



Contribution à la modélisation et à la simulation numérique de la combustion turbulente pré-mélangée dans des régimes d'interaction chimie-turbulence extrêmes : Prise en compte des écarts à l'hypothèse de flamme mince

Kim Quoc Nguyen Kha

► To cite this version:

Kim Quoc Nguyen Kha. Contribution à la modélisation et à la simulation numérique de la combustion turbulente pré-mélangée dans des régimes d'interaction chimie-turbulence extrêmes : Prise en compte des écarts à l'hypothèse de flamme mince. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2016. Français. NNT : 2016ESMA0018 . tel-01447576

HAL Id: tel-01447576

<https://theses.hal.science/tel-01447576>

Submitted on 31 Jan 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

pour l'obtention du Grade de

DOCTEUR DE L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE
DE MECANIQUE ET D'AEROTECHNIQUE

(Diplôme National - Arrêté du 25 mai 2016)

Ecole Doctorale :

Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Energétique et Aéronautique

Secteur de Recherche :

Energétique, Thermique, Combustion

Présentée par :

Kim Quoc Nguyen KHA

Contribution à la modélisation et à la simulation numérique de la combustion turbulente pré-mélangée dans des régimes d'interaction chimie-turbulence extrêmes : prise en compte des écarts à l'hypothèse de flamme mince

Directeurs de thèse : **Arnaud MURA** et **Vincent ROBIN**

Soutenue le 10 Novembre 2016 devant la commission d'examen

- Jury -

M.	G. RIBERT	Maître de conférence INSA Roune, Coria	Rapporteur
M.	F. HALTER	Professeur Université d'Orléans, Icare	Rapporteur
M.	P. HALDENWANG	Professeur Université de Marseille, M2P2	Examineur
M.	V. SABELNIKOV	Directeur de Recherche ONERA Palaiseau	Examineur
Mme.	D. ESCUDIE	Directrice de Recherche CNRS CETHIL Lyon	Examineur
Mme.	C. MORIN	Professeure Université de Valenciennes, LAMIH	Examineur
M.	V. ROBIN	Maître de conférence Université de Poitiers, Pprime	Examineur
M.	A. MURA	Directeur de Recherche CNRS Pprime Poitiers	Examineur

Remerciements

Le travail effectué dans ce mémoire a été réalisé à l'institut P'- ENSMA, dans le département Fluides, Thermique et Combustion. Cette thèse n'aurait pas pu se dérouler sans le soutien financier de la région Poitou-Charente.

Je tiens à commencer par exprimer ma profonde reconnaissance à mes directeurs de thèse, Arnaud Mura et Vincent Robin pour leurs conseils, leur soutien, leur disponibilité, leur patience et surtout leur confiance qui m'ont été indispensables tout au long de ce travail. J'aimerais dire un grand merci à monsieur Michel Champion et madame Cécile Losier pour l'intérêt et le soutien qu'ils ont portés à nos publications.

Je tiens à remercier monsieur Pierre Haldenwang d'avoir accepté de présider le jury de soutenance, monsieur Guillaume Ribert et monsieur Fabien Halter d'être mes rapporteurs. Je remercie également madame Dany Escudie, madame Céline Morin et monsieur Vladimir Sabel'nikov de participer au jury.

Merci aussi à mes collègues dans le bureau : Anthony, Radouan, Aimad, Eglantine et Fabio pour la bonne ambiance durant ces trois années, pour leur humour et leur inspiration. Merci également à madame Jocelyne Bardeau pour m'avoir accueillie chaleureusement au sein du laboratoire et pour son soutien pour tout ce qui est préparation de documents administratifs.

Merci à mes ex-copines, T et L pour leur pureté et leur passion qui m'ont beaucoup inspiré durant ces années.

Finalement, j'adresse mes remerciements les plus profondes à toute ma famille, en particulier mes parents et ma petite soeur pour leur encouragement illimité tout au long de ma vie.

Table des matières

Remerciements	iii
Table des matières	v
Nomenclature	ix
Table des figures	xv
Liste des tableaux	xxiii
Introduction	1
1 Caractérisation simplifiée des écoulements réactifs prémélangés	5
1.1 Combustion et flammes laminaires	6
1.1.1 Eléments de cinétique chimique	6
1.1.2 Flammes laminaires de prémélange	7
1.1.3 Equations de bilan usuelles	10
1.2 Flammes de prémélange en écoulement turbulent	13
1.2.1 Caractéristiques élémentaires des écoulements turbulents	13
1.2.2 Description statistique de la turbulence	15
1.2.3 Equations moyennes	17
1.2.4 Fermeture des équations	18
1.2.5 Flammes prémélangées turbulentes	22
1.3 Conclusions	25

2	Modélisation de la combustion turbulente prémélangée	27
2.1	Approches de Modélisation	27
2.2	Modèles de combustion turbulente	30
2.2.1	Modèle “Eddy Break-Up”	30
2.2.2	Modèle Bray-Moss-Libby	30
2.2.3	Modèle Bray-Champion-Libby	32
2.2.4	Modèles à une Equation de Transport	33
2.2.5	Conclusions	34
2.3	Transports turbulents scalaires	34
2.3.1	Transport turbulent contre-gradient	35
2.3.2	Conclusion	36
3	Etude de flammes prémélangées monodimensionnelles	37
3.1	Equation de conservation	37
3.1.1	Loi d’Arrhénius	38
3.1.2	Solution numérique pour une flamme laminaire	39
3.1.3	Solution numérique pour la flamme laminaire obtenue avec un mécanisme chimique détaillé	41
3.2	Flammes turbulentes prémélangées 1D	43
3.2.1	Analyse linéaire du comportement	43
3.2.2	Solution numérique pour une terme de production de type $\tilde{\mathbf{c}}(\mathbf{1} - \tilde{\mathbf{c}})$	46
3.2.3	Cas du terme source introduit par Hakim	50
3.3	De la vitesse de propagation laminaire à la vitesse de la turbulente	53
3.3.1	Cas de Nicoli <i>et al.</i>	53
3.3.2	Cas d’une fonction <i>bridging</i>	55
3.3.3	Cas d’une fonction basée sur des distributions de Dirac	57
3.4	Effet de la diffusion à contre-gradient sur la vitesse de propagation	60
3.4.1	Problème rencontré	60
3.4.2	L’approche de Murray	61
3.4.3	Transition de la vitesse de propagation	63
3.5	Conclusion	72

4	Modèle généralisé pour la combustion turbulente prémélangée	73
4.1	Echelles caractéristiques des flammelettes	73
4.1.1	Flammelettes laminaires et flammelettes turbulentes	73
4.1.2	Calcul de la structure des flammelettes	77
4.2	Description du modèle de flammelettes d'épaisseur finie	79
4.2.1	Valeurs aux bords des flammelettes	79
4.2.2	Forme de PDF généralisée	82
4.3	Structure des flammes turbulentes prémélangées	84
4.3.1	Zone de préchauffage turbulente	85
4.3.2	Zone de réaction lente	86
4.3.3	Bords du <i>flame brush</i>	86
4.3.4	Couche intermittente principale	87
4.3.5	Raccordement entre le <i>leading edge</i> et la couche intermittente . . .	90
4.4	Description des flux turbulents	95
4.4.1	Vitesses moyennes conditionnées dans les flammelettes	98
4.4.2	Flux turbulent scalaire dans la couche intermittente	99
4.4.3	Flux turbulent scalaire dans la couche limite	102
4.5	Conclusion	106
5	Simulation de flammes en V turbulentes prémélangées	109
5.1	Introduction	109
5.2	Expressions algébriques du taux de ségrégation	110
5.3	Domaine de calcul et conditions aux limites	111
5.4	Evaluation préliminaire du modèle de calcul, flamme en V de Galizzi (2003)	112
5.5	Etude détaillée de deux fermetures du taux de réaction chimique, flamme en V de Renou	116
5.6	Conclusion	124
6	Simulation d'une flamme prémélangée stabilisée dans un écoulement divergent	125
6.1	Introduction	125

