Zhur. Prikl. Mekh. i Tekhn. Fiz.* 3:49-58.
- [58] K.N.C. Bray, R.S. Cant (1991), “Some applications of Kolmogorov’s turbulence research in the field of combustion”, *Proc. R. Soc.*, A434 :217-240.
- [59] F. Dinkelacker (2003), “Experimental validation for flame regimes for highly turbulent premixed flames”, *Proc. Europ. Comb. Meeting*.
- [60] K. Truffin and T. Poinso, Comparison and extension of methods for acoustic identification of burners. *Combust. Flame* 142, 4 (2005), 388–400.
- [61] B. Cuenot, (2002) Introduction à la modélisation de la combustion turbulente, polycopié de cours, CERFACS, Toulouse, France.
- [62] R. Cao and S. B. Pope. "Numerical Integration of Stochastic Differential Equations: Weak Second-Order Mid-Point Scheme for Application in the Composition PDF Method". *Journal of Computational Physics*. 185(1). 194–212. (2003).
- [63] D.B. Spalding (1971), “Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames”, *13th Symp. (Int.) on Combust.*, 649-657, The Combustion Institute, Pittsburgh.
- [64] J.B. Moss, K.N.C. Bray (1977), “A unified statistical model of the premixed turbulent flames”, *Acta Astronautica*, 4 :291-319.
- [65] K.N.C Bray (1995), “Turbulent Reactive Flows”, *2e ed. (P.A. Libby et F.A. Williams, Eds) Academic Press*.
- [66] R. Vincent, (2007) Contribution à la Modélisation des Ecoulements Turbulents Réactifs Partiellement Prémélangés, thèse de Doctorat, Université de Poitier, France.
- [67] B. F. Magnussen, B. H. Hjertager, (1976) On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion, In 16th Symp. on Combustion, The Combustion Institute.
- [68] Ansys-Fluent V14.0, (2011) The software Package, Fluent Inc, New Hampshire, USA.

- [69] Fluent Inc, Fluent 14.0 User's Guide, Chapter 12, (2011) Modeling Species Transport and Finite-Rate Chemistry, Lebanon, New Hampshire, USA.
- [70] M. Nial, (2007) Caractérisation des paramètres de stabilisation d'une flamme de brûleur industriel : applications aux fours de cimenteries, Mémoire de magister, Département de Mécanique, UHB, Chlef, Algérie.
- [71] P. A. Nooren, H. A. Wouters, T. W. J. Peeters, D. Roekaerts, U. Maas, and D. Schmidt. "Monte carlo pdf modeling of a turbulent natural-gas diffusion flame". *Combustion Theory and Modeling*. 1. 79–96. (1997).
- [72] J. Janicka, W. Kolbe, and W. Kollmann. "Closure of the transport equation for the pdf of turbulent scalar fields". *Journal Non-Equilibrium Thermodynamics*. 4. 47. (1978).
- [73] S.K. Liew, K.N.C. Bray, et J.B. Moss, ("A flamelet model of turbulent non premixed combustion". *Comb. Sci. Techno. (GB)*, 27, p. 69-73 (1981).
- [74] F.E. Marble and J.E Broadwell, "The coherent flame model for turbulent chemical reactions". Project Squid. TRW Systems Group, (1977).
- [75] S. Candel, D. Veynante, F. Lacas, E. Maistret, N. Darabiha et T. Poinsot, Coherent flame model: applications and recent extensions. In: *Advances in combustion modeling. Series on advances in mathematics for applied sciences*, p. 19-64, World Scientific, Singapore (1990).
- [76] C. Dopazo and E. E. O'Brien. "Functional Formulation of Non isothermal Turbulent Reactive Flows". *Phys. Fluids*. 17. 1968. (1975).
- [77] P.A. Libby, F.A. Williams (2000), "Presumed PDF analysis of partially premixed turbulent combustion", *Combust. Sci. Technol.*, 161:351-390.
- [78] G. Ribert, M. Champion, O. Gicquel, N. Darabiha, D. Veynante (2005), "Modeling nonadiabatic turbulent premixed reactive flows including tabulated chemistry", *Combust. Flame*, 141:271-280.
- [79] V. Robin, A. Mura, M. Champion, P. Plion (2006), "A multi Dirac presumed PDF model for turbulent reactive flows with variable equivalence ratio", *Combust. Sci. Technol.*, 118(10-11) 1843-1870.
- [80] V. Robin, A. Mura, M. Champion, O. Degardin, B. Renou, M. Boukhalfa (2006), "Experimental and numerical investigation of a turbulent partially premixed V-shaped flame", *11th Int. Confer. on Num. Combust.*, Grenade, Espagne.
- [81] E. Fernandez-Tarrazo, A. L. Sanchez, A. Linan, F.A. Williams (2006), "A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion", *Combust Flame*, 147 :32-38.
- [82] V. Robin, A. Mura, M. Champion (2007), "A second-order model for turbulent reactive flows with variable equivalence ratio", *21th ICDERS*, Poitiers, France, *Combust Sci. Technol.*
- [83] M. Champion, P.A. Libby (2003), "The influence of a thermally active wall on premixed turbulent combustion", *Combust. Sci. and Technol.*, 175:2015-2060.
- [84] K.N.C. Bray, M. Champion, P.A. Libby, N. Swaminathan (2006), "Finite rate chemistry and presumed PDF models for premixed turbulent combustion",

Combust. Flame, 146 :665-673.

