

République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieure et de la
Recherche Scientifique



Université Echahid Hamma Lakhdar d'El-Oued

FACULTE DE TECHNOLOGIE

DEPARTEMENT DE GENIE MECANIQUE

Mémoire de fin d'étude

Présenté pour l'obtention du diplôme de

MASTER ACADEMIQUE

Domaine : Sciences et Technologies

Filière : Génie mécanique

Spécialité : Energétique et Énergies renouvelables

Thème

Investigations Numériques de la combustion (CH_4 - C_3H_8)/Air:

Étude thermochimique

Devant le jury composé de :

Présenté par :

Ridha MENECEUR

MAA Président

- DOU Seif Eddine

Ali BOUKHARI

MCB Examineur

- AD Djamel

Fethi LETAIM

MAA Examineur

Mohammed El Hadi ATTIA

MCB Encadreur

2016-2017

Remerciement

Le plus grand Merci tout d'abord revient à «Dieu» qui, lui seul, nous a guidé dans le bon sens durant notre vie et qui nous a donné le courage la volonté, et la force pour élaborer ce travail de recherche

Voici venu le temps de mettre un point final à ce manuscrit et à cette année de travaux de recherche effectués au sein de l'université Hamma Lakhdar d'El Oued, sous la direction de Mr. Attia mohamed elhadi, pour la confiance dont il a toujours fait preuve à mon égard et pour ses perpétuels encouragements.

Nous tenons à remercier également les membres de jury d'avoir bien accepté d'examiner notre travail.

Enfin, dans cette dernière ligne, nous aimerions remercier nos parents, sœurs et frères pour les conseils et les encouragements qu'ils m'ont toujours accordés et leur soutien moral et financier. Sans elle, nous ne serons pas là où nous sommes et ce que nous sommes

Merci encore à tous....

Dédicace

Nous dédie ce travail :

A nos chers parents que dieu les garde

A nos chers frères et sœurs

A toute nos amis.

A tous ceux qui sèment le bonheur sur mon chemin.

A toutes les enseignantes et tous les enseignants chacun son nom.

A tous ceux que Nous aimons.

Table des matières

Remerciement	i
Dédicace	ii
Liste des figures	vi
Liste des tableaux	vii
Nomenclature	viii

Introduction et étude bibliographiques

1. Motivation	1
2. Étude bibliographique	2
3. Objectifs de la thèse	5
4. Contenu du mémoire	6

Chapitre I: Equations de Conservation pour les Fluides Réactifs

I.1 Variables de la thermochimie	8
I.2 Equations de conservation de masse et d'espèces	10
I.3 Equations de la quantité de mouvement.....	11
I.4 Equations de la conservation d'énergie.....	11
I.5 Cinétique chimique.....	12
I.6 Facteurs stœchiométriques.....	13
Conclusion.....	14

Chapitre II : Les Modèles de la Turbulence « LES et PDF»

II.1 Modes de combustion élémentaires.....	16
--	----

II.2 Applications industrielles de la combustion turbulente.....	17
II.3 La simulation numérique de la combustion turbulente.....	18
II.4 Description statistique sur l'écoulement turbulent.....	19
II.4.1 Nombre de Reynolds élevé	19
II.4.2 La valeur moyenne de Reynolds.....	19
II.4.3 Équations de Navier- Stokes compressibles.....	20
II.4.4 la théorie de la turbulence de Kolmogorov.....	22
II.5 Modèle dynamique de turbulent	24
II.5.1 Généralité sur le modèle la simulation aux grandes échelles LES.....	24
II.5.2 Les équations de LES	26
II.5.3 Modèles de sous-maille.....	27
II.5.4 Le modèle WALE.....	28
II.6 Les modèles de simulation de la combustion non prémélange.....	30
II.6.1 Le modèle à PDF.....	30
II.6.1.1 La Fraction de mélange.....	30
II.6.1.2 La variable d'avancement.....	32
II.7 Généralité du modèle PDF.....	34
II.8 Types de l'approche PDF.....	37
II.8.1 Le modèle à PDF transporté.....	37
Conclusion.....	38

Chapitre III : Résultats et Discussion

III.1 La configuration expérimentale et domaine d'application.....	42
III.1.1 La configuration expérimentale	43

III.1.2 les équations.....	43
III.2 Résultats et discussion.....	44
III.2.1 Validation des modèles numériques.....	45
III.2.1.1 Vitesse Axial	45
III.2.1.2 Température	46
III.2.1.3 Fraction massique du monoxyde de carbone CO.....	47
III.2.2 Comparaison de CH ₄ & C ₃ H ₈	48
III.2.2.1 Vitesse Axial.....	48
III.2.2.2 Température	49
III.2.3.3 Fraction massique du monoxyde de carbone CO.....	50
Conclusion.....	51
Conclusion Générale	52
Références	53

Liste des figures

Figure II.1	Comparaison entre simulation numérique directe (DNS), résolution..... des équations moyennées (RANS) et simulations aux grandes échelles (LES)	18
Figure II.2	Illustration des paramètres d'écoulement de la turbulente.....	20
Figure II.3	le spectre d'énergie d'une Turbulence Homogène Isotrope : concept LES.....	24
Figure II.4	Exemple de l'injection non-prémélangée.....	31
Figure II.5	Définition de la variable d'avancement.....	33
Figure III.1	Schéma du brûleur	42
Figure III.2	Profils radiaux de la vitesse axiale moyenne.....	45
Figure III.3	Profils radiaux de température moyenne.....	46
Figure III.4	Profils radiaux du monoxyde de carbone	47
Figure III.5	Comparaison des Vitesse entre propane et méthane	49
Figure III.6	Comparaison des température entre propane et méthane	50
Figure III.7	Comparaison fraction massique du CO entre le propane et méthane	51

Liste des tableaux

Tableau. II.1	Résumé des avantages et inconvénients principaux.....	17
	des trois modes de combustions présentés	

Nomenclature

Lettres latines

<i>S</i>	terme de Source
<i>F</i>	le flux descriptif des variables Conservatives
<i>Q</i>	variables Conservatives
<i>A</i>	Tenseur de la déformation
<i>C</i>	Chaleur spécifique
<i>c</i>	Paramètre d'avancement
<i>C_S</i>	Constant de Smagorinsky
<i>C_W</i>	Constant WALE
<i>D</i>	Coefficient de diffusion
<i>E</i>	Spectre d'énergie
<i>e</i>	Energie interne
<i>J</i>	Flux diffusif
<i>h</i>	Enthalpie
<i>h_i</i>	Enthalpie de l'espèce <i>i</i>
<i>k</i>	Energie cinétique
<i>L</i>	Grande échelle de l'écoulement de Kolmogorov
<i>p</i>	Pression
<i>Pr</i>	Nombre de Prandtl
<i>N</i>	Nombre des espèces chimiques
<i>M</i>	Masse molaire des espèces chimique
<i>q</i>	Flux de chaleur du à la diffusion
<i>R</i>	Constante de gaz parfait
<i>Re</i>	Nombre de Reynolds
<i>s</i>	Terme source
<i>Sc</i>	Nombre de Schmidt
<i>t</i>	Temps
<i>T</i>	Température
<i>u</i>	Vitesse

V_i	Vitesse de diffusion de l'espèce i
y_i	Fraction massique de l'espèce i
Z	Fraction de mélange

Lettres grecques

ε	Taux de dissipation
ρ	Masse volumique
λ	Conductivité thermique
κ	Diffusivité thermique
σ	Tenseur de contrainte
μ	Viscosité dynamique
ν	Viscosité cinématique
μ_T	Viscosité turbulente
η	Petite échelle de l'écoulement de Kolmogorov
ω_i	Terme source chimique de l'espèce i
τ_{ij}	Contrainte visqueuse
Φ	Richesse d'un écoulement d'alimentation
γ	Température ambiante
σ^2	la variance de la distribution
\tilde{g}_{ij}^2	gradient de vitesse résolu
δ_{ij}	delta Kronecker
\tilde{S}_{ij}	la vitesse de déformation de Tensor
T_{ij}	Tenseur de Reynolds

Indice

f	Espèces chimique
i	Composantes selon les axes x , y et z

<i>les</i>	Termes de sous maille
<i>P</i>	A pression constant
<i>v</i>	A volume constant
<i>V</i>	Termes visqueux et modèles de transport
<i>r</i>	coordonnées radiales
<i>x</i>	coordonnées spatiales

Abréviations

CFD	Computational Fluid Dynamics
DNS	Direct Numérique Simulation
LES	Large eddy simulation
PDF	Probability Density Function
RANS	Reynolds Averaged Nervier Stokes
WALE	Wall Adapting Local Eddy viscosity

Introduction

1. Motivation:

La combustion est l'un des procédés les plus importants dans la production de l'énergie. Elle permet de convertir l'énergie stockée dans les liaisons moléculaires des carburants en énergie thermique puis en énergie mécanique. Ainsi, la maîtrise de la combustion constitue une capacité vitale dans le développement des nouveaux systèmes industriels, tel que les systèmes de propulsion. L'un des défis que doit affronter aujourd'hui l'industrie afin d'accompagner le développement technologique est de réduire l'impact de la combustion sur l'environnement. Cet impact se manifeste en rejet d'espèces chimiques polluantes, desquelles on trouve, au premier rang, les oxydes d'azote (NO_x) et les gaz participant à l'effet de serre tels que les oxydes de carbone, CO et CO_2 . Cet enjeu oblige les motoristes à proposer des solutions toujours plus innovantes pour atteindre les objectifs fixés.

Plusieurs travaux visent à minimiser ces émissions en introduisant des techniques telles que la combustion pauvre, la combustion des carburants d'origine renouvelable et qui ne contient pas de carbone [1].

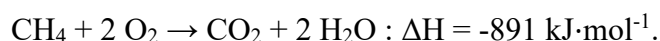
Le gaz naturel, qui est principalement constitué de méthane, offre de nombreux avantages économiques et environnementaux. Le gaz naturel a des niveaux d'émission de polluants relativement bas comparés aux autres combustibles fossiles. En ce qui concerne le dioxyde de Carbone, la combustion du gaz naturel engendre respectivement 30 à 40% moins que le pétrole et le charbon à quantité d'énergie consommée identique. Toutefois, les émissions de polluants dues à la combustion du gaz naturel peuvent être réduites. [2].

La combustion est l'un des procédés les plus importants dans la transformation de l'énergie, elle permet de convertir l'énergie chimique contenue dans les combustibles en chaleur. La combustion est nécessaire pour le transport, la génération d'énergie électrique, les procédés de fabrication, les moyens de chauffage,...Malgré les bienfaits de la combustion, elle reste le plus grand pollueur de notre planète. En plus de la chaleur, la combustion produit des émissions nocives pour l'environnement. Cette pollution résulte principalement des gaz et particules jetés dans l'air par les véhicules à moteur, les installations de chauffage, les centrales thermiques et les installations industrielles. Les émissions polluantes sont les oxydes de carbone, de soufre et d'azote, gaz à effet de serre, poussières, particules radioactives, produits chimiques, dioxygène, etc.

La combustion ne peut se produire que lorsque l'on réunit trois éléments : un combustible, un comburant, une énergie d'activation. On appelle ceci le triangle du feu [3].

Les alcanes sont des hydrocarbures saturés. Ils ne sont constitués que d'atomes de carbone (C) et d'hydrogène (H), liés entre eux par des liaisons simples, les atomes de carbone sont reliés à un nombre maximal d'atomes d'hydrogène — d'où le nom de « saturé ». Les alcanes non cycliques possèdent une formule brute de la forme C_nH_{2n+2} où n est un entier naturel non nul. À l'inverse les alcènes, les alcynes, et les composés aromatiques sont des hydrocarbures insaturés.

Le méthane est un composé chimique de formule chimique CH_4 . Il a été découvert et isolé par Alessandro Volta entre 1776 et 1778. Il s'agit du plus simple des hydrocarbures, et plus précisément du premier terme de la famille des alcanes. Il est assez abondant dans le milieu naturel, ce qui en fait un combustible à fort potentiel. La combustion du méthane dans le dioxygène pur produit du dioxyde de carbone CO_2 et de l'eau H_2O avec une importante libération d'énergie :



Le propane est un alcane linéaire de formule C_3H_8 .

Il est dérivé d'autres produits pétroliers par des processus de thermochimie de gaz ou de pétrole. Il est couramment utilisé comme source d'énergie chimique par combustion dans les moteurs à combustion interne, barbecues et chaudières.

Généralement vendu à l'état liquide, sous forme de GPL notamment (c'est l'un de ses constituants principaux). Un additif, l'éthanthiol, est utilisé comme odorant pour signaler les fuites éventuelles [1]

2. Étude bibliographique

Haifeng Wang, Yiliang Chen. (2004) .bien que l'avantage significatif pour la méthode de la densité de probabilité (PDF) du traitement exact des réactions chimiques dans les problèmes de combustion turbulents, un mécanisme chimique détaillé n'a pas été mis en œuvre dans les calculs pratiques en raison de Le calcul prohibitif des méthodes PDF. Les solutions sont obtenues en utilisant l'algorithme de marche spatiale pour les équations de turbulence et la méthode de particules de Monte Carlo à nœuds pour l'équation d'évolution de PDF. Les termes de la source

de la réaction chimique sont Directement. Y compris les fractions de masse des espèces intermédiaires (CO et H), les émissions de NO polluant et les extinction. [4].

Evatt R. Hawkes, Jacqueline H. Chen. (2004) L'effet du mélange d'hydrogène sur des mélanges de méthane et d'air pré-mélangés pauvre est étudié avec la méthode numérique directe Simulation (DNS) couplée à un mécanisme chimique réduit. [5]

J.P. Bingue, et al. (2004) les ondes de combustion par filtration transitoire formées dans une matrice poreuse de pastilles d'alumine aléatoirement disposées sont étudiées expérimentalement pour des vagues riches et ultra-riches de méthane / air avec enrichissement en oxygène et épuisement. Une vitesse de filtration unique (12 cm = s) a été utilisée et le rapport d'équivalence du mélange a été varié de 1 à 3,5. La teneur en air et en oxydant a été ajustée pour maintenir la vitesse de filtration constante pour chaque rapport d'équivalence. Six compositions d'oxydant (10%, 15%, 21%, 25%, 30% et 35% d'O₂)

Ont été comparativement analysés en se concentrant sur les températures de combustion, les vitesses des vagues de combustion, les produits majeurs et mineurs de la combustion. La gamme étudiée des rapports d'équivalence couvrait les régimes sous-adiabatiques (en amont) et superadiabatiques (en aval) des ondes de filtration transitoire où les températures de combustion sont inférieures et supérieures aux températures adiabatiques, respectivement. [6]

S. Orhan Akansu, et al. (2007). la présentation de résultat d'un four-cylindrique Essai moteur avec la mélange de hydrogène et méthane avec déférente de personnage à la équivalence . il remarque que augmentation de émissions NO et réduction des émissions HC,CO et CO₂ et freinage thermique Les valeurs d'efficacité (BTE) augmentent avec l'augmentation de l'hydrogène [7].

Jinhua Wang, et al.(2009). les flammes lamellaires stœchiométriques méthane-hydrogène-air propagées librement à température et pression normales ont été calculées en utilisant le code PREMIX du programme CHEMKIN II avec mécanisme GRI-Mech 3.0. Les profils de fraction molaire et la vitesse de production des réactions dominantes contribuant aux espèces principales et à certaines espèces intermédiaires sélectionnées dans les flammes de méthane-hydrogène-air ont été obtenues. Le taux de production et l'effet de l'hydrogénation sur les réactions des mélanges méthane-air ont été analysés par les réactions élémentaires dominantes pour les espèces spécifiques. Les résultats montrent que les fractions molaires des principales espèces CH, CO et CO sont diminuées par leurs valeurs normalisées.

Le taux de production des réactions dominantes contribuant aux CH_4 , CO et CO Montre une augmentation remarquable. Le rôle de H dans la flamme varie de 20% à 20%. L'augmentation de l'hydrogène avec l'addition d'hydrogène peut être attribuée à l'augmentation significative de H , O et OH dans le flamme est l'hydrogène est présenté. La diminution des fractions molaires de CH_2O et CH_3CHO avec addition d'hydrogène suggère un potentiel de réduction des émissions d'aldéhydes de méthane. Les voies de réaction d'oxydation du méthane se déplaceront vers la voie de réaction du carbone inférieur. Composition chimique du chlorure de méthylène avec ajout d'hydrogène [8].

F. Tabet, B. Sarhm, I. Gokalp. (2009) dans cette étude, on analyse la structure des mélanges d'hydrogène et d'air méthane turbulents non prémélangés, en mettant particulièrement l'accent sur le mélange et l'entraînement d'air. La quantité de H_2 La fraction de mélange et sa variance sont transportées par le code de la dynamique des fluides de calcul (CFD). Les résultats obtenus montrent une amélioration du mélange avec addition d'hydrogène entraînant une forte consommation de CH et un fort entraînement d'air dans la région de ligne centrale. En tant qu'effet global, les combustibles composites brûlent plus rapidement et réduisent ainsi le temps de séjour qui raccourcit finalement la longueur et l'épaisseur de la flamme. D'autre part, l'hydrogène est trouvé pour augmenter le niveau de NO . [9]

Erjiang Hu, et al. (2009) Etude expérimentale et numérique sur les flammes pauvres méthane-hydrogène-air à Les pressions et les températures. Les vitesses de combustion laminaire non étirées et Les longueurs de Markstein ont été obtenues sur une large gamme de fractions d'hydrogène à des pressions élevées Et les températures. L'analyse de sensibilité et la structure de la flamme ont également été analysées. [10].