6.2	Prise en compte de l'épaisseur finie des flammelettes dans la simulation numérique	126
6.3	Cas de référence	128
6.4	Impact de l'épaisseur de <i>leading edge</i>	131
6.5	Conclusion	133
Conclusions et Perspectives		137
Bibliographie		141
Annexes		151
A L'influence des paramètres initiaux sur la solution d'un <i>Boundary Value Problem</i> dans le calcul de <i>Mathematica</i>		
		153
A.1	Influence de la coupure $\tilde{\mathbf{c}}^*$ sur la solution numérique	154
A.2	Influence de la valeur propre initiale $\mathbf{E}_{\text{ini}}$ sur la solution numérique	156
B Détail de la simplification du flux turbulent		157
B.1	Au <i>leading edge</i> : $0 < \chi < 1$	157
B.2	A la couche intermittente : $1 < \chi < \infty$	158
C Implications of laminar flame finite thickness on the structure of turbulent premixed flames		161
D Relevance of two basic turbulent premixed combustion models for the numerical simulations of V-shaped flames		163
E A layered description of a premixed flame stabilized in stagnating turbulence		165

Nomenclature

B	: coefficient pré-exponentiel
c	: variable d'avancement (température normalisée)
c^*	: valeur très petite de la variable d'avancement
C_μ	: constante de modélisation $C_\mu = 0.09$
C_1	: constante de modélisation
$C_{p,i}$	: chaleur massique de l'espèce i
$C_{p,m}$	: chaleur massique du mélange
D	: diffusivité moléculaire des espèces chimiques
Da	: nombre de Damköhler
E	: nombre sans dimension (valeur propre de BVP)
E_a	: énergie d'activation
h	: enthalpie massique
k	: énergie cinétique turbulente
K	: coefficient pré-exponentiel
Ka	: nombre de Karlovitz
Le	: nombre de Lewis
l_t	: échelle intégrale de turbulence
l_G	: échelle de Gibson
l_x	: échelle caractéristique de flammelette
l_η	: échelle de Kolmogorov
M_i	: masse molaire des espèces i
M_m	: masse molaire du mélange
P	: PDF au sens de Reynolds
$\tilde{P}$	: PDF au sens de Favre

p	: pression
R	: constante des gaz parfait
Rf_x	: rapport des échelles de longueur de flamme laminaire et flammelette $Rf_x = \delta_L/l_x$
Re_t	: nombre de Reynolds turbulent $Re_T = v'l_T/\nu$
S	: taux de ségrégation
S_L	: vitesse de propagation d'une flamme prémélangée laminaire plane
t	: temps
T	: température
T_a	: température d'activation
T_0	: température dans les conditions standards ($T_0 = 298$ K)
v_k	: composantes de la vitesse
v^*	: constante d'intégration de la vitesse dans les flammelettes
x, y, z	: coordonnées cartésiennes de référence
Y	: fraction massique des espèces chimiques
Z	: fraction de mélange

Lettres grecques

$\alpha_c, \beta_c, \gamma_c$	: paramètres de forme de PDF
β	: nombre de Zel'dovich
δ_L	: épaisseur d'une flamme prémélangée laminaire plane non étirée
δ_R	: épaisseur de la zone réactive dans la flamme prémélangée laminaire plane
δ_T	: épaisseur moyenne de la flamme prémélangée turbulente
ϵ	: taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente k
ϵ_c	: taux de dissipation de c
ϵ_Z	: taux de dissipation de Z
λ	: conductivité thermique
ν	: viscosité moléculaire
ξ	: variable sans dimension de l'espace
θ	: variable sans dimension du temps
ρ	: masse volumique du mélange
σ_t	: nombre de Schmidt turbulent ($\sigma_t = 0.7$)
τ_t	: échelle intégrale du temps turbulent $\tau_t = k/\epsilon$
τ_η	: échelle du temps Kolmogorov
τ_c	: échelle du temps chimique
Φ	: richesse du mélange
ω	: taux de production chimique
Ω	: $\Omega = \omega/\rho$

Indices

<i>comb</i>	: fait référence au combustible
<i>L</i>	: fait référence à la flamme laminaire
<i>ox</i>	: fait référence à l'oxydant
<i>f</i>	: fait référence aux flammelettes
<i>b</i>	: fait référence aux gaz brûlés
<i>sb</i>	: fait référence sur les surfaces aux gaz brûlés
<i>u</i>	: fait référence aux gaz frais
<i>su</i>	: fait référence sur les surfaces aux gaz frais
<i>st</i>	: conditions stœchiométriques
<i>t</i>	: fait référence à une grandeur de turbulence

Exposants

'	: fluctuations au sens de Reynolds
"	: fluctuations au sens de Favre
<i>max</i>	: valeur maximum
<i>min</i>	: valeur minimum

Abréviations et acronymes

ADL	: Anémometrie Doppler Laser
BCL	: Bray Champion Libby (modèle)
BML	: Bray Moss Libby (modèle)
BRG	: Bridging (modèle)
BVP	: Boundary Value Problem
CFD	: Computational Fluid Dynamics
DNS	: Direct Numerical Simulation
EBU	: Eddy Break Up (modèle)
LES	: Large Eddy Simulation
LW	: Libby Williams (modèle)
PDF	: Probability Density Function
PIV	: Particle Imaging Velocimetry
PLIF	: Planar Laser Induced Fluorescence
RANS	: Reynolds Averaged Numerical Simulation
TDF	: Two Delta Function (modèle)
URANS	: Unsteady Reynolds Averaged Numerical Simulation

Autres

$ q $	: norme du vecteur q
$\bar{q}$	: moyenne de Reynolds de la quantité q
$\tilde{q}$	: moyenne de Favre de la quantité q
$\langle \vec{n} \cdot \vec{x}_i \rangle$	: cosinus de l'angle entre les vecteurs unitaires $\vec{n}$ et $\vec{x}_i$

Table des figures

1.1	Différents régimes de flamme et quelques applications associées	8
1.2	Structure du front de flamme prémélangée laminaire	9
1.3	Spectre d'énergie des fluctuations de vitesse en turbulence homogène isotrope	15
1.4	Schéma de la vitesse temporel mesuré dans un écoulement turbulent	16
1.5	Diagramme des différents régimes de combustion turbulente prémélangée. .	24
2.1	Trois types d'analyses des flammes turbulentes prémélangées ou non pré- mélangées, d'après Veynante et Vervisch	28
3.1	Taux de réaction chimique d'une flamme laminaire pour une valeur du nombre de Zel'dovich $\beta = 10$	38
3.2	Structure d'une flamme laminaire $c(\xi)$ et son gradient $dc/d\xi$ issues de si- mulations numériques conduites pour différentes valeurs de β	40
3.3	Taux de réaction chimique (dégagement de chaleur normalisé) obtenu par un mécanisme chimique détaillé en utilisant la bibliothèque de Cantera. . .	41
3.4	Structure de flamme laminaire $c(x)$ et son gradients dc/dx issues des simu- lations numériques conduite avec un mécanisme chimique détaillé pour la richesse $\Phi = 1.0$	42
3.5	Coefficient diffusion moléculaire D en fonction de la variable d'avancement issue de Cantera.	42
3.6	Représentation schématique de la solution $Y(c)$ et ses pentes aux points limites des gaz frais et gaz brûlés.	46
3.7	Structure d'une flamme turbulente $\tilde{c}(\xi)$ et de son gradient $d\tilde{c}/d\xi$ obtenus par simulation numérique avec un terme source chimique de type $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$.	48