- [85] A. Mura, R. Borghi, Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion, *Combust. Flame.*, 133 (2003): 193-205.
- [86] D.B. Spalding, Mixing and chemical reaction in confined turbulent flames, *Chem. Eng. Sci.*, 26 (1971): 95-107.
- [87] V. Robin, N. Guilbert, A. Mura, M. Champion, Turbulent combustion modeling of mixtures with inhomogeneous equivalence ratio: Application to a flame stabilized by the sudden expansion of a 2-D channel. *C. R. Mecanique.*, 338 40-47, (2010).
- [88] A. Mura, V. Robin, M. Champion, Modeling of scalar dissipation in partially premixed turbulent flames. *Combust. Flame*, 149 (2007) 217–224.
- [89] Contrôle du four et enregistrement des résultats, (1982) Rapport technique, Kawasaki heavy industries, Kobe, Japan.
- [90] M. Nial, L. Loukarfi, A. Benarous, “Impact d’une flamme de brûleur industriel coaxial dans une enceinte confinée : Application aux fours de cimenterie“, Congrès Français de Mécanique (CFM), 24-28 aout (2009), Marseille, France.
- [91] J. Taine, A. Soufiani, (1999) «Micro scale aspect of thermal radiation transport and laser application», *Advances in heat transfer*, 33, 295-414.
- [92] F.A. Williams, (1985) *Combustion theory*, Addison-Wesley Press, London, UK.
- [93] A.N. Lipatnikov, J. Chomiak (2002) “Turbulent flame speed and thickness: Phenomenology, evaluation, and application in multi-dimensional simulation”, *Progress in Energy and Combustion Science*, 28:1-74.
- [94] D. Pavé (2002), “Contribution à l’étude de la structure des flammes turbulentes de prémélanges pauvres de méthane-air”, Thèse de Doctorat de l’Université d’Orléans, Orléans, France.
- [95] G. Ribert, M. Champion, P. Plion (2004), “Modelling turbulent reactive flows with variable equivalence ratio: application to the calculation of a reactive shear layer”, *Combust. Sci. Technol.*, 176:907-923.
- [96] A. Benarous, A. Liazid, A. Mokhtardidouche et D. Karmed, (2010), “Analyse et simulation d’un écoulement réactif par le modèle LW-P“, 10ème Séminaire International sur la Physique Energétique, Bechar, Algérie.
- [97] C. Geuzaine and J.-F. Remacle. *Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities*. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 79(11), pp. 1309-1331, (2009).
- [98] F. Archambeau, N. Nehitoua, M. Sakiz (2004), “Code saturne : A finite volume code for turbulent flows”, *Int. J. Finite Volumes*, vol 1 télécharger Code saturne: <http://rd.edf.com/72494i/Accueil-fr/Recherche-et-Developpement/Pour-lacommunaute-scientifique/Telechargements/Code-Saturne.html>.
- [99] A. Benarous, D. Karmed, A. Liazid, M. Champion, “ Numerical simulation of a turbulent partially premixed flame with inhomogeneous equivalence ration”,

Fuel 124(2014) 57-65.

- [100] I.G. Shepherd, “flame surface density and burning rate in premixed turbulent flames“. In: 26th symposium (International) on combustion; the combustion institute, (1996).p. 373-79.
- [101] K. Safer, (2002) « Simulation d’écoulement turbulents réactifs (méthode combinée équation de transport et PDF) », Mémoire de Magister, Département de Génie mécanique, USTO, Oran, Algérie.
- [102] R. Barlow and J. Frank, (2007) Piloted CH₄/Air Flames C, D, E, and F – Release 2.1, Sandia National Laboratories Livermore, CA 94551-0969.
- [103] R. W. Bilger, M. B. Esler, and S. H. Starner. "On Reduced Mechanisms for Methane-Air Combustion". Lecture Notes in Physics. Springer-Verlag. 384. page 86. (1991).
- [104] Ch. Schneider, A. Dreizler, and J. Janicka, “Flow Field Measurements of Stable and Locally Extinguishing Hydrocarbon-Fueled Jet Flames,”.
- [105] F. Pecquery, (2013) Développement d’un modèle numérique de prédiction des émissions d’oxydes d’azote pour la simulation aux grandes échelles de chambres de combustion aéronautiques, thèse de Doctorat des Sciences Appliquées, INSA de ROUEN-Coria, France.
- [106] A. Mokhtardidouche, A. Benarous et L. Loukarfi, (2016), “Analyse d’une Flamme Partiellement Prémélangée de type Méthane-Air“, Actes des 10^{ème} Journées de Mécanique de l’Ecole Militaire Polytechnique, Bordj El Bahri, Alger, Algérie, (soumis).
- [107] C. Pfeiler, H. Raupenstrauch, (2010) “Application of Different Turbulence Models to Study the Effect of Local Anisotropy for a Non-Premixed Piloted Methane Flame”, 20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE20.
- [108] V. Zimont, W. Polifke, M. Bettelini, and W. Weisenstein, (1998) « An Efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure », J. of Gas Turbines Power. 120. 526–532.