S.A. Hashemi, et al. (2011). cet étude utilise la méthode de volume finis pour obtient résulte il utilise $\text{K}-\epsilon$ et $\beta\text{-PDF}$ pour protège l'environnement de NO Investigation of the effet of air turbulence intensité on NO_x émission in non-premixed hydrogéné and hydrogéné-hydrocarboné composite fuel combustion [11].

Yingjia Zhang, et al. (2012). des retards d'allumage de mélanges pauvres de méthane-hydrogène avec différents teneurs en hydrogène volumétrique ont été étudiés expérimentalement dans un tube de choc avec une analyse de modélisation. la réponse d'allumage ressemble à celle de l'hydrogène en ce que le retard d'allumage présente une dépendance complexe de la pression et une transition en deux étapes dans l'énergie d'activation globale. Comparativement aux valeurs calculées en utilisant Le mécanisme NUI Galway a obtenu le plus d'accord et a été adopté dans

l'analyse de sensibilité de la cinétique d'allumage. Taux de L'analyse de la production montre que l'effet favorisé de l'hydrogène sur l'oxydation du méthane est principalement dû aux concentrations des radicaux libres tels que H, O et OH augmenter avec l'augmentation de la fraction d'hydrogène et conduire à la vitesse de réaction totale est améliorée. La consommation de méthane est principalement à travers ces réactions dans lesquelles les radicaux libres actifs participent [12].

Babak Kashir, Sadegh Tabejamaat. (2013). cette étude a été mise en œuvre en deux sections. En premier lieu, la flamme à jet turbulent de DLR-B Est simulé en combinant le modèle de k-ε turbulence et une approche à fléaux fixes. Le La flamme DLR-B. que La vitesse obtenue et les statistiques scalaires. Son objectif dans la première partie est de valider le code numérique développé. Comparaison Avec des expériences ont montré un bon accord pour la température et la répartition des espèces. Au Deuxième partie, nous avons échangé du méthane avec du propane dans la composition.

Toutes les autres conditions de fonctionnement restent inchangées. Nous avons étudié l'effet de l'hydrogène Concentration sur CH₄ et H₂ EN Mélanges de sorte que l'étendue de fraction molaire de propane est fixée. Le flux de chaleur et les émissions de CO polluant. Ce dernier comportement pourrait être dû à la Procédé d'oxydation du CO à la lumière de l'air froid excessif en aval de la zone de réaction [13].

3. Objectifs de la thèse

Le but de cette thèse est d'étudier numériquement les écoulements réactifs non-prémélangés dans une chambre de combustion, et de valider le modèle de couplage de la simulation aux grandes échelles LES et la fonction de densité de probabilité PDF. La première étape de la thèse est consacrée à la simulation de deux jets coaxiaux CH₄/air confiné par une chambre de combustion cylindrique dotée de parois isothermes et soumise à une pression de 3,8 ATM. Ce genre de combustion est dénommé la combustion non-prémélangée turbulente. La confirmation du couplage LES-WALE/bêta-PDF est basée sur la comparaison des résultats expérimentaux de Charles David Pierce *et al.* [14-16], en termes des paramètres de combustion: le champ de vitesse et de température, la fraction massique de monoxyde de carbone, la fraction du mélange et la variable d'avancement. Les calculs dans ce travail sont effectués en utilisant le code de calcul FLUENT.

L'objectif principal de ce travail est de présenter une étude numérique 3D dans une chambre de combustion non-prémélangée alimentée par différents pourcentages de

mélanges des combustibles de CH_4 et de C_3H_8 . Une attention particulière est donnée à l'effet du C_3H_8 sur l'émission du CO pour compare avec CH_4 .

4. Contenu du mémoire:

Ce mémoire comprend quatre chapitres et deux annexes qui sont organisés de la façon suivante:

Chapitre I : Ce chapitre rappelle dans un premier temps des notions de les différentes variables qui vont être utilisées dans l'écoulement réactif. On a aussi écrit les équations de conservations pour l'écoulement réactif laminaire, à savoir : l'équation de la continuité, l'équation de la quantité de mouvement, l'équation d'énergie et l'équation de la conservation des espèces. Dans le chapitre suivant, on va introduire la turbulence et on va réécrire les équations de l'écoulement laminaire pour le cas turbulent. Dans un second temps, sont introduits les fondements du modèle LES et les filtrages des paramètres selon l'échelle caractéristique après l'utilisation de la moyenne pondéré par la masse (moyenne de Favre). Puis, on passe à une illustration des modèles de la viscosité de sous-maille, avant d'arriver au finale au choix du modèle le plus performant dans le calcul.

Chapitre II : Ce chapitre est consacré à la présentation du modèle de la combustion PDF. Le principe pour calculer les paramètres scalaires comme la fraction de mélange Z , la fraction massique de monoxyde de carbone CO et la variable d'avancement C . Et traiter la combustion turbulente non-prémélangé, en choisissant le modèle LES-WALE comme un modèle de la turbulence.

Chapitre III : Ce chapitre présente la validation et la comparaison de la temperture, la vitesse et la fraction massique de monoxyde de carbone entre les deux carburant (le méthane et le propane) dans une chambre de combustion cylindrique. Les calculs réalisés permettent de tester la faisabilité d'un calcul «LES/PDF » sur une géométrie complexe par le code de calcul « Fluent », et voir l'accord avec les résultats expérimentaux [15].

Après la conclusion générale, nous présenterons en annexes quelques détails sur l'analyse paramétriques des piles à combustible fonctionnant à base d'hydrogène, et les démarches suivies lors de l'application du code utilisé « FLUENT ».

Chapitre I

Equations de Conservation pour les Fluides Réactifs

Ces dernières années, la simulation numérique et essentiellement la CFD (Computational Fluid Dynamics) est devenue un outil primordial dans le procédé de conception des applications efficaces économiquement et écologiquement. Les ressources de calcul ont évolué d'une manière exponentielle dans le temps. Actuellement, la simulation numérique de la combustion promet des résultats rapides et peu coûteux pour guider le procédé de la conception. Les applications techniques basées sur la combustion font intervenir la simulation numérique pour prédire les champs dynamiques de l'écoulement, les quantités de chaleur dégagées et les gaz produits. Ces informations sont très intéressantes pour l'optimisation de ces applications. La combustion fait intervenir plusieurs espèces qui réagissent à travers plusieurs réactions élémentaires (mécanismes réactionnels). Ces espèces sont caractérisées par leurs fractions massiques y_k pour $k = 1$ à N où N est le nombre d'espèces dans le mélange réactif. Les fractions massiques y_k sont définies par:

$$y_k = \frac{m_k}{m} \quad (\text{I.1})$$

Où m_k est la masse de l'espèce k présente dans un volume donné V et m la masse totale du gaz dans le volume V .

I.1 Variables de la thermochimie

Pour un mélange de N gaz parfaits, la pression totale est la somme des pressions partielles:

$$p = \sum_{k=1}^N p_k \quad \text{où} \quad p_k = \rho_k \frac{RT}{W_k}, \quad (\text{I.2})$$

où T est la température et R la constante des gaz parfaits, $\rho_k = \rho Y_k$ et W_k sont respectivement la densité et la masse moléculaire de l'espèce k . Puisque la densité pour un gaz multi espèces est donnée par :

$$\rho = \sum_{K=1}^N \rho_K \quad (\text{I.3})$$

L'équation d'état est :

$$p = \rho \frac{RT}{W} \quad (\text{I.4})$$

où W est la masse moléculaire moyenne du mélange donné par:

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (\text{I.5})$$

L'enthalpie h_k de l'espèce k est donnée par :

$$h_k = h_{s,k} + \Delta h_{f,k}^0 = \underbrace{\int_{T_0}^T C_{pk} dT}_{\text{Sensible}} + \underbrace{\Delta h_{f,k}^0}_{\text{Chimique}}. \quad (\text{I.6})$$

L'enthalpie sensible $h_{s,k}$ est produite par la réaction chimique, elle est nulle à $T = T_0$. L'enthalpie chimique ou de formation $\Delta h_{f,k}^0$ représente l'enthalpie nécessaire pour former un kilogramme de l'espèce k . C_{pk} , chaleur spécifique à pression constante de l'espèce k , est donnée pour un gaz parfait [14] diatomique par :

$$C_{pk} = 2.5 \frac{R}{W_K} \quad (\text{I.7})$$

L'enthalpie du mélange est obtenue en faisant la somme sur toutes les espèces :

$$h = \sum_{k=1}^N h_k Y_K = \int_{T_0}^T C_p dT + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 Y_K \quad (\text{I.8})$$

Où la chaleur spécifique à pression constante du mélange C_p est donnée par :

$$C_p = \sum_{k=1}^N C_{pk} Y_K \quad (\text{I.9})$$

L'énergie interne $e = h - (p / \rho)$ est donnée par :

$$e = \int_{T_0}^T C_v dT - RT_0 / W + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 Y_k = \sum_{k=1}^N e_k Y_K \quad (\text{I.10})$$

Où la chaleur spécifique à volume constant du mélange C_v est donnée par :

$$C_v = C_p - r \quad (\text{I.11})$$

Avec r la constante du gaz

$$r = \frac{R}{W} = R \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (\text{I.12})$$

La constante universelle des gaz parfaits est désignée $R = 8.3143 J(mol \cdot K)$. La masse moléculaire du mélange est W , celle de chaque espèce k est W_k et le nombre total des espèces est N .

I.2 Equations de conservation de masse et d'espèces

L'équation de conservation de la masse totale pour un écoulement réactif est similaire à celle d'un écoulement inerte car la combustion ne génère pas de masse.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (\text{I.13})$$

L'équation de conservation de masse pour l'espèce k s'écrit:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i + V_{k,i}) Y_k = \dot{\omega}_k \quad \text{Pour } k = 1, N \quad (\text{I.14})$$

avec $V_{k,i}$, la composante i de la vitesse de diffusion V_k de l'espèce k et $\dot{\omega}_k$ est le taux de production de l'espèce k .

Généralement, la vitesse de diffusion est donnée par la loi de Fick sous la forme:

$$V_{k,i} = -D_k \frac{1}{Y_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \quad \text{pour } k = 1, \dots, N_{k,i} \quad (\text{I.15})$$

où D_k est le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange.

L'équation de conservation de l'espèce k devient:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad \text{pour } k = 1, \dots, N_{k,i} \quad (\text{I.16})$$

Dans cette équation, la diffusion de masse due aux gradients de température est négligée.

I.3 Equations de la quantité de mouvement

L'équation de la quantité de mouvement se trouve inchangée par la réaction chimique, elle s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_j + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i u_j = \frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j} \quad (\text{I.17})$$

Où $f_{k,f}$ est la force de volume agissant sur l'espèce k dans la direction j et τ_{ij} est le tenseur visqueux, donné par :

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{I.18})$$

Le tenseur σ_{ij} combine la pression et le tenseur visqueux sous la forme suivante :

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p \delta_{ij} = -p \delta_{ij} - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{I.19})$$

Où μ est la viscosité dynamique et δ_{ij} est le symbole de Kröncker.

I.4 Equations de la conservation d'énergie

C'est l'équation la plus affectée par la combustion, elle peut être écrite sous plusieurs formes, une des plus utilisées est celle de l'enthalpie sensible :

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_s) = \dot{\omega}_T + \dot{Q} + \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k} \right) \quad (\text{I.20})$$

Le flux d'énergie $\lambda \partial T / \partial x_i$ est le terme de diffusion de chaleur exprimé par la loi de Fourier. Un second terme $\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k}$ associe la diffusion de différentes espèces avec des enthalpies différentes. Le terme \dot{Q} représente la source de chaleur due par exemple à un laser ou un arc électrique. Le terme $\dot{\omega}_T$ est le dégagement de chaleur dû à la combustion, il est donné par :

$$\dot{\omega}_T = -\sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \quad (I.21)$$

Le système d'équations de Navier-stokes pour un fluide réactif est fermé par l'équation d'état pour un gaz parfait.

$$P = \rho r T \quad (I.22)$$

I.5 Cinétique chimique

On considère un système chimique (mécanisme réactionnel) des N espèces qui réagissent à travers L réactions.

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} M_k \leftrightarrow \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} M_k \quad \text{Pour } j = 1, L \quad (I.23)$$

Où M_k est le symbole chimique de l'espèce k , ν'_{kj} et ν''_{kj} sont les coefficients stœchiométriques molaires de l'espèce k dans la réaction j .

Le taux de réaction massique global $\dot{\omega}_k$ est la somme des taux $\dot{\omega}_{kj}$ produit par les L réactions :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^L \omega_{kj} = W_k \sum_{j=1}^L \nu_{ij} Q_j \quad \text{Avec } Q_j = \frac{\dot{\omega}_{kj}}{W_k \nu_{kj}} \quad (I.24)$$

Où $\nu_{kj} = \nu'_{kj} - \nu''_{kj}$ et Q_j est le taux de progression de la réaction j , il est donné par [14]:

$$Q_j = K_{fj} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{M_k} \right)^{\nu_{kj}^f} - K_{bj} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{M_k} \right)^{\nu_{kj}^b} \quad (I.25)$$

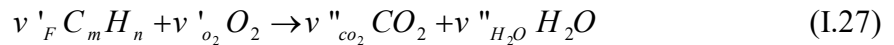
Avec K_{fj} et K_{bj} sont les taux direct et inverse de la réaction j . $\rho Y_k / W_k$ est la concentration molaire de l'espèce k . Ces taux constituent un problème central dans la modélisation de la combustion. Ils sont toujours modélisés en utilisant la loi empirique d'Arrhenius:

$$K_{fj} = A_{fj} T^{\beta_j} \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right) = A_{fj} T^{\beta_j} \exp\left(-\frac{T_{aj}}{T}\right) \quad (I.26)$$

La connaissance de taux d'avancement individuel Q_j de chaque réaction nécessite la connaissance de la constante A_{fj} , l'exposant de la température β_j et la température d'activation T_{aj} (ou l'énergie d'activation $E_j = RT_{aj}$). Avant d'identifier ces constantes, un autre défi est l'identification des espèces et des réactions à inclure dans le mécanisme réactionnel.

I.6 Facteurs stœchiométriques

En combustion, il est pratique de relier les fractions massiques des réactifs à celles des produits par rapport à une condition stœchiométrique. Cette condition est définie comme étant l'état dans lequel tout le combustible et le comburant sont consommés et les produits sont dans leur état le plus stable. Considérons l'équation représentative de la combustion d'un hydrocarbure :



Les coefficients stœchiométriques sont définis par

$$v'_F = 1, v'_{O_2} = m + \frac{n}{4}, v''_{CO_2} = m \text{ et } v''_{H_2O} = \frac{n}{2} \quad (I.28)$$

On définit le rapport stœchiométrique de masse s qui représente la masse minimale d'oxydant par unité de masse du combustible nécessaire pour une combustion complète :

$$s = \left(\frac{Y_o}{Y_F} \right) = \frac{v'_{O_2} W_O}{v'_F W_F} \quad (I.29)$$

On définit aussi le facteur d'excès d'air λ par le rapport suivant :

$$\lambda = \left(\frac{Y_F}{Y_O} \right)_{ST} / \left(\frac{Y_F}{Y_O} \right) = \frac{1 Y_O}{s Y_F} \quad (I.30)$$

Un autre paramètre fréquent correspondant à la réciproque du coefficient d'excès d'air est la richesse ϕ définie par :

$$\phi = \frac{1}{\lambda} = \left(\frac{Y_F}{Y_O} \right) / \left(\frac{Y_F}{Y_O} \right)_{ST} \quad (I.31)$$

λ et ϕ sont limités par zéro et l'infini, ils peuvent classier le mélange réactif en trois catégories :

- Mélange pauvre : $0 < \phi < 1$ ou $1 < \lambda < \infty$
- Mélange stœchiométrique : $\phi = 1$ ou $\lambda = 1$
- Mélange riche : $1 < \phi < \infty$ ou $0 < \lambda < 1$

Conclusion

Dans ce chapitre, on a décrit les différentes variables qui vont être utilisées dans l'écoulement réactif. On a aussi écrit les équations de conservations pour l'écoulement réactif laminaire, à savoir : l'équation de la continuité, l'équation de la quantité de mouvement, l'équation d'énergie et l'équation de la conservation des espèces. Dans le chapitre suivant, on va introduire la turbulence et on va réécrire les équations de l'écoulement laminaire pour le cas turbulent.

Chapitre II

Les Modèles de la Turbulence « LES et PDF »

La turbulence est l'état du mouvement des fluides qui se caractérise par des tourbillons et un écoulement aléatoire de trois dimensions. Lorsque la turbulence est présente, elle domine en général tous les phénomènes d'écoulement: augmente la l'énergie de dissipation, mélange, transfert de chaleur. Un problème de mécanique des fluides qui s'attache à la cinétique de l'écoulement, il exprime des bilans de conservation : masse, quantité de mouvement, énergie interne, etc., tient compte de la géométrie et des conditions aux limites, pour dégager un comportement global ; un comportement à grande échelle. Il s'agit alors de déterminer la perte de charge dans une conduite, l'efficacité de la dispersion d'un polluant ou les contraintes mécaniques exercées par l'écoulement sur un obstacle. Un problème de physique statistique qui s'intéresse aux processus stochastiques élémentaires de l'agitation du fluide, il veut comprendre le comportement du système dans son détail ; à petite échelle. Il s'agit de mettre en évidence des propriétés statistiques universelles des fluctuations turbulentes. La difficulté du problème de la turbulence réside principalement dans le fait qu'il n'y a pas de séparation entre les grandes et les petites échelles: on ne peut pas traiter le comportement à grande échelle sans tenir compte explicitement des mécanismes mis en jeu aux petites échelles, et inversement. Les deux attitudes, mécanique et physique (statistique), sont donc fortement liées l'une à l'autre [19-21].