3.8	Nombre non-dimensionnel $E = D_t K / S_t^2$ tracé en fonction du taux de ségrégation S . La figure intérieure est un zoom obtenu pour de petites valeurs de S	49
3.9	Profils de $Y(\tilde{c})$ obtenus avec le terme source chimique de type BCL pour deux valeurs du taux de ségrégation	49
3.10	Le terme source (3.35) introduit par Hakim tracé pour différentes valeurs de ϵ	50
3.11	La variable d'avancement tracée par l'équation (3.45) pour différentes valeurs de ϵ : (a) : $\epsilon = 1$ et (b) : $\epsilon = 3$	52
3.12	Terme de production permettant de passer continument d'une forme ZFK à une forme KPP pour différentes valeurs de β	54
3.13	Vitesse de propagation obtenues numériquement pour différentes valeurs de β , vitesse de propagation ZFK et vitesse de propagation KPP.	55
3.14	Terme source chimique normalisé $\bar{\omega}_{BRG}$ tracé pour différentes valeurs de S lorsque $\beta = 10$	56
3.15	Nombre sans dimension $E = D_t K / S_t^2$ tracé en fonction du taux de ségrégation S . Valeurs obtenues numériquement à partir de l'équation transport de $\tilde{c}$ (3.25) effectuée avec les termes sources $\bar{\omega}_{BRG}$ (3.50), $\bar{\omega}_{BCL}$ (3.52) et $\bar{\omega}_{ARR}$ (3.51).	57
3.16	Terme source chimique normalisé $\bar{\omega}_{TDF}$ tracé pour différentes valeurs de S lorsque $\beta = 10$	58
3.17	Nombre sans dimension $E = D_t K / S_t^2$ tracé en fonction du taux de ségrégation S . Valeurs obtenues numériquement à partir de l'équation de transport de $\tilde{c}$ (3.25) effectuée avec les termes sources $\bar{\omega}_{TDF}$ (3.56), $\bar{\omega}_{BCL}$ (3.52) et $\bar{\omega}_{ARR}$ (3.51).	59
3.18	Le flux turbulent normalisé f_t (3.71) tracé pour deux valeurs de N : (a). $N = 0.5$ et (b). $N = 1$	64
3.19	Valeurs du nombre sans dimension $E = D_t K / S_t^2$ issues des calculs numériques (3.60) et de l'expression analytique (3.68) tracées en fonction du nombre de Bray N	64

3.20 (a) : profils de la variable d'avancement tracés pour deux valeurs de N : $N = 0.5$ et $N = 1.0$. (b) et (c) : profils obtenus numériquement sont comparés avec celles de l'expression analytique (3.70) pour $N = 0.5$ (b) et $N = 1.0$ (c).	65
3.21 Evolution temporelle des profils spatiaux de la variable d'avancement moyenne.	67
3.22 Evolution temporelle des profils de gradient de la variable d'avancement moyenne.	68
3.23 Profil limite de la variable d'avancement moyenne obtenu quand le régime de propagation stationnaire est atteint est comparé avec le profil déduit de l'équation stationnaire ($\theta = 80$) pour deux valeurs de N : (a). $N = 0.5$ et (b). $N = 1$	68
3.24 Profils de la vitesse normalisée au cours du temps obtenus numériquement de l'équation instationnaire pour deux valeurs de N : (a). $N = 0.5$ et (b). $N = 1$	70
3.25 Profils limites de la variable d'avancement moyenne obtenues pour $\kappa_{ini} = 0.5$ comparés avec ceux issus de $\kappa_{ini} = 2$ pour deux valeurs de N : $N = 0.5$ (a) et $N = 1$ (b).	71
3.26 Profils de la vitesse normalisée au cours du temps obtenus numériquement via l'équation instationnaire avec le taux de décroissance initial $\kappa_{ini} = 0.5$ pour deux valeurs de N : $N = 0.5$ (a) et $N = 1$ (b).	71
4.1 Description de la procédure retenue pour définir les limites de flammelette dans l'espace physique et l'espace des compositions	75
4.2 Evolutions de $\delta_c = c_{max}^{\beta \rightarrow \infty} - c_{min}^{\beta \rightarrow \infty}$ en fonction du nombre de Karlovitz pour les deux définitions de l_x : $l_x = l_\eta$ (ligne discontinue) et $l_x = l_G$ (ligne continue).	78
4.3 Fonction densité de probabilité de la structure interne des flammelettes $\tilde{f}(c)$ obtenue avec une chimie globale à une étape et $\beta = 10$ pour différentes valeurs de la constante de normalisation C_1^*	81

4.4	Evolution du taux de ségrégation maximal S_{max} à travers le <i>flame brush</i> obtenue avec une loi chimie globale et pour différentes valeurs de nombre de Zeldovich.	83
4.5	Description des différentes couches du <i>flame brush</i> turbulent.	85
4.6	Profils des iso-valeurs de δ_{te} (haut) de δ_{te} (bas) tracés en coordonnées logarithmiques associées au nombre de Reynolds (abscisses) et au nombre de Karlovitz (ordonnées). Gauche : description détaillée de la chimie ($\phi = 1.0$). Droite : valeur infinie du nombre de Zel'dovich.	88
4.7	Profils des iso-valeurs de δ_{ml} tracés en coordonnées logarithmiques associées au nombre de Reynolds (abscisses) et au nombre de Karlovitz (ordonnées). Gauche : description détaillée de la chimie ($\phi = 1.0$). Droite : valeur infinie du nombre de Zel'dovich.	89
4.8	Evolution du moment du second ordre conditionné dans la flammelette $\hat{\theta}_2$ en fonction du moment du premier ordre $\hat{\theta}_1$ obtenu en considérant la limite des grandes valeurs du nombre de Zel'dovich, cf. Eq (4.53), la chimie à une étape ou la chimie détaillée ($\Phi = 1.0$).	92
4.9	Profil du taux de ségrégation obtenu pour des valeurs infiniment grandes du nombre de Zeldovich, $Re_t = 1000$ et différentes valeurs du nombre de Karlovitz ($Ka = 0.01, 0.03, 0.1$ respectivement de la gauche vers la droite). Les lignes continues correspondent à la solution de la structure interne de <i>leading edge</i> valable pour $\chi < 1$ et les lignes en pointillés correspondent à la solution de la couche intermittente valable pour $\chi > 1$	93
4.10	Solution complète de l'évolution du taux de ségrégation dans le <i>leading edge</i> pour des valeurs infiniment grandes du nombre de Zeldovich et différentes valeurs du nombre de Reynolds et du nombre de Karlovitz ($Ka = 0.01, 0.03, 0.1$ respectivement de la gauche vers la droite).	93
4.11	Vue synthétique de la structure de flamme turbulente prémélangée, comportant chaque sous-couche du <i>flame brush</i> avec son épaisseur caractéristique.	94
4.12	Illustration des vitesses conditionnées pour une valeur particulière de l'avancement moyen	97
4.13	Vue simplifiée de la flamme turbulente prémélangée	101