Généralement Les équations des conservations pour les écoulements réactifs sont décrites dans un premier temps en chapitre I. Dans ce chapitre, on a fait une étude phénoménologique de l'interaction entre la turbulence et la flamme non prémélangée, nous utilisons les modèles suivent la simulation aux grandes échelles «LES» et la fonction de densité de probabilité «PDF».

II.1 Modes de combustion élémentaires

Il existe un nombre important de techniques menant à la combustion d'un carburant par un oxydant. En se limitant à la combustion gazeuse, deux modes de combustion élémentaires peuvent être identifiés: la combustion prémélangée et la combustion non prémélangée. Entre ces deux modes de combustion élémentaires se trouvent différents modes de combustion intermédiaires, comme le prémélange partiel ou la combustion stratifiée.

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

TAB. II.1: *Résumé des avantages et inconvénients principaux des trois modes de combustions présentés.*

II.2 Applications industrielles de la combustion turbulente

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.

II.3 La simulation numérique de la combustion turbulente

Pendant de nombreuses années, les études expérimentales ont servi à développer et valider les méthodes de simulation numérique. De nos jours, la simulation numérique est devenue suffisamment développée pour être utilisée en parallèle 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 [22,23].

Il existe trois principales approches de résolution numérique des phénomènes physiques.

(RANS pour Reynolds Average Navier-Stokes, la simulation numérique directe (DNS pour Direct Numerical Simulation) Relativement récente, la simulation aux grandes échelles (LES pour Large Eddy Simulation). Enfin, il faut sur tout retenir que couplée à des études acoustiques, la LES apparaît comme un outil adapté à l'études des phénomènes d'instabilités de combustion.

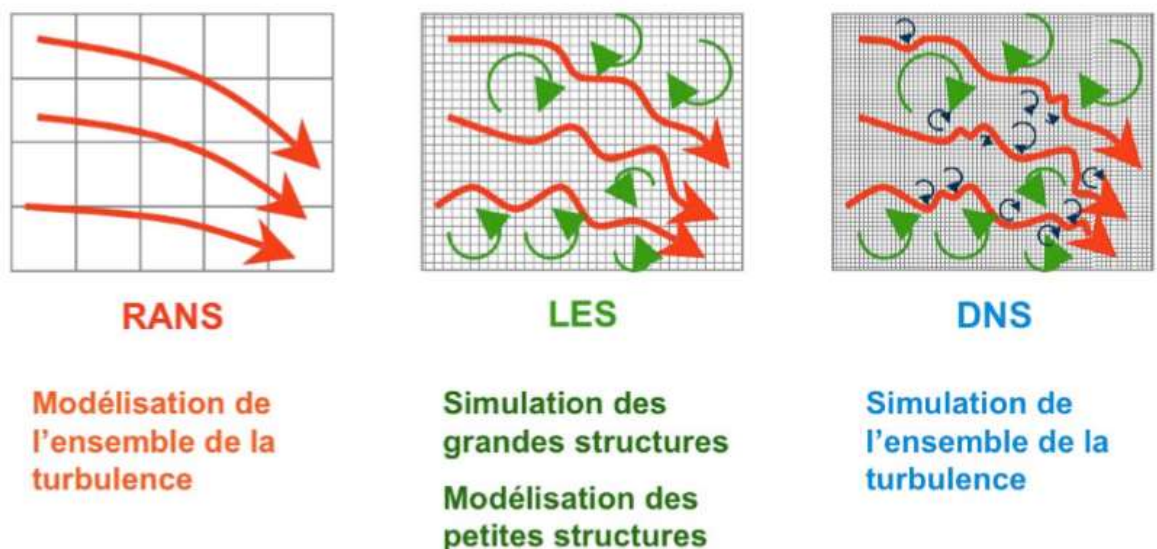


FIG. II.1: Comparaison entre simulation numérique directe (DNS), résolution des équations moyennées (RANS) et simulations aux grandes échelles (LES) [22].

II.4 Description statistique sur l'écoulement turbulent

L'objectif de cette partie est de rappeler quelques-unes des bases de la théorie de la turbulence et de son analyse statistique. L'accent est mis sur les caractéristiques de l'écoulement turbulent qui sont d'un intérêt primordial pour la prédiction et la modélisation des écoulements: échelles de turbulence, cascade de Kolmogorov, les structures cohérentes dans les écoulements cisailés, la production de turbulence et la dissipation d'énergie

II.4.1 Nombre de Reynolds élevé

La turbulence apparaît dans des écoulements dont le nombre de Reynolds est élevé. Elle a souvent pour origine le développement d'une instabilité d'un écoulement laminaire. Lorsque le nombre de Reynolds dépasse une certaine valeur critique, les petites perturbations de l'écoulement deviennent instables et leur croissance rapide produit la transition vers la turbulence. C'est ainsi que la couche limite laminaire sur une plaque plane devient turbulente lorsque le nombre de Reynolds Re dépasse $5 \cdot 10^5$. De même, la transition apparaît dans un écoulement en conduit cylindrique pour un nombre de Reynolds 2500.

II.4.2 La valeur moyenne de Reynolds

La turbulence est un phénomène stochastique, une description statistique de la turbulence est nécessaire. D'un point de vue engineering, seulement la moyenne et la variance d'une quantité sont d'un intérêt primaire. Reynolds a considéré le concept de la valeur moyenne en 1895 [16]. Toutes les quantités fluctuantes sont divisées en une partie moyenne \bar{u} et fluctuante u' voir (figure II.2), où la barre montre que la quantité est moyennée, la prime indique la fluctuation. La moyenne de Reynolds est définie [24]:

$$u = \bar{u} + u' \quad (\text{II.1})$$

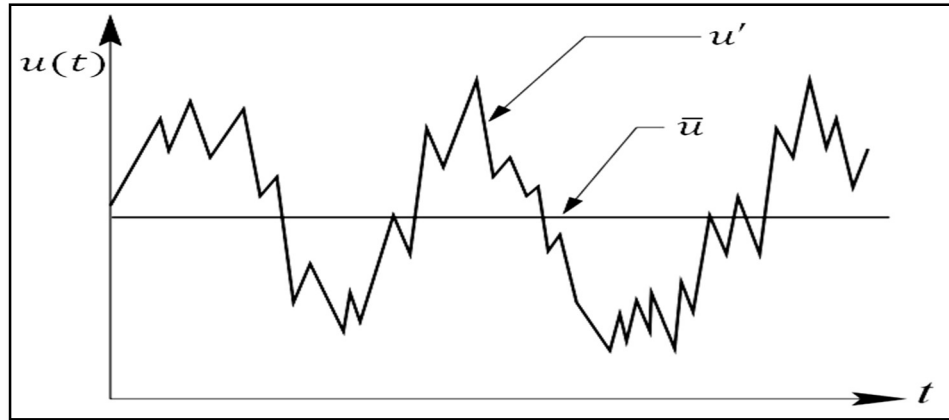


FIG. II.2: Illustration des paramètres d'écoulement de la turbulente [25].

Les quantités moyennes sont calculées par une moyenne d'ensemble sur toutes les réalisations de cette quantité à un point fixe de l'espace et lu temps

$$\bar{u} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T u dt \quad (\text{II.2})$$

La valeur fluctuante moyenne de Reynolds est zéro:

$$\overline{u'} = 0 \quad (\text{II.3})$$

II.4.3 Équations de Navier- Stokes compressibles

En coordonnées cartésiennes, les équations du bilan aérothermique peuvent être exprimées sous la forme de flux suivant [14,21, 22]:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_1}{\partial x_1} + \frac{\partial F_2}{\partial x_2} + \frac{\partial F_3}{\partial x_3} = s \quad (\text{II.4})$$

Où:

S : terme de Source.

F : le flux descriptif des variables Conservatives.

Q: variables Conservatives

Où

$$Q = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ \rho e \end{pmatrix} \quad (\text{II.5})$$

C'est la matrice de la densité, quantité de mouvement et l'énergie totale définie ici pour les gaz parfait :

$$\rho e = \rho C_v T + \frac{1}{2} \rho (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2) \quad (\text{II.6})$$

Si on néglige l'effet de la gravité, le flux F_i s'écrit $\forall i \in \{3, 2, 1\}$.

$$F_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 - \sigma_{i1} \\ \rho u_i u_2 - \sigma_{i2} \\ \rho u_i u_3 - \sigma_{i3} \\ \rho e u_i - u_j \sigma_{ij} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \end{pmatrix} \quad (\text{II.7})$$

Avec :

$\lambda = \rho C_p \kappa$ Conductivité thermique

κ : Diffusivité thermique.

La composante σ_{i1} du tenseur de contrainte présenté à l'Eq (II.7), peut s'écrire pour un fluide newtonien sous la forme [21, 22].

$$\sigma_{i1} = -p \delta_{ij} + 2\mu A_{ij} \quad (\text{II.8})$$

Tel que :

$$A_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} (\nabla u) \delta_{ij} \right] \quad (\text{II.9})$$

Désigne maintenant le tenseur de la déformation. On obtient ainsi :

$$F_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 + p \delta_{i1} - 2\mu A_{i1} \\ \rho u_i u_2 + p \delta_{i2} - 2\mu A_{i2} \\ \rho u_i u_3 + p \delta_{i3} - 2\mu A_{i3} \\ (\rho e + p)u_i - 2\mu u_j A_{ij} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \end{pmatrix} \quad (\text{II.10})$$

Pour le départ on utilise la relation empirique de Sutherland afin de présenter la viscosité.

$$\mu(T) = \mu(273,15) \left(\frac{T}{273,15} \right)^{1/2} \frac{1 + T_0 / 273,15}{1 + T_0 / T} \quad (\text{II.11})$$

Avec : $\mu(273,15) = 1,711 \cdot 10^{-5} \text{ Pl}$ et $T_0 = 110,4 \text{ K}$

Dans le cas où $T < 120 \text{ K}$ on utilise une extension de la loi précédente.

$$\mu(T) = \mu(120) \left(\frac{T}{120} \right) \quad (\text{II.12})$$

La viscosité et la conductivité thermique sont reliées par le nombre de Prandtl.

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{k} = \frac{C_p \mu(T)}{\lambda} \quad (\text{II.13})$$

Ce dernier est égal à 0,7 dans le cas de l'air à température ambiante. L'équation de l'état thermodynamique est donnée par.

$$p = \rho R T \quad (\text{II.14})$$

On ferme le système des équations avec, $R = C_p - C_v = 287,06 \text{ J.Kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ pour l'air à température ambiante. On rappelle que $\gamma = C_p / C_v$.

II.4.4 la théorie de la turbulence de Kolmogorov

Il existe une théorie qui a contribué de façon majeure dans la compréhension de la turbulence: la théorie de Kolmogorov (1941). Elle repose sur une vision "statistique" de la

turbulence. Selon cette théorie les tourbillons dans l'écoulement ont une taille comprise entre les deux tailles limites suivantes [19,26] :

- La plus grande échelle de l'écoulement L (imposée par la géométrie de l'écoulement, par exemple typiquement le diamètre d'un cylindre, le diamètre d'une cheminée, ou encore la hauteur d'une voiture).
- La plus petite échelle de l'écoulement η : imposée par la viscosité du fluide; cette échelle est appelée échelle de Kolmogorov, ou échelle de dissipation visqueuse.

L'ordre de grandeur entre L et η est le suivant :

$$\frac{L}{\eta} \approx \text{Re}^{3/4} \quad (\text{II.15})$$

La théorie de la "cascade" énergétique prédit que les tourbillons reçoivent de l'énergie des échelles plus grandes qu'eux, et la transmettent ensuite aux échelles plus petites qu'eux, et ainsi de suite jusqu'à la plus petite échelle existant dans l'écoulement, l'échelle η . On parle de production d'énergie lorsque les grosses structures sont générées - par un décollement par exemple - et de dissipation d'énergie lorsque les tourbillons disparaissent complètement en aval de l'obstacle. Lorsque la production d'énergie est égale à la dissipation d'énergie, on parle de turbulence "en équilibre".

L'idée fondatrice de la théorie de la turbulence de Kolmogorov montre que pour un nombre de Reynolds suffisamment grand, il y a une séparation d'échelle entre les structures énergétiques de l'écoulement et les structures qui dissipent cette énergie. De plus, le spectre d'énergie a une structure générique [25,27].

$$E(k) = \text{Re}^{-5/3} \quad (\text{II.16})$$

Entre ces deux fréquences (L et η) (figure II.3), l'idée de la LES consiste à appliquer un filtre sur les équations dans l'espace. Les structures qui sont plus grandes que la fréquence de coupure du filtre sont explicitement représentées par les équations tandis que les petites structures sont modélisées (figure II.3).

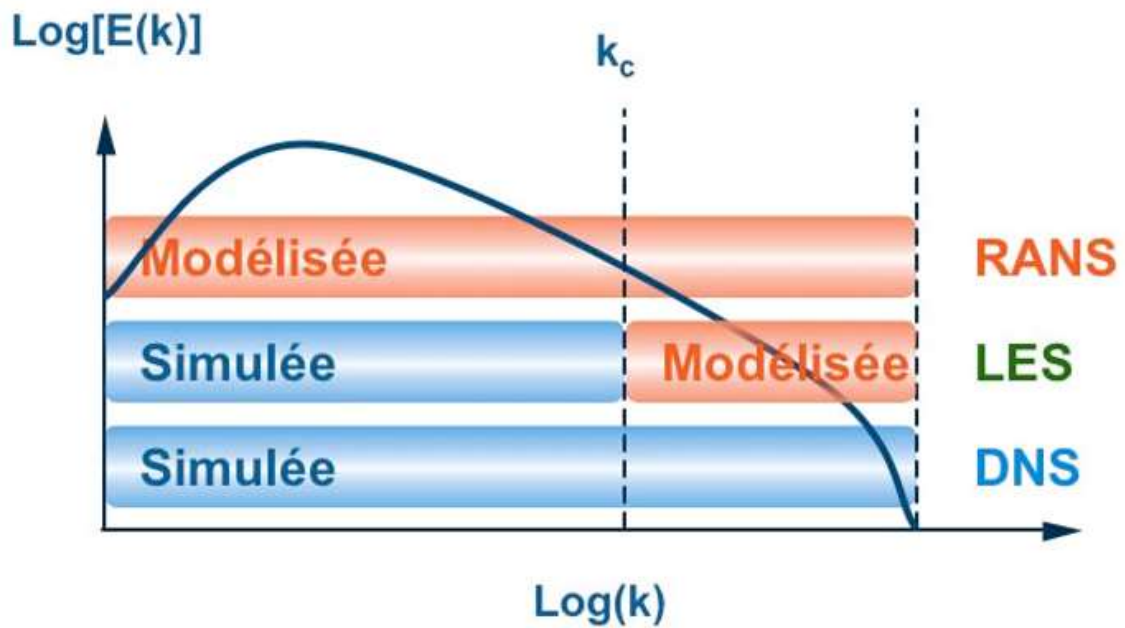


FIG. II.3: le spectre d'énergie d'une Turbulence Homogène Isotrope : concept LES

II.5 Modèle dynamique de turbulent

II.5.1 Généralité sur le modèle la simulation aux grandes échelles LES

La simulation des grandes échelles (LES) des écoulements turbulents est une technique extrêmement puissante qui consiste à surmonter un problème théorique très difficile, liée à la modélisation du comportement dynamique à petite échelle dans les équations de mouvement à grande échelle. LES est un outil précieux pour filtrer la structure tourbillonnaire de l'écoulement, car il permet de capturer d'une manière déterministe la formation et l'évolution ultérieure de tourbillons cohérents et de structures. Il permet aussi la prédiction de nombreux paramètres statistiques liés à la turbulence et le mélange induit. LES s'applique aux écoulements turbulents pour remédier au problème de fermeture [24,25].

Le concept du modèle LES est maintenant mieux connu dans la communauté scientifique. L'idée fondatrice vient de la théorie de la turbulence de Kolmogorov [28,29]. Pour faire une LES de bonne qualité, il faut que toutes les structures résolues sur le maillage soient correctement, tandis que la contribution des petites structures, sous-maille, est modélisée. Il faut donc éviter au maximum les artefacts numériques tels que la dissipation ou la dispersion. L'utilisation de schémas numériques centrés d'ordre élevé permet de minimiser la dissipation et la dispersion. Cependant, les schémas centrés sont relativement sensibles aux oscillations numériques d'une part et à la qualité des maillages d'autre part. Ainsi, le manque de robustesse

des méthodes numériques faiblement dissipatives est un problème central pour le calcul des écoulements à fort nombre de Reynolds.