4.14	Flux turbulent adimensionné F_c au <i>leading edge</i> (4.94) dans la limite $\beta \rightarrow \infty$ et pour différentes valeurs de N_B	104
4.15	Flux turbulent adimensionné F_c au début de la couche intermittente (4.102) dans la limite $\beta \rightarrow \infty$ et pour différentes valeurs de N_B	106
4.16	Evolution du flux turbulent adimensionné F_c dans le <i>leading edge</i> dans la limite $\beta \rightarrow \infty$ et pour différentes valeurs de N_B	106
5.1	Maillage non structuré considéré.	113
5.2	Comparaison entre les profils de la variable d'avancement issus des simulations numériques et ceux mesurés par Galizzi à trois distances différentes en aval du fil chaud $x_3 = 30mm$ (bas), $x_3 = 60mm$ (milieu) and $x_3 = 90mm$ (haut) avec $\tilde{\omega}_{BRG}$ donné par (5.1) et S donné par (5.3) avec $C_2 = 0.4$	114
5.3	Comparaison entre les profils de la variable d'avancement issus des simulations numériques et ceux mesurés par Galizzi à trois distances différentes en aval du fil chaud $x_3 = 30mm$ (bas), $x_3 = 60mm$ (milieu) and $x_3 = 90mm$ (haut) avec $\tilde{\omega}_{BRG}$ donné par (5.1) et S donné par (5.5) avec $C_3 = 0.07$	115
5.4	Profils de la variable d'avancement obtenus expérimentalement et par simulations numériques à deux différentes distances du fil chaud $x_3 = 42.5mm$ (gauche) and $x_3 = 70mm$ (droite) avec $\bar{\omega}_{TDF}$ donné par l'Eq. (5.2) et S donné par l'Eq. (5.3) avec $C_2 = 1$	119
5.5	Profils de la variable d'avancement obtenus expérimentalement et par simulations numériques à deux différentes distances du fil chaud $x_3 = 42.5mm$ (gauche) and $x_3 = 70mm$ (droite) avec $\bar{\omega}_{TDF}$ donné par l'Eq. (5.2) et S donné par l'Eq. (5.5) avec $C_3 = 0.15$	119
5.6	Champ de température obtenu avec $\bar{\omega}_{TDF}$ donné par l'Eq. (5.2) et S donné par l'Eq. (5.3) avec $C_2 = 1$ (gauche) et par l'Eq. (5.5) avec $C_3 = 0.15$ (droite).	120
5.7	Champ du taux de ségrégation obtenu avec $\bar{\omega}_{TDF}$ donné par l'Eq. (5.2) et S donné par l'Eq. (5.3) avec $C_2 = 1$ (gauche) et par l'Eq. (5.5) avec $C_3 = 0.15$ (droite).	120

5.8	Profils de la variable d'avancement obtenus expérimentalement et par simulations numériques à deux distances différentes du fil chaud $x_3 = 42.5mm$ (gauche) and $x_3 = 70mm$ (droite) avec $\bar{\omega}_{BRG}$ donné par l'Eq. (5.1) et S donné par l'Eq. (5.3) avec $C_2 = 0.4$	121
5.9	Profils de la variable d'avancement obtenus expérimentalement et par simulations numériques à deux distances différentes du fil chaud $x_3 = 42.5mm$ (gauche) and $x_3 = 70mm$ (droite) avec $\bar{\omega}_{BRG}$ donné par l'Eq. (5.1) et S donné par l'Eq. (5.5) avec $C_3 = 0.07$	121
5.10	Champ de température obtenu avec $\bar{\omega}_{BRG}$ donné par l'Eq. (5.1) et S donné par l'Eq. (5.3) avec $C_2 = 0.4$ (gauche) et par l'Eq. (5.5) avec $C_3 = 0.07$ (droite).	122
5.11	Champ de taux de ségrégation obtenu avec $\bar{\omega}_{BRG}$ donné par l'Eq. (5.1) et S donné par l'Eq. (5.3) avec $C_2 = 0.4$ (gauche) et par l'Eq. (5.5) avec $C_3 = 0.07$ (droite).	122
5.12	Valeurs propres non-dimensionnelles E obtenues long de différentes iso-lignes de la variable d'avancement moyenne ($\tilde{c} = 0.01, 0.05, 0.10$ and 0.50) issues de la simulation numérique utilisant le modèle <i>bridging</i> $\bar{\omega}_{BRG}$. La vitesse de propagation S_t est déduite de la projection du champ de vitesse.	123
5.13	Comparaison entre les valeurs propres non-dimensionnelles E obtenues long de iso-lignes de $\bar{c} = 0.01$ et la valeur déduite à partir de l'analyse monodimensionnelle. La vitesse de propagation S_t est évaluée par le biais de l'Eq. (5.6).	123
6.1	Croquis du domaine de calcul pour les simulations numériques de flammes impactantes. En haut : description du maillage et des conditions aux limites. En bas : lignes de courant de l'écoulement à travers le <i>flame brush</i>	129
6.2	Champ de la fraction de mélange moyenne superposé avec les iso-lignes de la variable progrès moyenne.	130
6.3	Champ de la variable progrès obtenu par son équation transport (côté droit) ou déduit de la tabulation utilisant l'Eq. (6.8) (côté gauche) superposé avec les iso-lignes du taux de réaction chimique.	130

6.4	En haut : comparaison du profil axial de la variable progrès moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23]. En bas : comparaison du profil axial de la vitesse moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23].	131
6.5	En haut : comparaison du profil axial de la variable progrès moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23]. En bas : comparaison du profil axial de la vitesse moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23].	132
6.6	En haut : comparaison du profil axial de la variable progrès moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23]. En bas : comparaison du profil axial de la vitesse moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23]. Les calculs ont été effectués par considérant la description de <i>flame brush</i> multicouche (ligne continue) ou en forçant c_{le} et c_{te} à zero et l'unité respectivement (ligne pointillé)	134
6.7	Sensibilité des résultats numériques aux variations du paramètre κ . En haut : comparaison du profil axial de la variable progrès moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23]. En bas : comparaison du profil axial de la vitesse moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23].	135
A.1	Evolution des profils $Y(\tilde{c})$ obtenus numériquement pour un terme source $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ en fonction de la coupure $\tilde{c}^*$. La courbe discontinue correspond de la coupure $\tilde{c}^* = 10^{-11}$	155
A.2	Variation de la valeur propre E en fonction de la coupure $\tilde{c}^*$	155

Liste des tableaux

1.1	Constantes du modèle $k - \epsilon$	20
4.1	Quantités intégrales C_1^* , I_1 , I_2 obtenues pour différentes valeurs des limites ξ_{min} et ξ_{max} avec $\beta = 10$	80
4.2	Valeurs limites de l'épaisseur caractéristique dans l'espace des compositions de chaque sous couche du <i>flame brush</i> . On utilise les définitions suivantes $\delta_c = c_{max} - c_{min}$, $\delta_c^- = I_1 - c_{min}$, $\delta_c^+ = c_{max} - I_1$, soit : $\delta_c = \delta_c^+ + \delta_c^-$	89
A.1	Valeur propre E obtenue numériquement avec sa valeur initiale E_{ini}	156

Introduction

Depuis de nombreuses années, les travaux de recherche réalisés en matière de simulation numérique de la combustion turbulente ont abouti à la proposition de nombreux modèles permettant de fermer les équations moyennes pour les champs scalaires et de quantité de mouvement représentatives des écoulements turbulents réactifs. Les recherches correspondantes se sont concentrées sur l'évaluation des termes de production chimique qui interviennent dans ces équations. Néanmoins, l'expansion thermique induite par les réactions chimiques exothermiques conduit à de fortes variations de masse volumique qui affectent également de manière très importante le transport turbulent des champs scalaires et du champ de vitesse lui-même (flux de Reynolds). Les effets correspondants mettent en défaut l'hypothèse de viscosité turbulente habituellement retenue dans le cadre RANS (fermetures de type $k - \epsilon$).

Pour éviter de recourir à l'emploi de modèle au second ordre pour ces flux, deux approches différentes mais complémentaires ont été proposées. La première consiste à considérer les quantités conditionnées dans les gaz frais et dans les gaz brûlés par deux méthodes : soit on résout les équations de transport des quantités conditionnées soit ces quantités conditionnées sont modélisées par les formules algébriques [55, 84]. La dernière approche est basée sur une décomposition du champ de vitesse qui permet d'identifier les effets directs et indirects de l'expansion thermique [80]. Cette dernière approche permet d'exprimer une forme algébrique pour le transport turbulent qui prend en compte les effets de l'expansion thermique. Elle pourra aussi être généralisée à une plus large plage de régimes de combustion.

Un des régimes les plus utilisés de la combustion prémélangée turbulente reste le régime dit de "flammelette" qui correspond à de très petites valeurs des échelles caractéristiques

de flamme laminaire en comparaison avec les échelles caractéristiques de turbulence, i.e. grandes valeurs du nombre de Damköhler. Dans ce régime, suivant les travaux de Kolmogorov [47], il a été montré que la propagation du front de flamme turbulente est contrôlée principalement par son bord du côté des gaz frais (*leading edge*). Il est mis en évidence que la transition du transport turbulent d'un mécanisme de diffusion gradient à un mécanisme de diffusion contre-gradient se déroule à la traversée d'une zone très fine située au voisinage du *leading edge*. Cette zone nécessite alors une description précise.

Notre objectif est d'étudier tout d'abord les comportements propagatifs de flammes monodimensionnelles laminaires et turbulentes avec les modélisations classiques de la combustion prémélangée. Nous proposons aussi un modèle généralisé pour le taux de réaction chimique moyen et pour le flux turbulent dans le régime de type "flammelettes". Finalement, cette représentation est validée par les simulations numériques.

Ce manuscrit de thèse est décomposé en six chapitres suivants :

- Le premier chapitre est consacré à l'introduction des bases théoriques de la caractérisation des écoulements laminaires et turbulents prémélangés. Nous présentons la formulation des équations de transport des quantités moyennes (variable d'avancement et quantité de mouvement).
 - Le second chapitre présente les modèles classiques du taux de réaction chimique moyen basés sur une approche statistique, i.e. EBU [91], BML [58] et BCL [19], ce que nous allons utiliser dans ce mémoire. En particulier, la construction du modèle BCL reste la base pour développer un modèle généralisé de la combustion turbulente dans le chapitre 4. Les modélisations habituellement utilisées pour le transport turbulent sont aussi présentées.
 - Dans le troisième chapitre une analyse des flammes monodimensionnelles est conduite pour examiner les caractéristiques propagatives du front de flamme analytiquement et numériquement. Cette analyse met en évidence un comportement propagatif qui permet de "passer" d'un régime de réaction laminaire à un régime de réaction turbulente. Nous introduisons deux modèles pour illustrer ce comportement. La diffusion à contre-gradient est elle-aussi considérée avec le même type de formalisme.
 - Un modèle généralisé de PDF présumée est présenté dans le chapitre 4. Ce modèle permet d'obtenir une description détaillée de la structure des flammes turbulentes
-

prémélangées avec une attention particulière accordée à l'interaction chimie-turbulence à travers le bord du côté des gaz frais. Cette description conduit à une proposition de modélisation pour le taux de réaction chimique moyen ainsi que pour le flux turbulent scalaire.

- Enfin, les deux derniers chapitres présentent les simulations numériques réalisées en utilisant le modèle généralisé décrit dans le chapitre précédent qui a été implanté par nos soins dans le logiciel de calcul numérique *Code-Saturne*. Ce modèle est validé sur la base de deux configurations expérimentales de référence : flammes en V turbulentes (chapitre 5) et flamme stabilisée dans un écoulement divergent (chapitre 6).

Chapitre 1

Caractérisation simplifiée des écoulements réactifs prémélangés

Dans l'étude des écoulements laminaires et turbulents, il est crucial de trouver des modèles pour le taux de combustion et la propagation de la flamme en fonction des paramètres de l'écoulement (courbure, étirement, caractéristiques de la turbulence). Le concept de propagation de la flamme laminaire et l'effet d'étirement sur celle-ci forment une partie intégrante de la compréhension des flammes turbulentes. Cependant, les flammes rencontrées dans les applications pratiques sont presque toujours turbulentes de manière à produire des taux de conversion d'énergie volumétriques élevés pour l'efficacité et la compacité. L'interaction entre un processus chimique de combustion et la turbulence joue donc un rôle très important dans la plupart des systèmes de combustion, pour la propulsion ou la production d'énergie, tels que les chambres de combustion de turboréacteurs ou de turbines à gaz. L'objectif de ce chapitre est de présenter les phénomènes physiques et les équations décrivant l'évolution des grandeurs caractéristiques de ces phénomènes. La résolution de ces équations doit permettre de prédire la structure et l'évolution des écoulements turbulents. Cependant, compte tenu de la complexité des équations, la résolution analytique de ces équations reste limitée à des situations simplifiées et, dans la plupart des cas, le recours à des calculs numériques est nécessaire. Les grandeurs caractéristiques que nous sommes en mesure de calculer sont alors des quantités filtrées ou moyennées comportant des termes inconnus qui apparaissent dans les équations

correspondantes, ceux-ci doivent être modélisés.

1.1 Combustion et flammes laminaires

1.1.1 Eléments de cinétique chimique

La combustion résulte d'une interaction entre réactions chimiques exothermiques, phénomènes de transports moléculaires (diffusion, conduction thermique et viscosité) et convection dans un écoulement gazeux. Un ensemble de réactions élémentaires constitue le mécanisme cinétique du processus réactionnel. L'état final du processus réactionnel correspond à l'équilibre chimique, la composition du mélange est alors définie par les lois de la thermodynamique. Les équations élémentaires sont caractérisées par leur taux de réaction qui permet de calculer l'effet de la réaction sur la concentration de chaque espèce. On constate expérimentalement que les taux de réaction élémentaire varient comme le produit d'une constante de vitesse par les concentrations des espèces réactives, élevées chacune à une puissance qui correspond à leur coefficient stoechiométrique. Cette constante de vitesse représente la probabilité que la rencontre entre les molécules impliquées soit effectivement réactive. Elle dépend de la température et est le plus souvent exprimée par une loi d'Arrhénius :

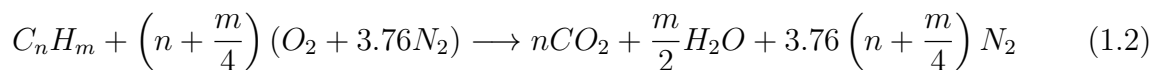
$$\Omega = BT^\alpha \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) = BT^\alpha \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \quad (1.1)$$

où B est le coefficient pré-exponentiel, R la constante des gaz parfaits, E_a l'énergie d'activation et $T_a = E_a/R$ la température d'activation. L'énergie d'activation représente la quantité d'énergie à apporter au système considéré pour que les espèces puissent réagir de façon significative.

Un processus chimique de combustion est souvent écrit sous la forme d'une réaction globale entre un combustible et un comburant selon le schéma :



Par exemple, pour la combustion d'un hydrocarbure dans l'air à la stoechiométrie :



Plus précisément,

- cette équation induit un fort dégagement de chaleur qui a lieu dans une zone très mince (les flammes les plus courantes ont des épaisseurs δ_L typiques de l'ordre de 0.1mm à 1mm) conduisant à des gradients thermiques très élevés : le rapport des températures entre gaz brûlés et gaz frais (ou bien celui des masses volumiques) sont de l'ordre de 4 à 7.
- elle correspond à un taux de réaction fortement non linéaire (loi d'Arrhenius).