On considère un champ f quelconque, on note \bar{f} ce champ après filtrage LES. Alors dans le modèle (LES), les paramètres sont traités par l'utilisation de la décomposition de Reynolds, $f' = f - \bar{f}$, afin de faciliter l'arrangement des termes de sous-maille pour les modéliser. Dans le cas des équations de Navier-Stokes compressibles, pour simplifier la modélisation des termes filtrés, on ne va pas écrire les équations pour la variable filtrée \bar{f} , mais pour le cas d'un écoulement turbulent compressible une quantité pondérée par la densité appelée "moyenne de Favre" notée \tilde{f} , définie par [14-16,27] :

$$\text{Où bien :} \quad \overline{\rho \tilde{f}} = \overline{\rho f} \quad (\text{II.17})$$

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\overline{\rho}} \quad (\text{II.18})$$

Le système des équations définies au dessus Eq (1.2)-Eq (1.7) devient.

$$\bar{Q} = (\overline{\rho}, \overline{\rho \tilde{u}_1}, \overline{\rho \tilde{u}_2}, \overline{\rho \tilde{u}_3}, \overline{\rho \tilde{e}})^T \quad (\text{II.19})$$

L'énergie totale filtrée peut s'écrire sous la forme.

$$\overline{\rho e} = \overline{\rho \tilde{e}} = \overline{\rho C_v \tilde{T}} + \frac{1}{2} \overline{\rho (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)} \quad (\text{II.20})$$

Le flux filtré \bar{F}_i est donc.

$$\bar{F}_i = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u}_i} \\ \overline{\rho u_i u_1 + p \delta_{i1} - 2\mu A_{i1}} \\ \overline{\rho u_i u_2 + p \delta_{i2} - 2\mu A_{i2}} \\ \overline{\rho u_i u_3 + p \delta_{i3} - 2\mu A_{i3}} \\ \overline{(\rho e + p) u_i - 2\mu u_j A_{ij} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.21})$$

Avec: $i=1, 2, 3$ et $j=1, 2, 3$

II.5.2 Les équations de LES

Ceci assure que le procédé de filtration ne change pas la forme des lois de conservations. Les équations LES pour le volume résolu sont formellement dérivées en substituant les décompositions ci-dessus dans les équations régissantes. Où les équations sont écrites comme [25,30].

Continuité

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (\text{II.22})$$

Quantité de mouvement

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = - \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} (\overline{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_i} \quad (\text{II.23})$$

Energie

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}) = - \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} (\overline{u_i h} - \tilde{u}_i \tilde{h})] + \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{u_j \tau_{ij}} \quad (\text{II.24})$$

Espèces

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_f) = - \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} (\overline{u_i Y_f} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_f)] + \bar{\omega}_f \quad (\text{II.25})$$

Avec: $i=1, 2, 3$ et $j=1, 2, 3$

De même pour l'équation d'état thermodynamique

$$\bar{p} = \bar{\rho} R \tilde{T} \quad (\text{II.26})$$

$(\overline{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$: Les tensions de Reynolds de sous-maille.

$(\overline{u_i Y_f} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_f)$ et $(\overline{u_i h} - \tilde{u}_i \tilde{h})$: La diffusion des espèces et le flux de chaleur en soue-maille.

$\bar{\omega}_f$: Le taux de production massique de l'espèce f .

On trouve que les fermetures apparaissent dans les équations ce qui nécessite de modéliser les termes sources et faire intervenir des modèles pour enlever cette fermeture et résoudre ces équations.

*Continuité

*Quantité de mouvement

*Variable d'avancement

*Fraction de mélange

*Etat Thermodynamique

L'énergie totale non-chimique E et la somme des énergies cinétique e_c et l'énergie interne (sensible) e_s du mélange :

$$E = \bar{\rho}[\tilde{e}_c + \tilde{e}_s] = \bar{\rho} \left[\frac{1}{2} \overline{(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)} + \sum_{f=1}^N \tilde{Y}_f \tilde{e}_{s_f} \right] \quad (\text{II.27})$$

L'énergie sensible $\tilde{e}_{s,f}$ de l'espèce f est calculée à partir de la loi thermodynamiques [22], elle est définie par :

$$\tilde{e}_{s_f}(T) = \int_0^T C_{v,f}(T) dT \quad (\text{II.28})$$

Le tenseur des contraintes visqueuses filtré est défini par [27, 29, 30]:

$$\bar{\tau}_{ij} = 2\bar{\rho}\nu(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\tilde{S}_{ll}) \quad , \quad i,j=1,2,3 \quad (\text{II.29})$$

Et :

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad , \quad i,j=1,2,3 \quad (\text{II.30})$$

II.5.3 Modèles de sous-maille

Ce modèle de sous-maille qu'il faut "injecter" toute la physique des écoulements turbulents. Aussi, cette modélisation a fait l'objet d'un nombre considérable d'études que nous n'allons pas résumer ici. On peut par exemple consulter pour une description détaillée de la méthodologie LES [24, 29,32]. On se contentera ici de décrire brièvement les modèles utilisés en explicitant leurs points forts et leurs limites. La fermeture de modèle sous maille pour les équations régissant du système sont présentés ci-dessous. La majorité des modèles de sous-

maille est basée sur l'hypothèse de Boussinesq qui lie le tenseur des contraintes non résolues $\overline{\tau_{ij}}$ Eq(II.29) au tenseur des vitesses de déformation \tilde{S}_{ij} Eq (II.30) par l'intermédiaire d'une viscosité turbulente μ_T [26, 33,34] :

$$\overline{\tau_{ij}} = 2\mu_T \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{ll} \right) \quad (\text{II.31})$$

Le choix du modèle consiste donc à expliciter la viscosité turbulente $\nu_T = \overline{\rho} \mu_T$

II.5.4 Le modèle WALE

Ce modèle est une adaptation du modèle de Smagorinsky et permet d'obtenir une décroissance de μ_T en suivant asymptotiquement une loi en $(y^+)^3$, (y^+ est la distance à la paroi normalisée) [31]. Ce modèle permet de corriger un défaut du modèle de Smagorinsky qui surévalue la viscosité turbulente en proche paroi et ceci à cause des gradients dus à la couche limite [35].

Cette méthode permet de tenir compte du transfert d'énergie des petites structures de l'écoulement vers les grandes (Back-Scatter). Mais elle nécessite l'emploi de limiteurs pour borner les valeurs de μ_T . De plus ce modèle est plus complexe à mettre en œuvre que ceux présentés ici, surtout sur des maillages non-structurés. Le modèle WALE a été développé pour améliorer [27,35]:

- La décroissance de ν_T à la paroi.
- La transition vers la turbulence.

La viscosité turbulente est définie par :

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{s}_{ij}^d \tilde{s}_{ij}^d)^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}} \quad (\text{II.35})$$

Avec :

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2} (\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij} \quad (\text{II.36})$$

Et :

$$\tilde{g}_{ij}^2 = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (\text{II.37})$$

D'après Nicoud et Ducros, la constante C_w varie très peu selon la configuration (contrairement à C_s dans le modèle de Smagorinsky). La valeur de $C_w = 0.49$ si l'écoulement est bi-dimensionnel [27,35].

La complexité des phénomènes physiques intervenant et interagissant dans un écoulement réactif turbulent, nous empêche de résoudre directement les équations locales représentant l'évolution des grandeurs mécaniques et thermodynamiques caractéristiques de ces écoulements. Dans un premier temps, ces équations sont simplifiées en faisant jouer un certain nombre d'hypothèses portant sur la représentation des mécanismes chimiques et sur les propriétés de l'écoulement [36, 33]:

- La cinétique chimique peut être représentée par une réaction globale. Cette hypothèse est très éloignée de la réalité mais nous permet de ne prendre en compte qu'un nombre limité d'espèces chimiques.
- Le nombre de Mach des écoulements que nous étudierons est faible ($Ma < 0.3$).
- Les espèces et la chaleur diffusent de la même manière au niveau moléculaire.
- Les parois des systèmes sont considérées imperméables aux espèces.

L'ensemble de ces hypothèses permet de n'utiliser que deux variables pour connaître la température et les concentrations de toutes les espèces du mélange. La résolution des équations de la mécanique des fluides (quantité de mouvement et conservation de la masse), de la fraction de mélange et de la fraction massique de combustible suffit à caractériser les écoulements considérés, qu'il s'agisse de la combustion non-prémélangée ou de la combustion prémélangée [37-42].

Dans un deuxième temps, le phénomène turbulent nous conduit à utiliser une approche statistique pour prédire l'évolution moyenne de l'écoulement réactif. Les équations pour les quantités moyennes qui résultent de cette approche font apparaître des termes additifs qu'il faut modéliser [23,28,30]. Nous utiliserons dans cette étude le modèle LES « Large Eddy Simulation ». Ce modèle a été développé en premier lieu pour les écoulements d'un fluide inerte. Dans notre cas, ce modèle le doit être adapté pour prendre en compte à la fois la réaction chimique et les effets de variation de la masse volumique. Le développement de méthodes pour fermer les

différents termes des équations est l'objectif principal de ce travail; il est détaillé dans ce chapitre. Pour ce faire nous chercherons à prendre en compte les deux aspects fondamentaux de la combustion turbulente [42-44] :

- l'effet de la turbulence sur la flamme.
- l'effet de la flamme sur la turbulence.

Les différentes structures particulières de flamme turbulente : non-prémélangé et prémélangée partiel ont conduit à l'élaboration de modèle PDF « Probability Density Function » de fermeture que nous allons présenter dans ce qui suit.

II.6 Les modèles de simulation de la combustion non prémélange

Comme pour les flammes non prémélangées turbulentes, et comme pour tout écoulement turbulent, il faut encore insister sur le fait qu'un calcul prédictif ne peut concerner que des quantités moyennes au sens statistique.

II.6.1 Le modèle à PDF

II.6.1.1 La Fraction de mélange

La fraction de mélange, Z , est un paramètre scalaire conservé adimensionnel caractérisant un mélange binaire. Elle n'est pas affectée par les réactions chimiques car elle concerne les éléments et pas les molécules chimiques. La fraction de mélange permet la mesure du degré du mélange du combustible et du comburant. C'est une variable générique de mélange qui représente le montant par rapport à ce que chaque flux de rentrées contribue au mélange local. Lorsque les entrées sont les flux de combustible et le comburant, la fraction de mélange peut être considérée comme établissant le rapport air et combustible ou stœchiométrie du mélange local. Dans la combustion d'hydrocarbure, une des méthodes expérimentales utilisée pour calculer la fraction de mélange est basée sur le calcul des fractions atomiques du carbone et l'hydrogène, quelle que soit la méthode dans la quelle ils se trouvent (Bilger et al 1990). La fraction de mélange peut s'écrire [45,46]:

$$Z = \frac{(Y_H - Y_{H,o}) / (\mu_H M_H) + (Y_C - Y_{C,o}) / (\mu_C M_C)}{(Y_{H,F} - Y_{H,o}) / (\mu_H M_H) + (Y_{C,F} - Y_{C,o}) / (\mu_C M_C)} \quad (\text{II.38})$$

Avec μ_f le nombre d'éléments atomiques « f » contenus dans les réactifs à la stœchiométrie. Par exemple, dans la combustion méthane / air.



$$\mu_C = 1, \mu_O = 4, \mu_H = 4$$

$Y_{H,o} = 0$ est la fraction massique totale des atomes d'hydrogène dans le comburant, $Y_{H,F} = 0.251$, dans le combustible. L'indice C correspond au carbone ($Y_{C,o} = 0, Y_{C,F} = 0.749$). M_F est la masse molaire de l'élément atomique « f ». Y_H et Y_C sont les fractions massiques atomiques qui dépendent du mélange. Elles sont calculées par la relation [45,446]:

$$Y_H = \sum_{f=1}^N \frac{\mu_H^f \cdot M_H}{M_f} Y_f \quad (II.40)$$

Avec μ_H^f le nombre d'atomes d'hydrogène dans l'espèce f . Par exemple $\mu_H^{CH_4} = 4$.

Cette définition permet de conserver la valeur de la fraction de mélange à la stœchiométrie pour de nombreux réactifs, même quand la diffusion différentielle des espèces est significative. Aussi, elle peut être étendue en ajoutant les fractions atomiques de l'oxygène et de l'azote lorsque de nombreuses espèces chimiques interviennent dans le mélange réactifs (CO, OH,...) [42,47].

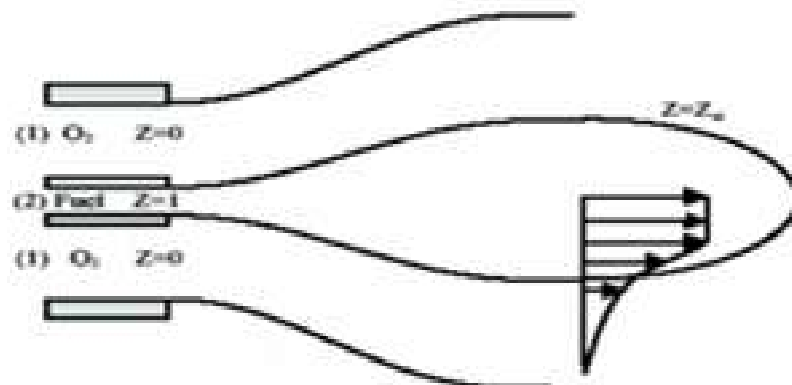


FIG. II.4: Exemple de l'injection non-prémélangée [48].

La fraction de mélange est également un scalaire conservé qui est représentatif des autres scalaires conservés comme la température et la fraction massique des espèces de mélange réactif. Les équations de ces derniers peuvent être formellement dérivée en prenant des combinaisons linéaires des équations de transport des espèces de telle sorte que le terme source de réaction s'annule. L'équation résultant décrira une grandeur physique qui est conservé au cours de la réaction chimique, comme l'enthalpie totale ou la fraction de masse d'un élément chimique particulier. Tout scalaire conservé satisfait l'équation d'advection- diffusion, écrite ici pour la fraction de mélange [48,49,51]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho Z + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Z) = \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \alpha_c \frac{\partial}{\partial x_i} Z) \quad i=1, 2, 3 \quad (\text{II.41})$$

Parce que la conservation de transport scalaire est linéaire, un petit nombre de scalaires conservés formant une base complète est suffisante pour construire tous les autres scalaires conservés par superposition. Un système d'écoulement contenant « N » espèces nécessiterait en général « N » fractions de masses variables, cependant, une seule fraction de mélange suffit pour constituer une base complète sur le même mélange. Par convention, la fraction de mélange permet la mesure du degré du mélange du combustible et du comburant. Les valeurs de Z sont comprises entre 0 *zéro* (dans le comburant) et 1 *un* (dans le combustible) [48,50,51].

II.6.1.2 La variable d'avancement

L'avancement de la réaction ou de la flamme est le résultat d'un grand nombre de réactions chimiques élémentaires. Pour l'hydrocarbure le plus simple, une dizaine d'espèces intermédiaires et une centaine de réactions chimiques sont nécessaires. Cependant, il faut noter que peu de réactions ont de l'influence sur le processus général. Par conséquent, l'avancement chimique peut être représenté par peu de variables et dans le cas le plus simple par une variable d'avancement de la réaction c . Cette variable doit être normalisée, elle varie entre 0 *zéro* (pour le mélange frais) et 1 *un* (pour le gaz brûlé) figure (II.4) [30,48,49].

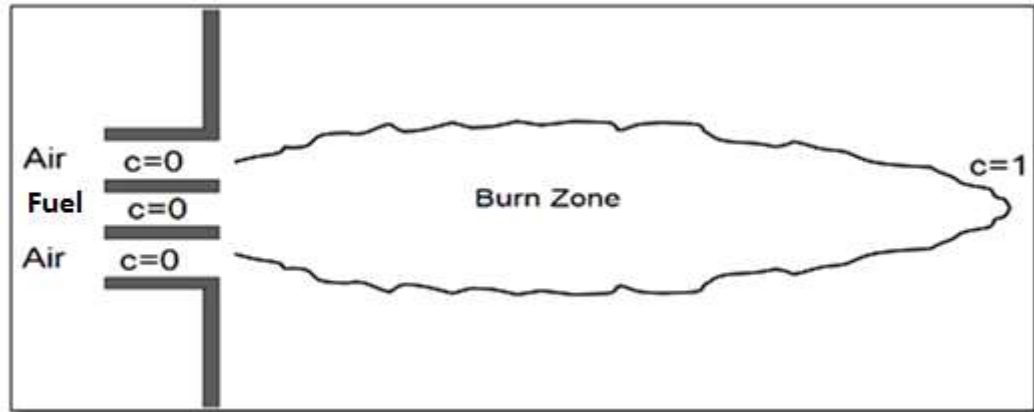


FIG. II.5: Définition de la variable d'avancement [48].

Couramment utilisée dans les flammes prémélangées cette variable peut aussi remplacer le taux de dissipation scalaire de la fraction de mélange ε_z , soit ϕ_i un paramètre physique de l'écoulement [48,51]:

$$\phi_i(Z, \varepsilon_z) = \phi_i(Z, c) \quad (\text{II.42})$$

Dans ce cas, la borne inférieure est limitée par l'avancement de la réaction à l'extinction de la flamme de diffusion. Cette transformation arbitraire permet d'utiliser les mêmes paramètres de contrôle dans un régime de l'écoulement de combustion prémélangé et combustion non-prémélangé, et ainsi faciliter les comparaisons. Il existe plusieurs définitions possibles pour décrire l'avancement global de la réaction. Elles peuvent être définies en fonction des réactifs et des produits de combustion, ou encore de la température. Le choix de la définition de c reste important. Une évolution homogène dans toute la flamme est nécessaire, ce qui écarte les espèces chimiques ayant des cinétiques chimiques trop rapides ou trop lentes. On voit alors apparaître un problème lié au nombre de variables d'avancement: peut-on connaître, pour un mélange donné, le vecteur de concentration des espèces chimiques et la température avec une seule variable d'avancement? Si cela est possible, le surcoût du temps de calcul en chimie complexe devient alors anodin, puisque les 50 (ou plus) équations de transport des espèces chimiques se résument à seulement 2 équations (Z, c) [46,51].