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

Le taux de réaction chimique peut s'exprimer en utilisant une forme empirique, pour la réaction globale, soit :

$$\Omega_Y = Y_{C_nH_m}^a Y_{O_2}^b B T^c \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \quad (1.3)$$

où $Y_{C_nH_m}$ est la fraction massique de l'hydrocarbure, Y_{O_2} la fraction massique d'oxygène. Le choix des constantes est basé sur l'obtention de vitesse de propagation de flammes de prémélange réalistes, et en particulier si nous considérons leur dépendance avec la richesse du mélange. Il est important d'insister sur le fait que l'utilisation d'une réaction globale ne permet évidemment pas de représenter les processus de cinétique chimique réels.

1.1.2 Flammes laminares de prémélange

La flamme est le résultat du transport des espèces, de celui de la chaleur et enfin de la réaction chimique. Il y a deux situations généralement identifiées selon la procédure utilisée pour introduire les réactifs dans la flamme : ce sont les flammes de prémélange d'une part et les flammes de diffusion (non-prémélangées) d'autre part. Les écoulements pouvant être laminares ou turbulents, quatre situations possibles, résumées dans la figure

1.1 qui y associe quelques applications pratiques. Dans cette étude, nous ne considérons que les situations correspondant à un milieu gazeux prémélangé.

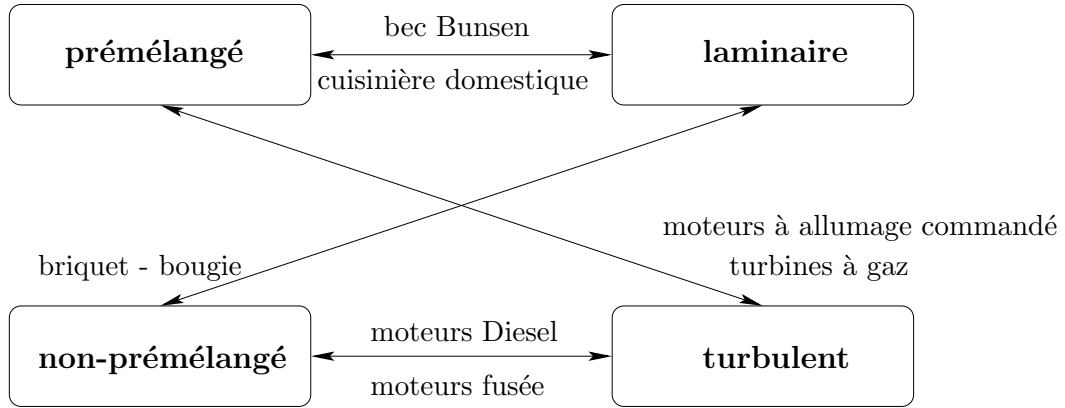


FIGURE 1.1 – Différents régimes de flamme et quelques applications associées

Lorsqu'on enflamme un mélange gazeux où le combustible et l'oxydant sont préalablement mélangés, on observe une zone d'épaisseur finie appelée front de flamme, séparant les gaz frais des gaz brûlés, qui se propage dans tout l'espace à une certaine vitesse. Si on allume le mélange réactif dans un tube (ouvert), un certain temps après l'inflammation, une flamme plane se propage à vitesse constante perpendiculairement à l'écoulement. Cette vitesse, appelée la vitesse de propagation de la flamme laminaire S_L , est une caractéristique intrinsèque du mélange et des conditions de pression et température. Cette vitesse est mesurée en l'ordre de 0.1 m/s à 1 m/s.

La théorie des flammes laminaires et l'analyse asymptotique conduite pour des énergies d'activation élevées [20, 97, 98] fournit une description précise de la structure de flamme prémélangée qui est basée sur la forte non-linéarité des réactions chimiques, par exemple le taux de réaction chimique est exprimé comme dans l'Eq.(1.3). La propagation de la flamme est le résultat d'une interaction de deux phénomènes : tout d'abord les gaz brûlés chauffent par conduction thermique les gaz frais puis, lorsque la température de ces gaz est suffisamment élevée, ils réagissent en dégageant de la chaleur qui sert à chauffer les gaz frais en aval. Cet échauffement par conduction thermique se fait sur une épaisseur δ_L donnée sur la figure 1.2. Parmi les différentes définitions de l'épaisseur de flamme [48, 97], nous retenons la plus utilisée : $\delta_L = (T_b - T_u) / (\partial T / \partial x)_{max}$, où T_u et T_b sont respectivement les températures des gaz frais (réactifs) et des gaz brûlés (produits). Dans l'épaisseur

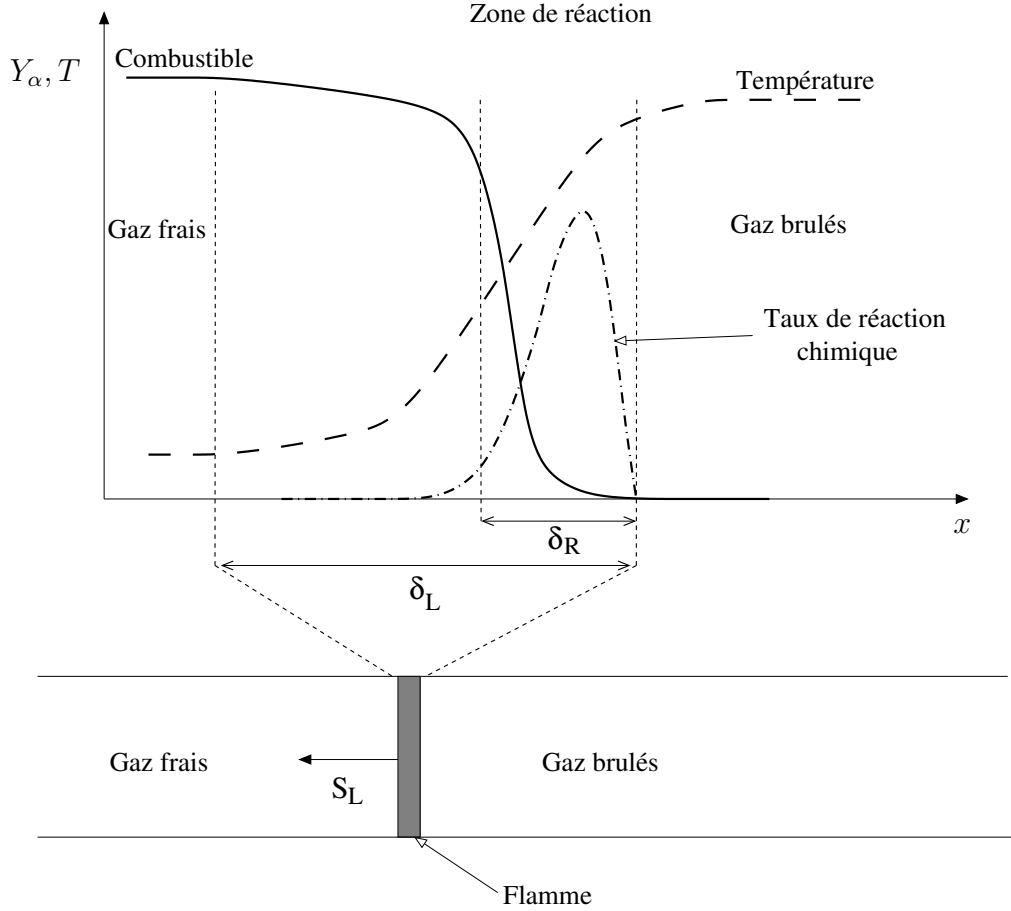


FIGURE 1.2 – Structure du front de flamme prémélangée laminaire

δ_L de la flamme, la température des gaz frais augmente pendant que la concentration des réactifs diminue; cependant les réactions chimiques ne se produisent que dans une zone de réaction d'épaisseur δ_R encore plus fine que δ_L . La zone précédant la zone de réaction, correspond à la zone de préchauffage, où la production chimique est négligeable. La principale caractéristique d'une flamme prémélangée est donc sa capacité à se propager vers les gaz frais. La vitesse S_L de propagation d'une flamme laminaire dépend de différents paramètres tels que la nature des réactifs, la richesse du mélange, la température des gaz frais ou encore la pression. Nous pouvons définir un nombre de Reynolds caractéristique de la flamme laminaire prémélangée de la manière suivante :

$$Re = \frac{\delta_L S_L}{\nu} = \mathcal{O}(1) \quad (1.4)$$

où ν est la viscosité cinématique du fluide des gaz frais.