Les fractions massiques des produits de combustion, ou la température, ont un maximum de la variation à la stœchiométrique; elles sont donc des variables privilégiées pour définir l'avancement de la réaction [48].

$$c = \frac{T - T_0}{T_{eq} - T_0} \quad (\text{II.43})$$

$$c = \frac{Y_{CO_2}}{Y_{CO_2}^{eq}} \quad \text{Ou encore} \quad c = \frac{Y_{H_2O}}{Y_{H_2O}^{eq}} \quad (\text{II.44})$$

Il est possible de faire des combinaisons entre les espèces chimiques :

$$c = \frac{Y_{CO_2} + Y_{CO}}{Y_{CO_2}^{eq} + Y_{CO}^{eq}} \quad (\text{II.45})$$

Et :

$$c = \frac{Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O}}{Y_{CO_2}^{eq} + Y_{CO}^{eq} + Y_{H_2O}^{eq}} \quad (\text{II.46})$$

L'équation de transport donnant la variable d'avancement c peut être sous la forme [29,51]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho c + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i c) = \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \alpha_c \frac{\partial}{\partial x_i} c) + \rho \omega_c \quad (\text{II.47})$$

II.7 Généralité du modèle PDF

Les concepts de simulation peuvent être prévus pour fonctionner pour la fermeture des équations du bilan du système, où on utilise des approches de la fonction de densité de probabilité (PDF). Par exemple, la fonction d'état pour la masse volumique Eq (II.26) peut en général être une fonction non-linéaire arbitraire des variables scalaires $P(\phi_1, \phi_2, \dots)$. Si l'on couple le PDF au modèle de sous-maille on obtient, $\bar{\rho}$ connu par la densité filtrée qui peut être évaluée et employée [49,52-55]:

$$\bar{\rho} = \overline{f(\phi_1, \phi_2, \dots)} = \int f(\phi_1, \phi_2, \dots) P(\phi_1, \phi_2, \dots) d\phi_1 d\phi_2 \dots \quad (\text{II.48})$$

Quand le filtrage de Favre est employé pour les variables scalaires, il est plus approprié d'évaluer les quantités filtrées en utilisant le couplage PDF / Favre pour le sous-maille Eq (II.48) sous la forme suivante [51,54-57]:

$$\bar{y} = \int y(\varphi_1, \varphi_2, \dots) \tilde{P}(\varphi_1, \varphi_2, \dots) d\varphi_1 d\varphi_2 \dots \quad (\text{II.49})$$

Où la fonction de densité probabilité filtrée par Favre s'écrit [24, 30, 51, 52, 55, 57-59] :

$$\tilde{P}(\varphi_1, \varphi_2, \dots) = \frac{\rho(\varphi_1, \varphi_2, \dots) P(\varphi_1, \varphi_2, \dots)}{\bar{\rho}} \quad (\text{II.50})$$

La densité filtrée peut être obtenue en utilisant \tilde{P} :

$$\bar{\rho} = \left[\int \frac{\tilde{P}(\varphi_1, \varphi_2, \dots)}{\rho(\varphi_1, \varphi_2, \dots)} d\varphi_1 d\varphi_2 \dots \right]^{-1} \quad (\text{II.51})$$

L'un des objectifs des modèles de combustion turbulente est de déterminer le taux de production moyen engendré par les réactions chimiques. Du fait de la forte non linéarité des taux de production (ou de destruction) des différentes espèces, l'estimation du taux de production chimique moyen n'est pas directe et doit être basée sur une approche phénoménologique. L'analyse décrite au cours du chapitre précédent conduit à une classification des régimes de combustion et permis de développer des modèles adaptés à chaque régime de combustion. Ces différents modèles ont chacun une approche physique du problème de combustion turbulente qui leur est propre. Nous utiliserons une variable d'avancement de la réaction c définie de telle sorte qu'elle soit nulle ($c=0$) dans les gaz frais et égale à l'unité ($c=1$) dans les gaz complètement brûlés. La fraction de mélange Z introduite ici est nulle ($Z=0$) dans l'oxydant pur et égale à l'unité ($Z=1$) dans le combustible pur [47,49,50].

Le taux de réaction chimique moyen peut également être estimé en cherchant à quantifier précisément le mélange que la turbulence engendre entre les gaz frais et les gaz brûlés ou entre le combustible et l'oxydant. Les termes qui représentent ce mélange sont les termes de dissipation scalaire ε_c et ε_Z qui apparaissent dans les équations pour les variances \tilde{c}^2 et Z^2 . Dans le cas des flammes non-prémélangées, comme le combustible et l'oxydant doivent se mélanger pour réagir, le taux de dissipation ε_Z joue également un rôle essentiel. La réaction chimique n'agit pas directement sur ce taux de dissipation scalaire ε_Z mais indirectement par le biais des variations de masse volumique. Les taux de dissipation scalaire ε_c et ε_Z sont des paramètres clés pour la modélisation de la combustion turbulente. Quelle que soit l'approche physique utilisée les taux de dissipation scalaire interviennent directement ou indirectement dans les modèles.

Certaines méthodes proposent d'ailleurs de résoudre directement des équations de transport pour ces quantités [60].

Les propriétés statistiques des champs scalaires, en un point de l'écoulement (moyennes, variances ...), peuvent être déduites de la fonction densité de probabilité (PDF). Contrairement à l'analyse géométrique qui considère souvent la flamme comme une interface, l'utilisation d'une méthode de PDF permet d'obtenir les propriétés statistiques d'états intermédiaires c'est-à-dire dans le front de flamme. $P(c)dc$ est la probabilité que la variable c ait une valeur comprise entre c et $c+dc$ au point x et au temps t . Les quantités statistiques peuvent alors être exprimées à l'aide de la PDF, par exemple [55,60]:

$$\bar{c} = \int_0^1 c P(c; x, t) dc \quad \text{et} \quad \overline{c^2} = \int_0^1 (c - \bar{c})^2 P(c; x, t) dc \quad (\text{II.52})$$

La PDF doit être normalisée, ce qui permet d'écrire la relation suivante :

$$\int_0^1 P(c; x, t) dc = 1 \quad (\text{II.53})$$

Lorsque plusieurs variables sont nécessaires pour décrire la structure de la flamme, une PDF doit être utilisée. Si les variables sont la fraction de mélange et l'avancement de la réaction, la PDF s'écrit $P(c, Z; x, t)$. Une quantité statistique dont la valeur locale et instantanée est fonction de ces deux variables, comme par exemple le taux de réaction chimique moyen s'écrit alors :

$$\overline{\omega_c} = \int_{Z_1}^{Z_2} \int_0^1 \omega_c P(c, Z; x, t) dz dc \quad (\text{II.54})$$

On peut noter que Klimenko et Bilger ont proposé d'utiliser des fermetures pour ces moyennes, cette démarche semble a priori bien adaptée pour les flammes non-prémélangées puisque la réaction chimique se produit préférentiellement au voisinage des conditions stœchiométrique. Les modèles de la turbulence basés sur l'approche statistique de PDF sont de deux types différents [24,60]:

- Les modèles à PDF présumée.
- Les modèles à PDF transportée.

II.8 Types de l'approche PDF

II.8.1 Le modèle à PDF transportée

Le second type de modélisation consiste à résoudre une équation de transport de la PDF. Ces méthodes ont l'avantage de pouvoir prendre en compte précisément la chimie et donc d'être a priori applicable à tous les régimes de combustion. En particulier, tous les termes définis en un point, comme le taux de réaction chimique moyen, peuvent être calculés. Lorsque la masse volumique varie, il est plus pratique d'utiliser une PDF définie au sens de Favre, c'est-à-dire, pondérée par la masse volumique, soit $\tilde{P}(c; x, t)$ telle que [30,35,46] :

$$\tilde{P}(c; x, t) = \frac{\rho P(c; x, t)}{\rho} \quad (\text{II.55})$$

Le premier problème rencontré lorsque le temps chimique est considéré infiniment petit, est lié à la définition de ce temps caractéristique. En effet, le schéma cinétique réactionnel ne conduit pas à un seul mais à plusieurs temps caractéristiques chimiques qu'il faudrait tous comparer aux temps caractéristiques de la turbulence. Dans notre cas, comme nous considérons que les nombres de Lewis sont tous égaux à un ($Le=1$), que le milieu est imperméable et que la combustion peut être représentée par une réaction globale alors un seul temps chimique est considéré, donc une seule variable est nécessaire pour caractériser la combustion.

Si ces approximations sont réalistes, alors la PDF du variable d'avancement de la réaction c suffit à calculer le taux de réaction chimique moyen. Les travaux menés par O'Brien et Dopazo, puis par Pope aux Etats-Unis et par Frost en ex-URSS ont conduit, les premiers, à l'écriture d'une équation de bilan qui permet le calcul direct de la PDF $\tilde{P}(c)$ [30,46,60]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{\rho \tilde{P}(c)} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho \tilde{v}_i} \tilde{P}(c)) &= \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_f} (-\overline{\rho \tilde{v}'_f} \tilde{P}(c))}_{\text{turbulent - convection}} \\ &- \underbrace{\sum_f \sum_f \frac{\partial}{\partial c} \frac{\partial}{\partial c} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Y_f}{\partial x_i} \frac{\partial Y_f}{\partial x_i}} \right)}_{\text{Moléculaire-Mix}} \tilde{P}(c) \\ &- \underbrace{\sum_f \frac{\partial}{\partial c} \overline{\rho \omega_f}}_{\text{Réaction-chimique}} \tilde{P}(c) \end{aligned} \quad (\text{II.56})$$

Il s'agit de la généralisation du calcul de la PDF au cas où cette dernière est multidimensionnelle, avec des espèces réactives. L'équation de PDF d'une espèce réactive, définie par sa fraction massique est repérée par la variable d'avancement c . Il est tout à fait possible de généraliser une telle équation pour la PDF multidimensionnelle avec des variables associées à plusieurs espèces réactives et à la température. Il suffit de considérer que c est un vecteur de variables les Eq (III.10) et (III.13).

La modélisation des termes de mélange et de diffusion turbulente ne nécessite pas d'approche différente par rapport au cas d'une seule variable. Certaines des variables peuvent n'être pas réactives, et dans ce cas elles n'ont pas de terme de réaction, le seul problème posé par cette approche est dû au nombre de variables de P ; déjà dans la flamme stationnaire en moyenne, tridimensionnelle avec une variable de combustion, il y en a quatre. Si la schématisation adoptée pour la chimie utilise une cinétique à quatre réactions, ce qui est peu, on aura alors neuf variables.

Ces approches, pour les flammes de diffusion, se base sur une description statistique de l'écoulement. Ces modèles sont très complexes à mettre en œuvre et sont rarement utilisés dans des codes LES. Il y a beaucoup des problèmes d'intérêt pratique où une chambre de combustion est alimentée avec un combustible liquide dans un milieu turbulent (voir [39,55]), par exemple, dans un moteur diesel de voiture ou un moteur d'injection direct du carburant.

Conclusion

La qualité souhaitée dépend du contexte industriel de l'étude. Son influence doit être prise en compte : le modèle $k-\varepsilon$ base sur l'unicité de l'échelle, ce qui fait négligé les autres échelle, de plus il se base sur des constantes empirique pour écrire la forme finale des équation du modèle. Cependant le modèle LES offre plus de considération des tailles des échelles, ainsi que l'indépendance des constantes semi-empiriques [35]. Les limitations du modèle $k-\varepsilon$ aux zones proches des frontières solides nécessitent des modèles auxiliaires. Néanmoins, LES propose l'approche WALE de la viscosité turbulente, qui caractérisé par ça capacité de calcule soit proche ou proche des parois [24, 35].

Nous avons présenté les différentes démarches pour calculer les fractions massiques des réactifs ainsi que le taux de réaction chimique moyen dans un mélange combustible. Quelle que soit l'approche du problème utilisée ce taux de réaction chimique moyen est directement ou indirectement dépendant du mélange turbulent. Ce mélange turbulent est quantifié par

l'utilisation des paramètres scalaires de contrôle de la combustion (\tilde{Z}, \tilde{c}) qui forment les termes de micro mélange dans l'équation de PDF transporté Eq (III.6). Le modèle du PDF présumée que nous décrivons dans cette partie de thèse utilise une approche qui permet de prendre en compte un temps chimique fini sans utiliser une équation pour la PDF. Le taux de réaction chimique moyen est alors facilement calculé mais un modèle algébrique pour la dissipation scalaire est nécessaire puisque l'équation pour ce terme n'est pas résolue. Par ailleurs, le PDF transporté cherche à représenter l'effet de la turbulence sur la flamme mais ne prend pas en compte l'effet inverse de la flamme sur la turbulence. Cet effet qui peut être représenté par la modification de la forme des flux turbulents est tout autant important car la turbulence, modifiée par la présence de la flamme, va ensuite agir sur le mélange des espèces [32].

Nous avons choisi de calculer une équation de transport pour la fraction de mélange Z dans les calculs en chimie complexe pour la combustion non-prémélangée. Ces définitions de la fraction de mélange permettent de faire des comparaisons entre les calculs en chimie complexe et l'expérience avec des incertitudes qui restent raisonnables. L'objectif est de capturer le vecteur de concentration d'espèces chimiques et la température, lorsque la fraction de mélange, Z , et l'avancement de la réaction, c , sont fixés. A la lumière des résultats obtenus, les vecteurs de vitesse et de la température ont été retenus pour les flammes non-prémélangée .

L'objectif de ce chapitre, est de traiter la combustion turbulente non-prémélangée, en choisissant le modèle LES-WALE comme un modèle de la turbulence pour ces motifs :

- C'est le plus convenable pour les géométries complexes et les écoulements turbulents 3D.
- Sa bonne précision par rapport aux autres modèles lorsqu'il considère différentes longueurs des échelles.
- Moins des équations dans le bilan des équations du mouvement.
- Indépendance aux constantes semi- empiriques.
- La capacité de calculer les paramètres dynamiques loin ou proches des parois solide.

Sa performance dans les écoulements réactifs et les écoulements exothermiques. En plus, ça capacité de couplage avec les modèles de combustion

- L'avantage de l'utilisation des PDF est dans l'évaluation de la moyenne des paramètres scalaires et sans le besoin de calculer les termes sources de production des espèces.

- Traite bien les cas où il y a plusieurs espèces chimiques.
- Est compatible avec l'approche « LES ».

Chapitre III

Résultats et Discussion

L'objectif de ce chapitre est le calcul et l'interprétation des résultats obtenus par le code FLUENT-CFD pour la combustion non prémélangée turbulent dans une chambre cylindrique trois dimensions alimenté par deux jets coaxiaux (méthane ou propane/air). En outre, dans cette partie, nous validons les performances du modèle LES-WALE couplé à l'approche Beta-PDF avec les données expérimentales dans les mêmes stations et les mêmes conditions.

III.1 Configuration expérimentale et Domaine d'application

III.1.1 La configuration expérimentale

La configuration des deux jets coaxiaux qui confinent la chambre de combustion est donnée dans la figure III.1. Là où il a fait l'objet de nombreuses recherches expérimentales en raison de sa géométrie relativement simple et sa similitude avec la turbine à gaz brûleur [60]. De ce fait, nous avons étudié la validation numérique des modèles LES / PDF avec les données expérimentales, pour étudier le comportement de la combustion non prémélangée alimentée par les carburants CH_4 et C_3H_8 . Considérant que, l'étude se compose de trois paramètres: vitesse axiale moyenne, la température moyenne et la fraction massique moyenne de monoxyde carbone. La chambre de combustion cylindrique de rayon $R_4=0,06115$ m et longueur $L=1$ m fournie par deux jets coaxiaux, le jet centrale présente par un rayon interne $R_1=0,03157$ m et un rayon externe $R_2=0,03175$ m, qui injecte du méthane avec une débit massique $Q_1 = 0,0072$ kg /s et de la température $T_1=300$ ° K. et le jet annulaire a un rayon interne $R_3=R=0,04685$ m, qui injecte l'air avec une débit massique $Q_2=0.137$ kg / set préchauffé à une température $T_2 = 750$ K. La chambre de combustion est mis sous pression à 3,8 bars et a une paroi à température constante de $T_{\text{wall}}=500$ K [60].

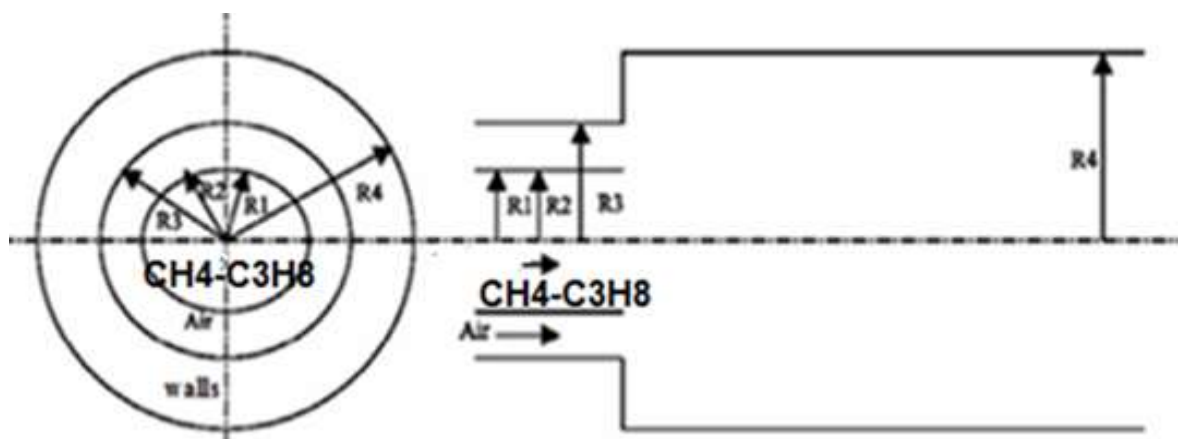


FIG.III.1: Schématisation du brûleur [48].