Un autre paramètre caractéristique de la flamme laminaire est le facteur qui quantifie

le saut de température à la traversée du front de flamme : $\tau = T_b/T_u - 1$. Cette quantité s'appelle le facteur d'expansion. Il peut également être déterminé par le biais des masses volumiques : $\tau = \rho_u/\rho_b - 1$, où ρ_u et ρ_b sont les masses volumiques dans les réactifs et dans les produits respectivement.

1.1.3 Equations de bilan usuelles

Les équations de bilan instantanées fournissent une base solide pour conduire la plupart des travaux en combustion [8, 48, 97] :

Equation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.5)$$

Bilan de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho v_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_i} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} - \frac{\partial p}{\partial x_j} \quad (1.6)$$

avec τ_{ij} est le tenseur des contraintes visqueuses :

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (1.7)$$

où v_k sont les trois composantes cartésiennes du champ de vitesse ($k = 1, 2, 3$), $\mu = \rho \nu$ est le coefficient de viscosité dynamique du fluide, ρ la masse volumique du mélange, p la pression et δ_{ij} est le symbole de Kronecker où $\delta_{ij} = 1$ lorsque $i = j$ sinon $\delta_{ij} = 0$.

Conservation de la masse pour l'espèce A :

$$\frac{\partial \rho Y_A}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i Y_A}{\partial x_i} = -\frac{\partial J_i^A}{\partial x_i} + \omega_A \quad (1.8)$$

où J_i^A représente le flux diffusif de masse et $\omega_A = \rho \Omega_A$ le taux de production chimique de l'espèce considérée. Le flux de diffusion est supposé suivre la loi de Fick : $J_i^A = -\rho D_A (\partial Y_A / \partial x_i)$, où D_A est le coefficient de diffusion de l'espèce A. Le bilan de l'espèce s'écrit alors :

$$\frac{\partial \rho Y_A}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i Y_A}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_A \frac{\partial Y_A}{\partial x_i} \right) + \omega_A \quad (1.9)$$

Bilan d'énergie :

La conservation de l'énergie totale ρE est déduite du premier principe de la thermodynamique.

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i E}{\partial x_i} = \rho v_i F_i - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij} v_j}{\partial x_i} - \frac{\partial v_i p}{\partial x_i} \quad (1.10)$$

avec q_i le flux d'énergie et F_i la force volumique. Cette équation conduit à l'équation pour l'enthalpie massique h :

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i h}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{\alpha} \rho D_{\alpha} h_{\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial p}{\partial t} + v_i \frac{\partial p}{\partial x_i} - \tau_{ij} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \quad (1.11)$$

où λ est la conductivité thermique du gaz et h_{α} l'enthalpie massique de l'espèce α .

Quand nous supposons de plus que le gaz est un mélange parfait des gaz parfaits, les équations d'état s'écrivent donc :

$$p = \rho \frac{R}{M} T \quad (1.12)$$

où M est la masse molaire du mélange et $R = 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ la constante des gaz parfaits.

L'enthalpie massique du mélange s'écrit :

$$h = \sum_{\alpha} h_{\alpha}(T) Y_{\alpha} \quad \text{avec} \quad h_{\alpha} = \int_{T_0}^T C_{p,\alpha} dT + Q_{p,\alpha}^0 \quad (1.13)$$

$C_{p,\alpha}$ est la capacité calorifique de l'espèce α à pression constante et $Q_{p,\alpha}^0$ la chaleur de formation de l'espèce α à pression constante et à la température de référence T_0 . L'enthalpie massique s'écrit finalement :

$$h = \int_{T_0}^T \sum_{\alpha} C_{p,\alpha} Y_{\alpha} dT + \sum_{\alpha} Q_{p,\alpha}^0 Y_{\alpha} \quad (1.14)$$

Compte tenu du grand nombre d'espèces impliquées, il n'est pas simple à trouver la résolution de ces équations de bilans, un certain nombre d'hypothèses simplificatrices sont donc utilisés pour diminuer le complexe des équations à résoudre. Dans le cas des flammes laminares où le nombre de Mach caractéristique de l'écoulement réactif est suffisamment faible, les termes liés à l'énergie cinétique et à la dissipation visqueuse peuvent être négligés dans l'équation pour l'enthalpie. Les variations de la masse volumique et de la température sous l'effet de la pression sont négligeables et l'équation d'état (1.12) se ré-écrit de la façon suivante :

$$\rho T = cte \quad (1.15)$$

Nous supposons ensuite les mélanges dilués dans N_2 , par exemple dans le cas de la combustion représentée par une réaction globale entre un hydrocarbure et l'air, Eq.(1.2), et nous considérons que les nombres de Lewis des espèces sont tous égaux à un :

$$Le_\alpha = \frac{\lambda_\alpha}{\rho C_{p,\alpha} D_\alpha} = 1 \quad \forall \alpha \quad (1.16)$$

Ces hypothèses conduisent à une équation simplifiée pour l'enthalpie :

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i h}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x_i} \right) \quad (1.17)$$

En utilisant les équations (1.17) et (1.14), nous pouvons obtenir une équation pour la température :

$$\bar{C}_p \frac{\partial \rho T}{\partial t} + \bar{C}_p \frac{\partial \rho v_i T}{\partial x_i} = \bar{C}_p \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \sum_\alpha Q_{p,\alpha}^0 \omega_\alpha \quad (1.18)$$

où $\bar{C}_p = \sum C_{p,\alpha} Y_\alpha$ est la capacité calorifique du mélange par unité de masse.

Equation de transport de la variable d'avancement :

Lorsque le nombre de Lewis est égal à l'unité, nous voyons que les équations de bilan des espèces, i.e. Eq.(1.9), et de la température, i.e. Eq.(1.18), sont équivalentes. Dans ce cas, en introduisant une variable d'avancement c , telle que $c = 0$ dans les gaz frais et $c = 1$ dans les gaz brûlés. Cette variable, basée sur la température de l'écoulement, peut être définie de la façon suivante :

$$c = \frac{T - T_u}{T_b - T_u} \quad (1.19)$$

Nous pouvons alors écrire l'équation de transport pour la variable d'avancement :

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i c}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) + \omega_c \quad (1.20)$$

où ω_c est le taux de réaction chimique pour la variable d'avancement. En considérant une réaction globale, ce taux de réaction chimique est donné par la loi de type Arrhénius, comme Eq.(1.3) mais il est exprimé sous la forme suivi [97] :

$$\omega_c = \rho B (1 - c) \exp \left[\frac{-\beta(1 - c)}{1 - \alpha(1 - c)} \right] \quad (1.21)$$

où B a les unités de l'inverse de temps (s^{-1}) et α et β sont les paramètres définis respectivement par :

$$\alpha = \frac{\tau}{1 + \tau} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{E_a}{RT_b} \frac{\tau}{1 + \tau} \quad (1.22)$$