III.1.2 les équations

Dans cette partie du travail, nous étudie le comportement d'une combustion turbulente non prémélangée en trois dimensions à l'aide de la simulation numérique. Nous pouvons écrire les équations pour un écoulement compressible en coordonnées cartésiennes comme suit: [61, 62]:

Continuité:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{III.1})$$

Continuité de mouvement:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho}(\overline{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} \quad (\text{III.2})$$

Fraction de mélange:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{c})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{c})}{\partial x_i} = -\frac{\partial \tau_c}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} a_c \frac{\partial}{\partial x_i} \tilde{c}) + \bar{\rho} \dot{\omega}_c \quad (\text{III.3})$$

Variable d'avancement:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Z})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{Z})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} a_c \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i}) \quad (\text{III.4})$$

Etat Thermodynamique:

$$\bar{P} = \bar{\rho} R \tilde{T} \quad (\text{III.5})$$

$$i = 1,2,3 \text{ and } j = 1,2,3$$

Les nombreux modèles de la sous-grille sont basés sur l'hypothèse de Boussinesq qui présente le tenseur des contraintes non résolues τ_{ij} à la vitesse du tenseur de déformation \tilde{S}_{ij} par l'intermédiaire d'une viscosité turbulente. Les petites échelles influencent les grandes échelles via le stress SGS [61, 62]:

$$\bar{\tau}_{ij} = 2\bar{\rho} \nu_T \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \bar{\rho} \tilde{K}_{ll} \delta_{ij} \quad (\text{III.6})$$

Où k_{ll} est l'énergie cinétique sous-maille.

Le tenseur des taux de déformation filtrée est définie par [61, 63,64]:

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{1}{3} \tilde{u}_{ll} \delta_{ij} \quad (\text{III.7})$$

Nous avons choisi le modèle de viscosité turbulente WALE pour représenter le terme de viscosité turbulente dans l'équation (III.8). L'idée principale de ce modèle est de récupérer le bon comportement de la viscosité de Foucault à proximité de la paroi dans le cas des flux avec parois, tout en conservant des propriétés intéressantes telles que la capacité de fournir aucune eddy viscosité en cas de fuite turbulence [63].

L'intérêt majeur de ce modèle repose d'abord sur le fait qu'il a besoin d'aucune information sur la direction et la distance de la paroi étant ainsi vraiment adapté pour des maillages non structurés, où l'évaluation d'une distance par rapport à la paroi est précaire. La contrainte résiduelle tenseur du modèle de viscosité turbulente WALE peut être trouvé en tant que [65]:

$$v_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij}^d \tilde{S}_{ij}^d)^{5/2} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}} \quad (\text{III.8})$$

$$S_{ij}^d = \frac{1}{2} (\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij} \quad (\text{III.9})$$

$$\tilde{g}_{ij} = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (\text{III.10})$$

c_w : modèle constant WALE ($c_w = 0,49$).

Le Δ est la largeur du filtre spatial, qui est généralement liée à la taille de la grille du champ résolu.

Nous utilisons dans cette approche de PDF de travail en tant que fermeture SGS dans LES de méthane non-prémélangée turbulent méthane et propane/air. Le fichier PDF en commun de la SGS est déterminée par la solution de l'équation de transport modélisé [61, 62, 63].

III.2 Résultats et discussion

Dans cette section, nous commençons par la validation des les modèles couplés décrits précédemment avec les données expérimentales. Les résultats sont validés dans les mêmes stations et que définies dans l'expérience [48].

En outre, les mêmes paramètres utilisés pour la validation sont également utilisés pour contrôler le comportement de la flamme fournie par les $\text{CH}_4/\text{C}_3\text{H}_8$. la comparaison des résultats sont basés sur la longueur et la vitesse de normalisation en utilisant, respectivement, le rayon d'injecteur ($R \equiv R3$) et la vitesse apparente d'entrée de l'air ($U \equiv V2$).

III.2.1 Validation des modèles numériques

III.2.1.1 Vitesse Axial

Les figures III.2 illustrent la comparaison des profils radiaux de la vitesse axiale moyenne obtenue par le calcul de modèles couplés LES_WALE / PDF et les données expérimentales [48].

En fait, les résultats numériques atteignent de manière significative un bon accord avec les données expérimentales. De ce fait, les valeurs négatives de la vitesse axiale dans la direction $x/R=0,14, 0,38$ et $1,27$, les régions de recirculation. Où, on observe la formation de deux zones de recirculation. Le premier situé dans le centre du brûleur dans le niveau du jet de carburant, générée par l'écoulement retardé du méthane. Et le second provoqué par le changement brutal dans la section de brûleur comparativement aux jets coaxiaux. Cependant, les valeurs élevées de la vitesse sont situés dans la zone de flamme qui est présenté par le pic ($x/R = 0,14, 0,38$ et $1,27$); où il a disparu dans la dernière station ($x/R = 4.67$). La divergence peut être due au fait que les conditions de carburant et d'entrée d'air entièrement développées ont été supposées dans les simulations. Ainsi, l'incertitude relative moyenne entre le calcul et l'expérience est par 7%.

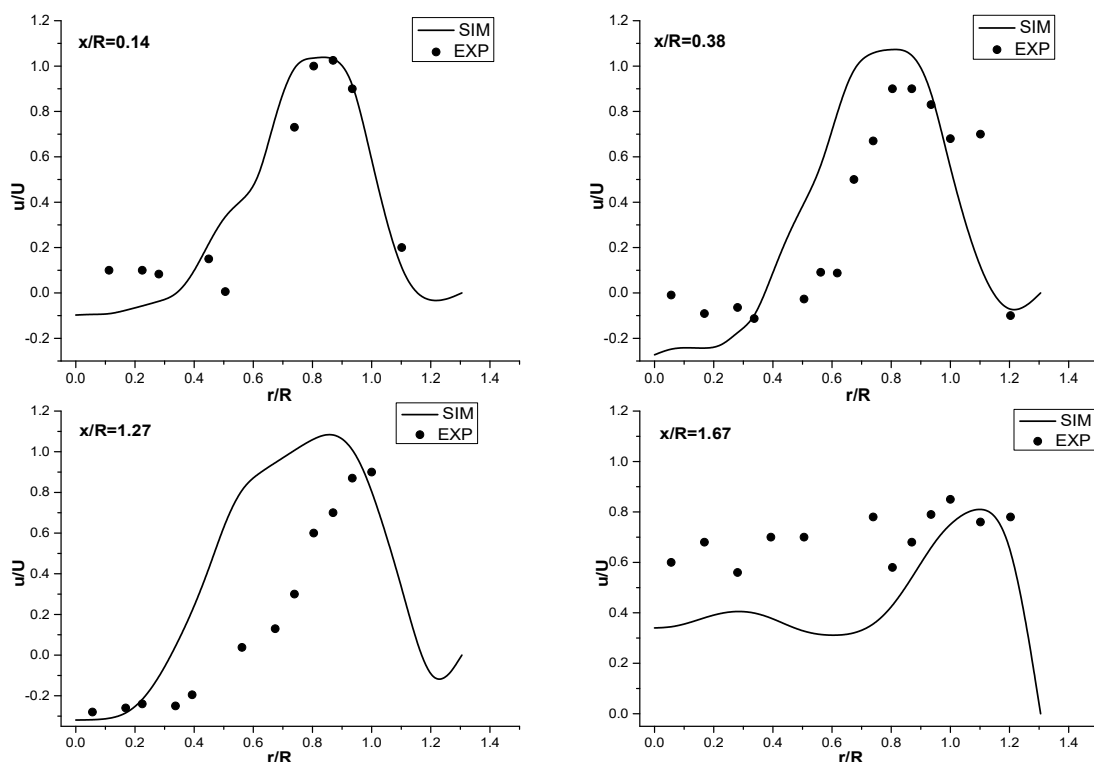


FIG.III.2: Profils radiaux de la vitesse axiale moyenne. Simulation (LES / PDF), • Expérience [48].

III.2.1.2 Température

La comparaison des profils radiaux prévus de la température moyenne des expériences des différentes stations ($x/R=0,89, 1,57, 4,52$ et $5,20$) dans le brûleur est présenté dans les figures III.3, les profils numériques et expérimentaux ont presque la même tendance. Considérant que, les profils caractérisés par le sommet qui a présenté la zone de flamme, où il assis sur les couches de cisaillement qui est la même zone où le carburant et l'air se rencontrent. La zone de cisaillement est crée pour améliorer le mélange des deux jets coaxiaux flux pour alimenter la chambre de combustion en mélange riche. Considérant que, les valeurs élevées de température sont situés autour de la région de la flamme et la température commence diminution avec la distance radiale pour atteindre la température de la paroi. De ce fait, ce désaccord est dû aux régions avec de grandes variations de température et de la difficulté à assurer parfaitement l'état d'expérimentation des parois isothermes de refroidissement avec au 500K [64]. La moyenne de l'incertitude relative entre la simulation et l'expérience est donnée par 10% .

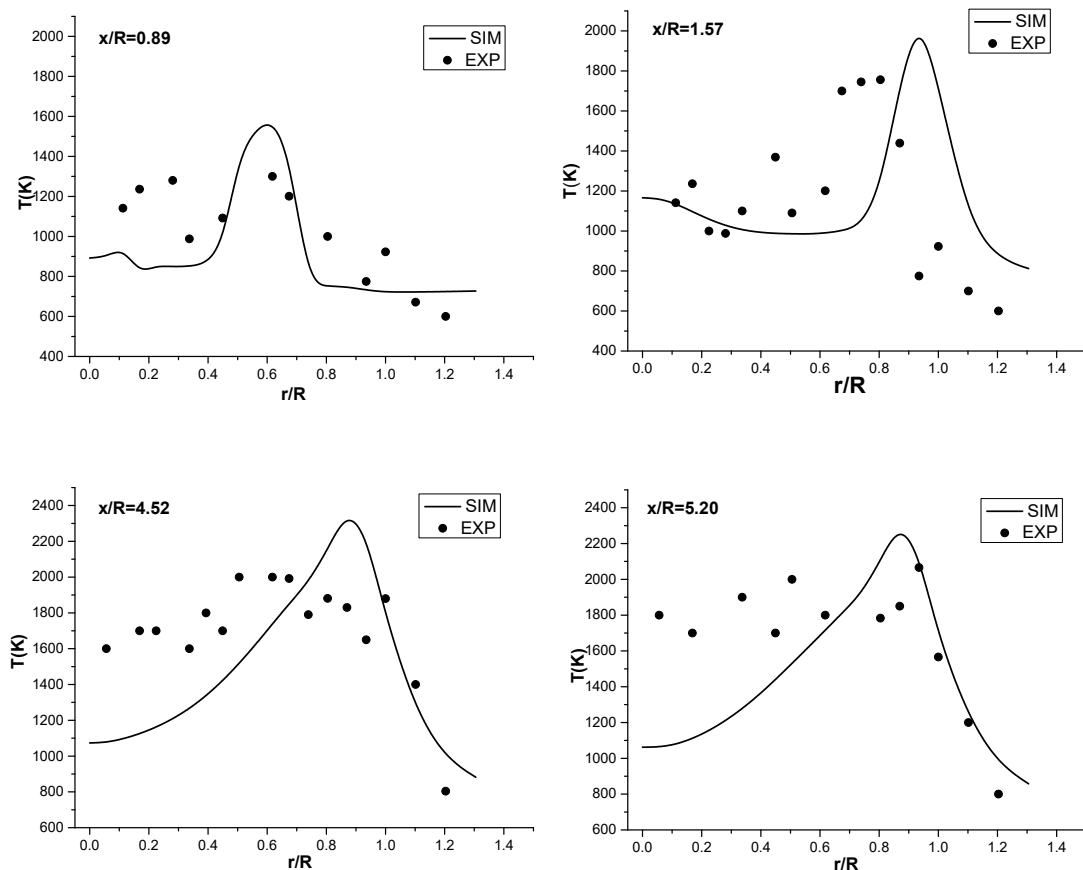


FIG.III.3: Profils radiaux de la température moyenne. Simulation (LES / PDF), • Expérience [48].

III.2.1.3 Fraction massique du monoxyde de carbone

Les figures III.4 illustrent la comparaison de la distribution radiale prédite et expérimentale de la fraction massique de monoxyde de carbone pour les différentes stations du brûleur. Le calcul prédit ainsi que les valeurs de la fraction massique du CO relativement à des données expérimentales. En effet, les valeurs de hauteur de la fraction massique de CO située dans le centre de la chambre de combustion, ce qui diminue en allant du centre du brûleur. Les profils de fraction massique du CO ont la même tendance avec les profils de température qui expliquent que les valeurs élevées de CO dans la zone de flamme, de la zone de réaction et la production de CO. Dans la première station, $x/R=0,21$, les valeurs de CO sont faibles relativement aux trois autres stations. Cependant, dans les stations de repos ($x/R=3,16$, $3,84$ et $7,41$), le mélange de méthane et de l'air est causée par l'effet de la turbulence, qui permet leur mélange et la combustion afin de produire du CO avec des valeurs élevées. Le désaccord entre le numérique et l'expérience est donnée par 5%.

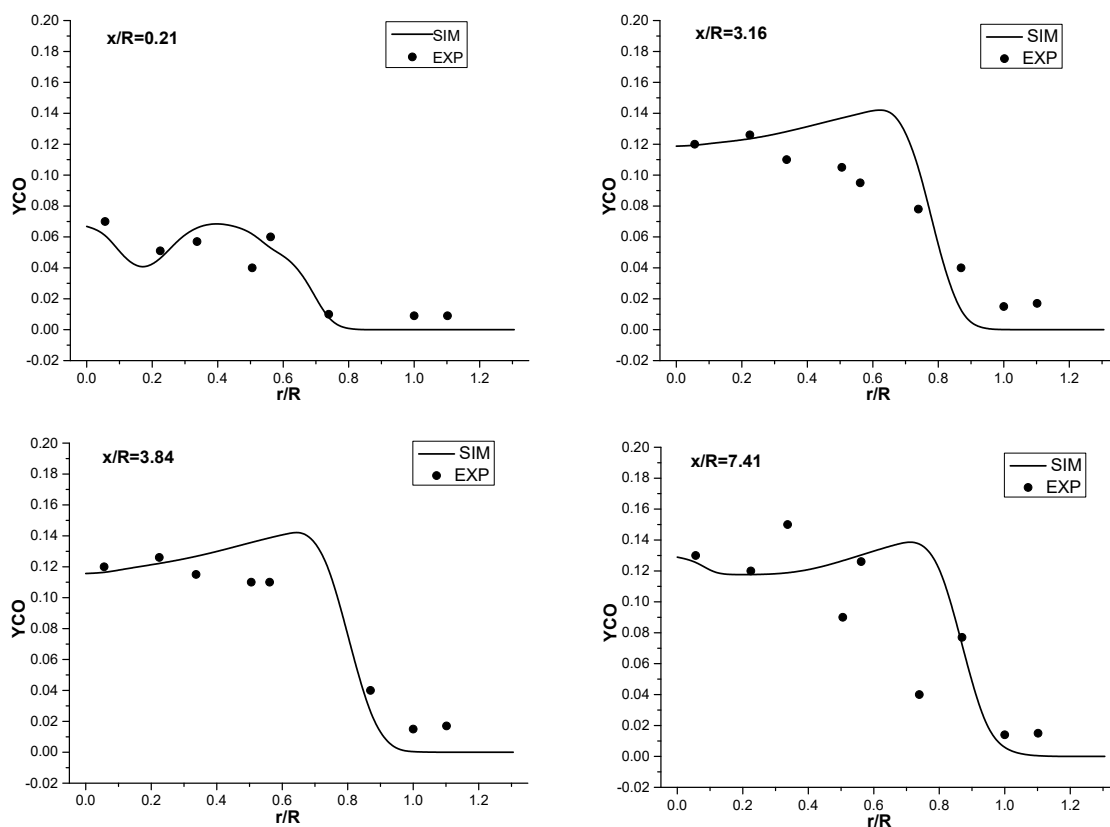
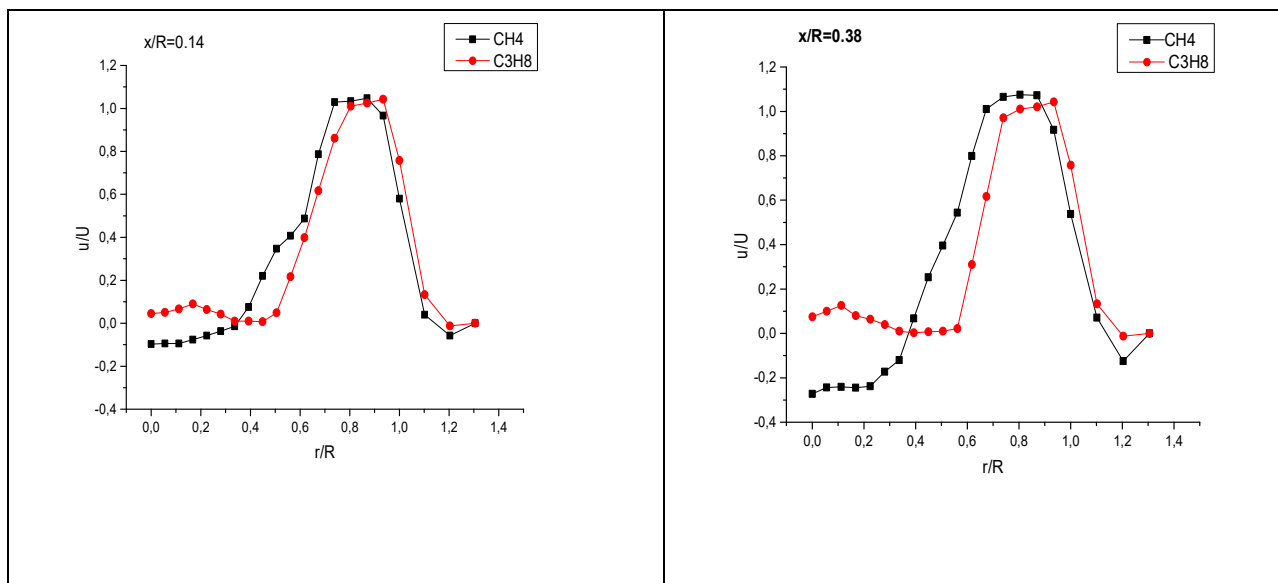


FIG.III.4: Profils radiaux de la fraction massique du monoxyde de carbone en moyenne. Simulation (LES / PDF), • Expérience [48].

III.2.2 Comparaison de CH_4 & C_3H_8

III.2.2.1 vitesse Axiale

La comparaison entre la vitesse axiale moyenne du méthane et du propane dans les différentes stations $x/R=0.14, 0.38, 1.27$ et 4.67 à l'intérieur de la chambre de combustion illustrent sur les figures III.5. On peut observer que les profils radiaux de la vitesse axiale de deux combustibles ont la même tendance, lorsque la différence entre les deux profils est petite est donnée par 5%. Les valeurs de la vitesse axiale élevées au niveau de jet d'air présentées par les pics dans les stations $x/R=0,14, 0,38$ et $1,27$, où il se trouve dans la zone de la flamme. Dans cette zone, les valeurs de rapport de vitesse est supérieur à 1. On peut voir aussi des valeurs négatives dans les profils de vitesse qui montrent les régions de recirculation: dans le centre du brûleur et à proximité des parois. La quatrième station $x/R=4.67$ est disparues lorsque nous nous éloignons à l'entrée de la chambre de combustion. On observe que la vitesse du méthane est supérieure à la vitesse du propane provoquée par la masse molaire de méthane inférieure à la masse de propane.



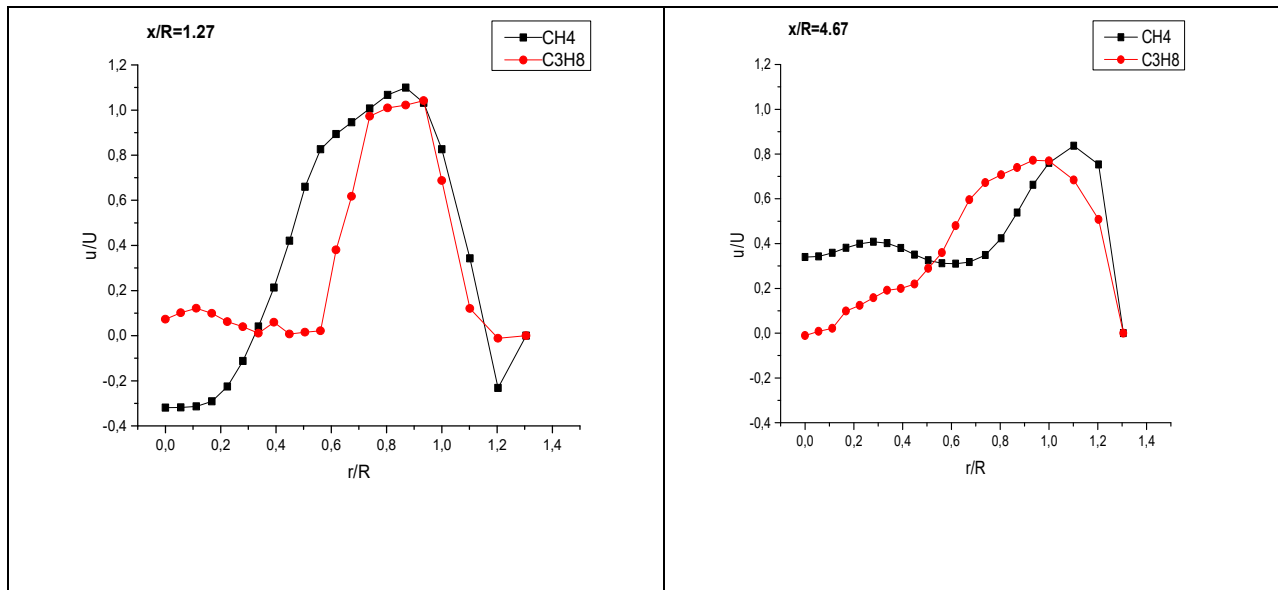
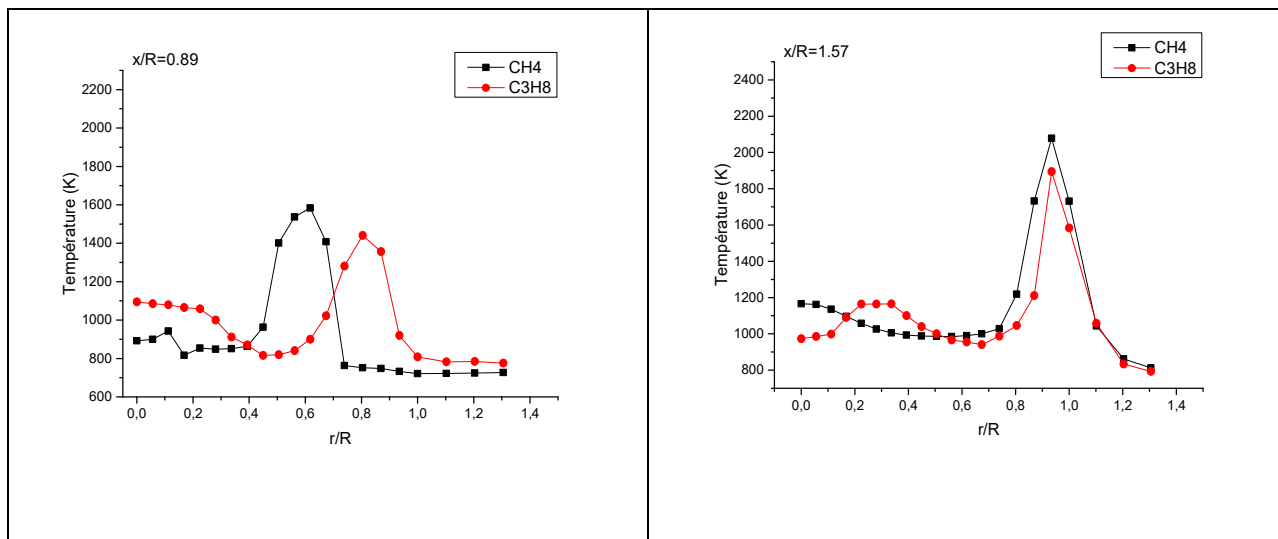


FIG. III.5: Comparaison de la vitesse axiale entre C_3H_8 et CH_4

III.2.2.2 Température

Les figures III.6 présentent la différence distributions des températures entre le CH_4 et le C_3H_8 dans la chambre de combustion. Les profils radiaux ont la même tendance pour les deux combustibles surtout dans les trois dernières stations avec la différence de 7%. Dans la première station $x/R=0.89$ le profil de la température du propane décalé au niveau de jet d'air. Les valeurs élevées de la température sont situés dans la zone de la flamme, car cette zone est la même zone de réactions chimiques, et ces réactions sont considérées comme des réactions exothermiques, Dans la zone de la flamme les profils de la température présentent par les pics dans les stations définie par $x/R=0.89$, 1.57, 4.52 et 5.20, et diminuent ensuite pour égaler la température des parois égale à $T=500$ K. Les valeurs de la température diminuent lorsque nous nous éloignons de la zone de flamme. La différence de la température du CH_4 et C_3H_8 peut être interprétée par la différence de température adiabatique que chaque caractéristique de fumée.



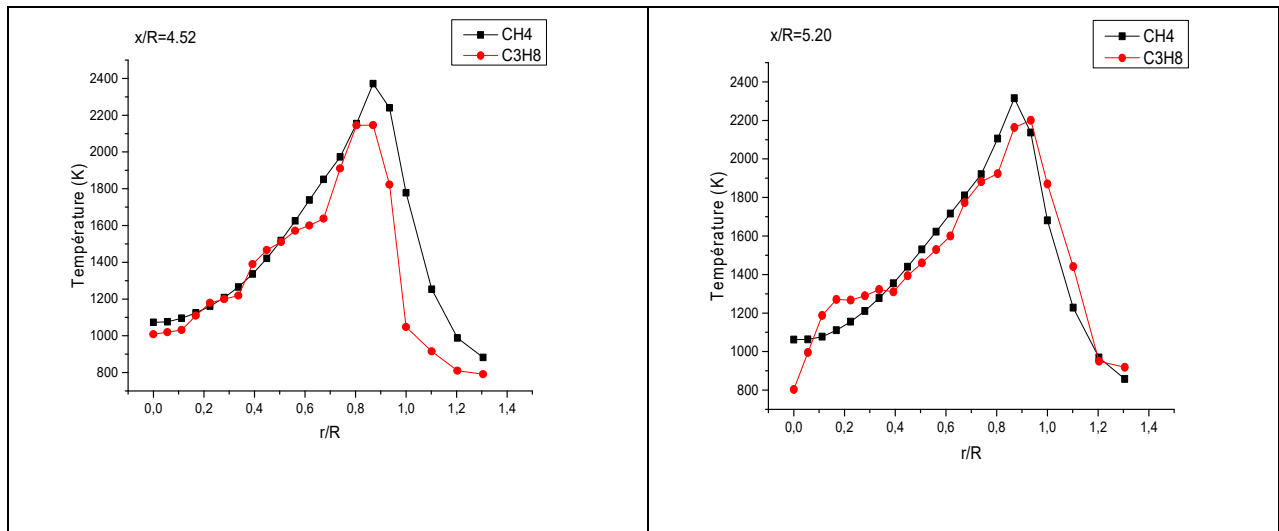
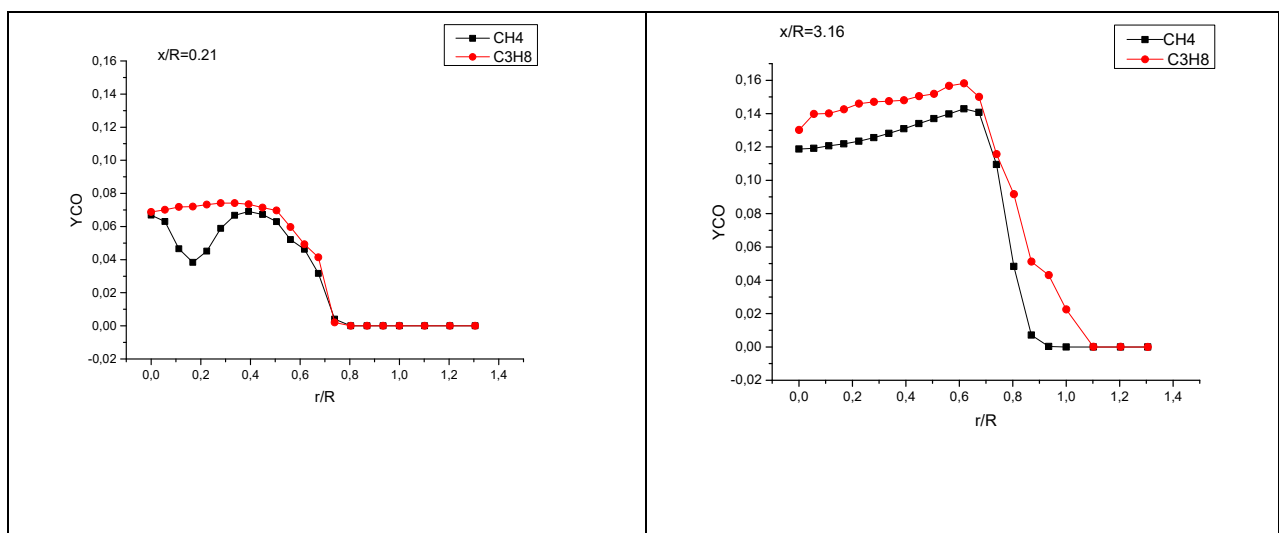


FIG.III.6 : Comparaison de la température entre C_3H_8 et CH_4

III.2.2.3 Fraction massique de monoxyde de carbone

Les figures III.7 montrent une comparaison entre la fraction massique du CO résultant de la combustion du méthane et du propane. Les profils radiaux de la fraction du monoxyde de carbone présentent par les stations $x/R=0.21$, 3.16, 3.84 et 7.41. La différence entre les deux courbes des profils de la fraction massique du CO résultant de la CH_4 et C_3H_8 est d'environ 3%. A l'entrée de la chambre de combustion, la valeur du CO est considérable, en particulier dans la première station $x/R=0.21$, et le produit du monoxyde de carbone CO par la combustion du CH_4 est moins du C_3H_8 . La deuxième et la troisième station $x/R=3.16$ et 3.84, la fraction massique du CO ont la même tendance à la station d'aperçu. À la quatrième station $x/R=7.41$, les valeurs du CO produit par le CH_4 et C_3H_8 élevée par rapport les valeurs du CO produit par les stations précédentes. En générale, Les résultats montrent clairement que la valeur du monoxyde de carbone CO du propane est quantité élevée que méthane.



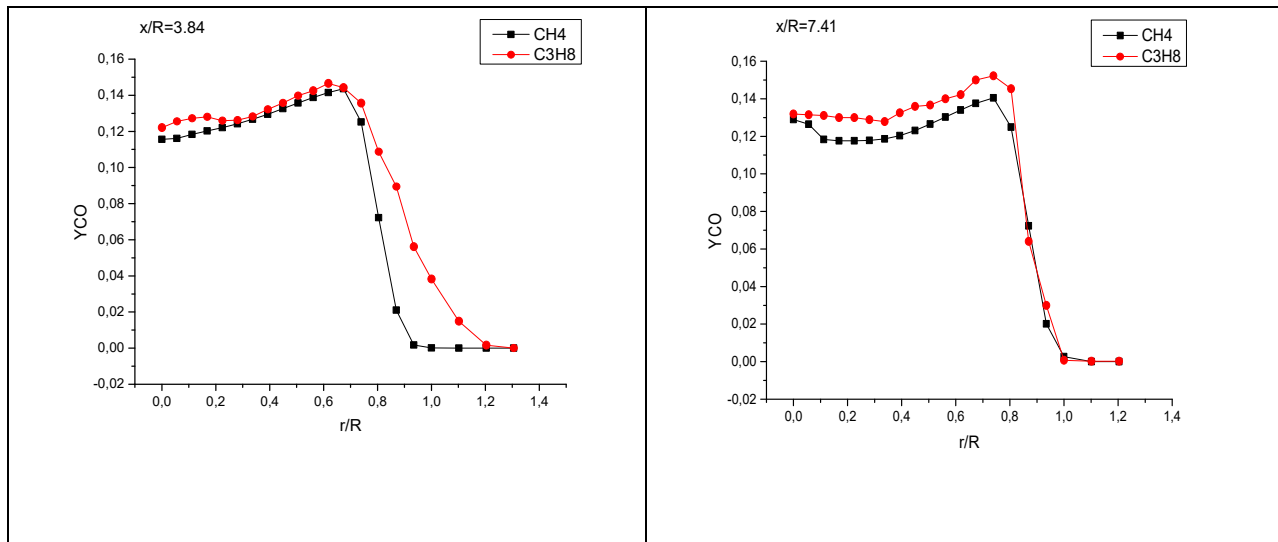


FIG. III.7: Comparaison de fraction massique du CO entre le C₃H₈ et CH₄

Conclusion

Dans ce papier, nous avons exposé les résultats obtenus par la simulation numérique à l'aide d'outils CFD-FLUENT dans la combustion non prémélangée turbulente alimentée par méthane-propane/air. En outre, nous avons étudié numériquement avec le modèle LES-WALE couplé avec l'approche Beta-PDF dans la chambre de combustion 3D. En outre. Finement, nous concluons les résultats obtenus dans cette étude:

- les résultats de la simulation numérique sont en accord avec les données de référence expérimentales;
- L'émission du monoxyde de carbone moins existante pour la combustion de méthane par rapport de c'elle de propane puisque le méthane a un élément de carbone mais le propane a trois élément;
- La température plus élevé pour le carburant de méthane par rapport à carburant de propane, dans différentes stations;
- La vitesse de méthane est plus rapide que c'elle de propane puisque la masse molaire de méthane plus petite que propane;

Conclusion générale

Dans le présent travail, une étude de simulation de la combustion de méthane et de propane dans une chambre de combustion. Alors, Nous avons utilisé FLUENT-CFD dans le calcul numérique basé sur des équations aérothermochimiques pour le contrôle du champ de température, la vitesse axiale et de la distribution de la fraction massique du monoxyde de carbone. De plus, nous avons utilisé pour ces modèles mathématiques objectives, en particulier LES pour les paramètres dynamiques et PDF pour les paramètres thermochimique afin de réduire le nombre d'équations. Finement, nous concluons les résultats obtenus dans cette étude:

- On applique le modèle LES-WALE pour donner la capacité de détecter la morphologie de l'écoulement, à savoir la zone de la flamme, les zones de recirculation présentées dans les données expérimentales. Cette modèle permet de calculer la vitesse directement dans la zone proche des parois. Toutefois, les autres modèles dynamiques nécessitent l'intervention des modèles auxiliaires;
- On utilise l'approche PDF pour l'aider dans l'évaluation de la moyenne des paramètres scalaires et cela sans le besoin de calculer les termes sources de production des espèces. Aussi, ce modèle offre une réduction du nombre des équations du système une fois la fraction de mélange et la variable d'avancement sont intégrées. Ceci a comme conséquence la minimisation du temps de calcul;
- L'émission du monoxyde de carbone moins existante pour la combustion de méthane par rapport de celle de propane puisque le méthane a un élément de carbone mais le propane a trois élimant;
- La température plus élevé pour le carburant de méthane par rapport à carburant de propane, dans différentes stations;
- La vitesse de méthane est plus rapide que celle de propane puisque la masse molaire de méthane plus petite que propane;

Grâce à ces résultats, nous concluons que le carburant de méthane est mieux que le propane, qui est plus propre et moins nocifs pour l'environnement par rapport le propane

Références

- [1] Solène de Ferrieres, *Combustion des mélanges gaz naturel/Hydrogène dans des flammes laminaires prémélangée. Étude expérimentale et modalisation*, Thèse de doctorat. Université des Sciences et Technologies de Lille, France 2008.
- [2] M. Belacel, B. Mahmah, N. Salhi and G. Morsli, *La technologie d'un nouveau carburant: 'Mélange gaz naturel/hydrogène'*, Revue des Energies Renouvelables, SIENR'12, Ghardaïa, pp.41–47 (2012).
- [3] F.Bouras, *Simulation de la combustion turbulente non-prémélangé par le modèle «L.E.S»*, Thèse de magistère, Université de HL Batna, Algérie 2006.
- [4] .S.A. Hashemi, A. Fattahi G.A. Sheikhzadeh, M.A. Mehrabian. *Etude numirique de l'effet de la turbulence de l'air en la formation de NO en la combustion de la melange hydrogen hydrocarbon fuel* . international journal of hydrogen energy 36 pp 10159-10168 (2011).
- [5]. S. Orhan Akansu, Nafiz Kahraman, Bilge Ceper. *Experimental study on a spark ignition engine fuelled by methane–hydrogen mixtures*. International Journal of Hydrogen Energy 32 pp 4279– 4284 (2007).
- [6]. Babak Kashir, Sadegh Tabejamaat. *A numerical study on the effects of H₂ addition in non-premixed turbulent combustion of C₃H₈ -H₂-N₂ mixture using a steady flamelet approach*. international journal of hydrogen energy 38 pp 9918-9927 (2013).
- [7]. Yingjia Zhang, Liangjie Wei, Jiaxiang Zhang, Chung K. Law. *Experimental and modeling study on ignition delays of lean mixtures of methane, hydrogen, oxygen, and argon at elevated pressures* .Combustion and Flame 159 pp 918–931 (2012).
- [8]. Jinhua Wang, Zuohua Huang, Chenglong Tang, Haiyan Miao, Xibin Wang . *Numerical study of the effect of hydrogen addition on methane–air mixtures combustion* international journal of hydrogen energy 34 pp 1084–1096 (2009).
- [9].Haifeng Wang, Yiliang Chen. *PDF modelling of turbulent non-premixed combustionwith detailed chemistry*. Chemical Engineering Science 59 pp 3477– 3490 (2004).
- [10]. F. Tabet, B. Sarhm,I.Gokalp. *Hydrogen–hydrocarbon turbulent non-premixedflame structure*. international journal of hydrogen energy 34 pp 5040–5047 (2009).
- [11]. Evatt R. Hawkes, Jacqueline H. Chen. *Direct numerical simulation of hydrogen-enriched lean premixed methane–air flames*. Combustion and Flame 138 pp 242–258 (2004).

- [12]. J.P. Bingue, A.V. Saveliev, Lawrence A. Kennedy. *Optimization of hydrogen production by filtration combustion of methane by oxygen enrichment and depletion*. International Journal of Hydrogen Energy 29 pp 1365– 1370 (2004).
- [13]. Erjiang Hu, Zuohua Huang, Jiajia He, Haiyan Miao. *Experimental and numerical study on lean premixed methane–hydrogen–air flames at elevated pressures and temperatures*. international journal of hydrogen energy 34 pp 6951–6960 (2009).
- [14] J.Xuan, M.K.H. Leung, D.Y.C.Leung and M.Ni. *A review of biomass-derived fuel processors for fuel cell systems*. Renewable and sustainable energy reviews.Vol 13 pp 1301-1313 (2009).
- [15] J.Xu, W.Zhou, Z.Li, J.Wang and J.Ma. *Biogas reforming for hydrogen production over a Ni–Co bimetallic catalyst: Effect of operating conditions*. International Journal of Hydrogen Energy. Vol 35 pp 13013-13020 (2010).
- [16] B.Meriem, *Etude du Procédé de production d'Hydrogène par Vaporeformage et par Vaporeformage Autotherme du Bio-Methanol*. Memoire de Magister, Université Ferhat Abbas-Sétif-1- (2014).
- [17] Kenneth K. KUO, *Principles of combustion, 2nd ed*. John Wiley & Sons ed. 200
- [18] P.Stevens. F.Novel Cattin, A.Hammou, C.Lamy and M.Cassir, *Piles à combustible*. Techniques de L'ingénieur. Vol 5 n^oD3340 pp 1- 28 (2000).
- [19] R.Kothari, D.Buddhi and R.L.Sawhney, *Comparison of environmental and economic aspects of various hydrogen production methods*. Renewable and Sustainable Energy Reviews. Vol 12 pp 553-563 (2008).
- [20] K.Aasberg-Petersen, I.Dybkjær, C.V.Ovesen, N.C.Schjødt, J.Sehested and S.G.Thomsen. *Natural gas to synthesis gas -Catalysts and catalytic processes*. Journal of Natural Gas Science and Engineering. Vol 3 pp 423-459 (2011).
- [21] G.M.Côme, I.Vedrenne, J.Saint-Just and A.Ben Hadid. *Methane coupling into acetylene in a two stage burner*. Catalysis Today. Vol 6 pp 381-390 (1990).
- [22] J.Poulleau. *Caractérisation des biogaz Bibliographie Mesures sur sites*. Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques, INERIS, (2002).
- [23] R.P.J.M.Raven and K.H.Gregersen. *Biogas plants in Denmark: successes and setbacks*. Renewable and Sustainable Energy Reviews. Vol 11 pp 116–132 (2007).
- [24] J.V.Herle, Y.Membrez and O.Bucheli, *Biogas as a fuel source for SOFC co-generators*. Journal of Power Sources. Vol 127 pp 300–312 (2004).

- [25] H.Katuwal and A.K.Bohara. *Biogas: A promising renewable technology and its impact on rural households in Nepal*. Renewable and Sustainable Energy Reviews. Vol 13 pp 2668–2674 (2009).
- [26] R.Gautam, S.Baral and S.Herat. *Biogas as a Sustainable Energy Source in Nepal: Present Status and Future Challenges*. Renewable and Sustainable Energy Reviews. Vol 13 pp 248–252 (2009)
- [27] P.Cozman, W.Wukovits, I.Mamaliga and M.Gavrilescu. *Modeling and simulation of high pressure water scrubbing technology applied for biogas upgrading*. Eurob server (2008).
- [28] S.Rasi, A.Veijanen and J.Rintala. *Trace compounds of biogas from different biogas production plants*. Energy. Vol 32 pp 1375-1380 (2007).
- [29] A.Wellinger and A.Petersson. *Biogas upgrading technologies—developments and innovations, Biogas production and utilisation*, IEA Bioenergy, Nova energy GmbH, (2005).
- [30] Y.Bo, Z.Wenqiang, X.Jingming and C.Jing. *Status and research of highly efficient hydrogen production through high temperature steam electrolysis at INET*. International Journal of Hydrogen Energy. Vol 35 pp 2829–2835 (2010).
- [31] F. Basile, G. Fornasari, F. Trifiro and A. Vaccari. *Partial oxidation of methane: Effect of reaction parameters and catalyst composition on the thermal profile and heat distribution*. Catalysis Today. Vol 64 pp 21-30 (2001).
- [32] R.Rivera-Tinoco, C.Mansilla, C.Bouallou and F.Werkoff. *On the Possibilities of Producing Hydrogen by High Temperature Electrolysis of Water Steam Supplied from Biomass or Waste Incineration Units*. International Journal of Green Energy. Vol 5 pp 388-404 (2008).
- [33] A.Iulianelli, G.Manzolini, M.De Falco, S.Campanari, T.Longo, S.Liguori and A.Basile. *H₂ production by low pressure methane steam reforming in a Pd–Ag membrane reactor over a Ni-based catalyst: Experimental and modeling*. International Journal of Hydrogen Energy. Vol 35 pp 11514-11524 (2010).
- [34] B.Boumeddane. *Investigations numériques de l'auto inflammation des mélanges méthane/air en mode HCCI*, Laboratoire moteurs à combustion interne. Université Saad Dahleb, Algerie (2009).
- [35] M. Leventa, D.J. Gunnb and M. Ali El-Bousiffi. *Production of hydrogen-rich gases from steam reforming of methane in an automatic catalytic microreactor*. International Journal of Hydrogen Energy. Vol 28 pp 945-959 (2003).

- [36] L.Chen, Q.Hong, J.Lin and F.M.Dautzenber. *Hydrogen production by coupled catalytic partial oxidation and steam methane reforming at elevated pressure and temperature* .Journal of Power Sources. Vol 164 pp 803-808 (2007).
- [37] T. Poinsoot and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T.E dwards,(2001).
- [38] D. Veynante and L. Vervisch. *Turbulent combustion modeling*. Prog. Energy Comb. Sci. Vol 28, pp 193 – 266 (2002).
- [39] N. Peters, *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, (2001).
- [40] T. Poinsoot and D.Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition, (2005).
- [41] P,Moin and K,Mahesh. *Dns: A tool in turbulence research*. Ann. Rev. Fluid Mech. Vol 30,pp 539–578 (1998).
- [42] T.Poinsoot, A.Trouvé and S.Candel. *Applications of direct numerical simulations of premixed turbulent combustion*. Prog. Energy Comb. Sci.Vol 21: pp 531-576 (1996).
- [43] W.T.Ashurst, N.Peters and M.D.Smooke. *Numerical simulation of turbulent flame structure with non-unity lewis number*. Combust. Sci. Tech. Vol 53, pp 339–375 (1987).
- [44] J.H.Chen, T.Echekki and W.Kollman. *The mechanism of two-dimensional pocket formation in lean premixed methane air flames with implications for turbulent combustion*. Combust. Flame Vol 116, 1/2, pp 15–48 (1999).
- [45] O. Mohammed, Production de l'hydrogène à partir des energies renouvelables. Memoire de magister. Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen (2009).
- [46] T.Echekki, and J.H.Chen. *Unsteady strain rate and curvature effects in turbulent premixed methane-air flames*. Combust. Flame Vol 106, pp 184–202 (1996).
- [47] L. Selle, F. Nicoud and T. Poinsoot. *The actual impedance of non-reflecting boundary conditions : implications for the computation of resonators*. AIAA Journal Vol 42,5, pp 958–964 (2004).
- [48] <https://fr.wikipedia.org/wiki/M%C3%A9thane>, 11 avril 2017 à 09:23.
- [49] M.Lesieur and O.Métais. *New trends in large-eddy simulations of turbulence*. Ann. Rev. Fluid Mech. Vol 28, pp 45–82 (1996).
- [50] P.Sagaut. *Introduction à la simulation des grandes échelles, mathématiques & applications ed*. Springer, (1998).
- [51] G.Boudier, T.Poinsoot, D.Bissières, and C.Bérat. *Comparison of LES, RANS and experiments in an aeronautical gas turbine combustion chamber*. Proc. Combust. Inst. Vol

- 31, pp 3075–3082 (2007).
- [52] L.Selle, G.Lartigue, T.Poinsot, R.Koch, W.Krebs, B.Prade, K.-U.Schildmacher, P.Kaufmann and D.Veynante. *Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes*. *Combust. Flame* vol 137,4, pp 489–505 (2004).
- [53] L.Selle, L.Benoit, T. Poinsot, F.Nicoud, and W.Krebs. *Joint use of compressible large-eddy simulation and helmoltz solvers for the analysis of rotating modes in an industrial swirled burner*. *Combust. Flame* Vol 145, 1-2, pp 194–205 (2006).
- [54] R.R.Cao and S.B.Pope, *The influence of chemical mechanisms on PDF calculations of non-premixed piloted jet flames*. *Combustion and Flame*. Vol 143 pp 450–470 (2005).
- [55] K. Truffin and T. Poinsot. *Comparison and extension of methods for acoustic identification of burners*. *Combust. Flame* Vol 142, 4, pp 388–400 (2005).
- [56] M. Lesieur, O. Metais and P. Comte, *Large-Eddy Simulations of Turbulence*. Cambridge University Press, (2005).
- [57] L. Selle, *Simulation aux grandes échelles des interactions flamme/acoustique dans un écoulement vrille*, Thèse de doctorat. Université de Toulouse. France (2004).
- [58] G. Albouze, *Simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs non-prémélangée*, Thèse de doctorat, Université de Toulouse, France (2009).
- [59] J.Cousteux, *Turbulence et couche limite*. CEPADUES- Toulouse, France, (1989).
- [60] L. Selle, G. Lartigue, T. Pinsot, P. Kaufmann, W. Krebs and D. Veynante, *Large-eddy simulation of turbulent combustion for gas turbines with reduced chemistry*, Proceedings of the Summer Program (2002).
- [61] C.D.Pierce and P.Moin, *Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion*, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol 504 pp73-97 (2004).
- [62] F.Bouras, M.H.Attia et F.Khaldi. *Improvements of the Combustion Characteristics by the Hydrogen Enrichment*, CEIT 2015 Conference Publications, Algeria (2015).
- [63] E.Hu, Z.Huang J.He, and H.Miao, *Experimental and numerical study on lean premixed methane–hydrogen–air flames at elevated pressures and temperatures*, *International journal of hydrogen energy*, Vol 34 pp 6951-6960 (2009).
- [64] F.Bouras, F.Khaldi, *Computational modeling of thermodynamic irreversibilities in turbulent non-premixed combustion*, *Heat and Mass Transfer* Vol 51 pp 751-900 (2015).
- [65] F.Bouras, A.Soudani, and M, Si Ameur, *Large Eddy Simulation for Lean Premixed Combustion*, *The Canadian journal of chemical engineering*, pp 231–237 (2013).

Titre du mémoire: INVESTIGATION NUMÉRIQUE DE LA COMBUSTION (CH₄-C₃H₈)/AIR :
ETUDE THERMOCHIMIQUE

Master: Energétique et Énergies renouvelables

Auteur: DOU Seif Eddine et AD Djamel

Mots-clés: Les modèles LES et PDF, chambre de combustion, méthane, propane, Simulation numérique CFD

Résumé:

Dans cette mémoire, nous avons simulé numérique de la combustion non-prémélangé des deux carburants (méthane et propane) dans une chambre de combustion cylindrique en utilisant logiciel FLUENT-CFD, afin de trouver les caractéristiques thermochimiques: la vitesse de gaz dans le brûleur, la température totale et la fraction massique du monoxyde de carbone. Pour étudier ce genre de phénomène on a utilisé un traitement spéciale du modèle mathématique et nous avons choisi deux modèles PDF et LES. L'objectif principal de ce travail est réduire l'émission du monoxyde de carbone (CO) et ce qui est considéré un gaz toxique pour l'environnement. Les résultats obtenus donnent un bon accord avec les autres résultats expérimentaux.

Report title: INVESTIGATION DIGITAL COMBUSTION (CH₄-C₃H₈)/AIR:

STADY THERMOCHIMICAL

Key words: LES and PDF Models, combustion chamber, methane, propane, Numerical simulation CFD.

Abstract:

In this memory, we simulated numerically the combustion nonpromixed of tow fuel (methane and propane) in a cylindrical combustion chamber using FLUENT-CFD software, in order to find the thermochemical characteristics: the velocity of gas in the burner, the total temperature and the mass fraction of the carbon monoxide. To study this kind of phenomenon we used a special treatment of the mathematical model and we chose two models PDF and LES. The main objective of this work is to reduce the emission of carbon monoxide (CO) and what is considered a gas toxic to the environment. The results obtained give good agreement with the other experimental results

عنوان المذكرة: التحقيق العددي لاحتراق الميثان البروبان /الهواء: الدراسة الحرارية

كلمات مفتاحية: نموذجي LES و PDF , غرفة الاحتراق، ميثان، بروبان، محاكاة العددية.

ملخص:

في هذه المذكرة، قمنا بمحاكاة عددية لظاهرة احتراق الميثان والبروبان في غرفة احتراق غير ممزوج ثلاثية الأبعاد باستخدام برنامج FLUENT-CFD، وذلك لغرض إيجاد الخصائص الكيميوحرارية لهذا التفاعل و المتمثلة في سرعة الغازات داخل غرفة الاحتراق، درجة الحرارة و الكسر الكتلي لأول أكسيد الكربون. ونستخدم لهذا الغرض عدة نماذج رياضية خاصة لمعالجة هذه المسألة وقد اخترنا في هذه الدراسة نموذجي LES و PDF. الهدف الأساسي من هذا العمل هو التقليل من انبعاث غاز أول أكسيد الكربون (CO) و الذي يعتبر غاز مضر للبيئة. كما أن النتائج التي تحصلنا عليها كانت في مجملها مقبولة من النتائج التجريبية الأخرى.