Cette paramètre β est le nombre de Zel'dovich. La masse volumique ρ est donnée par :

$$\rho = \rho_u / (1 + \tau c).$$

Les équations que nous proposons de résoudre normalement sont celles issues de la mécanique de fluides (1.5)-(1.6) et celle décrivant l'évolution de c (1.20). Dans cette étude, nous allons nous concentrer sur l'équation de transport de la variable d'avancement (1.20) à résoudre pour considérer l'évolution de c et les variables associées comme son gradient, la variance etc. La résolution de ces équations passe forcément par l'utilisation d'une méthode numérique puisque les outils mathématiques actuels ne permettent pas la résolution analytique de ces équations. La méthode numérique consiste donc à discrétiser les équations dans l'espace et le temps. La solution est plus ou moins précise suivant l'ordre du schéma numérique et la qualité de la discrétisation (maillage retenu). On notera que la résolution analytique peut être obtenue dans certains endroits de l'épaisseur de flamme, par exemple la zone de préchauffage où il n'y a pas encore la réaction chimique. La résolution de cette équation à l'état stationnaire peut alors conduire à une estimation de la vitesse de propagation S_L de flamme laminaire.

1.2 Flammes de prémélange en écoulement turbulent

1.2.1 Caractéristiques élémentaires des écoulements turbulents

La turbulence est un phénomène qui apparaît dans un écoulement quand on augmente les gradients de vitesse de telle sorte que la viscosité du fluide ne peut plus dissiper les petites perturbations et maintenir le caractère laminaire de l'écoulement. Le nombre de Reynolds, dans ce cas, doit être assez important pour que l'instabilité se déclenche, et l'écoulement devient pleinement turbulent si ce nombre est suffisamment grand. Pourtant, pour caractériser un milieu naturel turbulent, il est recommandé d'utiliser le nombre de Richardson qui tient compte des effets associés à la stratification de masse volumique plutôt que celui de Reynolds, car ce dernier considère la masse volumique du fluide comme constante, ce qui n'est pas vrai dans le cas des fluides incompressibles.

La turbulence est généralement représentée par des structures tourbillonnaires dont les tailles sont réparties de façon continue sur une plage d'échelles de longueur. Les plus gros

tourbillons sont associés à la géométrie de la configuration et les plus petits tourbillons sont dissipés par les forces visqueuses. Les bornes du spectre des échelles de taille des tourbillons sont donc définies par la configuration de l'écoulement d'une part et par la viscosité du fluide d'autre part.

Kolmogorov, en 1941 [46], a développé une théorie pour la turbulence homogène isotrope basée sur le mécanisme de cascade d'énergie des gros tourbillons vers les plus petits. Les gros tourbillons, produits par la géométrie et porteurs d'énergie, sont instables, ils vont donc produire d'autres tourbillons de plus en plus petits, à qui ils transmettent leur énergie. Ce processus de réduction d'échelles (fragmentation) continue jusqu'à ce que le nombre de Reynolds associé aux tourbillons, soit suffisamment petit pour que la viscosité moléculaire dissipe l'énergie cinétique. Plus les tourbillons sont petits, plus les forces visqueuses dissipent facilement leur énergie en chaleur.

La théorie de Kolmogorov permet finalement de définir trois zones distinctes, voir figure 1.3 :

- Les grandes échelles (échelle intégrale) qui sont caractéristiques de la géométrie de l'écoulement. Cette zone est le siège de la production de turbulence. L'échelle de longueur des gros tourbillons, notée l_t , est reliée à l'énergie cinétique turbulente k transférée aux échelles inférieures, par la relation suivante :

$$l_t \propto \frac{k^{3/2}}{\epsilon} \quad (1.23)$$

où ϵ est le taux de dissipation.

- La zone dite inertielle, qui correspond aux échelles intermédiaires et qui est indépendante de la géométrie de l'écoulement. Elle est le siège du transfert d'énergie vers les petits tourbillons. Les échelles correspondantes sont appelées échelles inertielles.
- La zone des petites échelles (échelle de Kolmogorov) où l'énergie des petites structures tourbillonnaires est dissipée en chaleur et le nombre de Reynolds devient très petit. D'après la théorie de Kolmogorov, cette échelle se calcule en fonction de ϵ et ν . On définit l'échelle caractéristique de longueur l_η par :

$$l_\eta = \alpha_l l_t Re_T^{-3/4} \quad (1.24)$$

où α_l est une constante, dépendant de la définition exacte de l_t (usuellement 1.35)

et Re_t est le nombre de Reynolds de la turbulence :

$$Re_t = \frac{k^{1/2} l_t}{\nu} \quad (1.25)$$

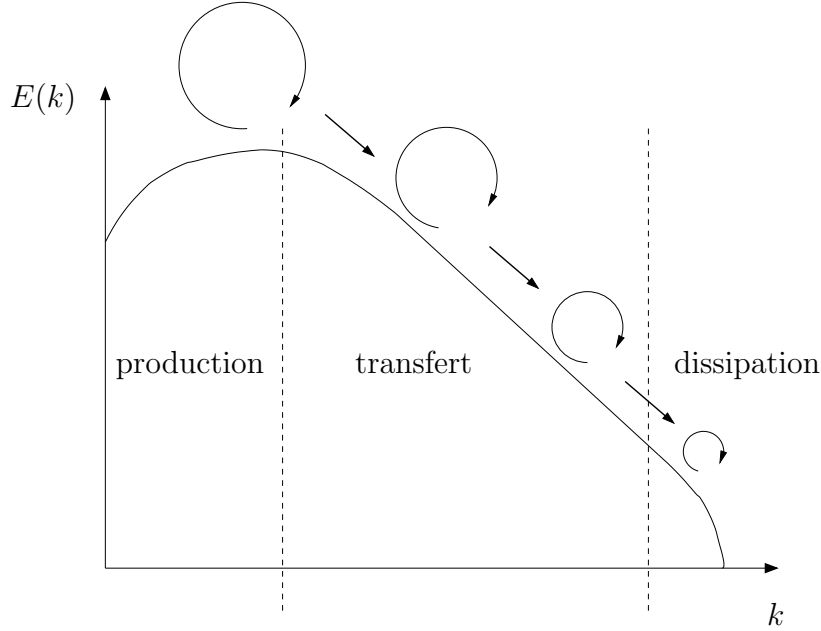


FIGURE 1.3 – Spectre d'énergie des fluctuations de vitesse en turbulence homogène isotrope

Afin de résoudre explicitement toutes les structures de l'écoulement turbulent, une approche numérique appelée Simulation Numérique Directe (ou DNS pour Direct Numerical Simulation) [72, 73] est utilisée pour des problèmes académiques dont la géométrie reste assez simple. L'avantage de cette méthode est de permettre d'extraire les termes non fermés et de valider des modèles pour ces quantités. Néanmoins, elle nécessite un maillage très fin et un code de calcul suffisamment précis. Aujourd'hui, cet outil est donc limité à des écoulements pour lesquels le nombre de Reynolds reste assez faible.

1.2.2 Description statistique de la turbulence

La turbulence est étudiée sur la base des outils statistiques issus de la théorie des probabilités. L'écoulement turbulent présente un caractère aléatoire si bien que les variables nécessaires à sa description fluctuent constamment dans l'espace et le temps. C'est pour-

quoi lorsqu'on mesure un champ de vitesse dans un écoulement turbulent, on obtient des fluctuations aléatoires autour d'une vitesse moyenne, voir figure 1.4.

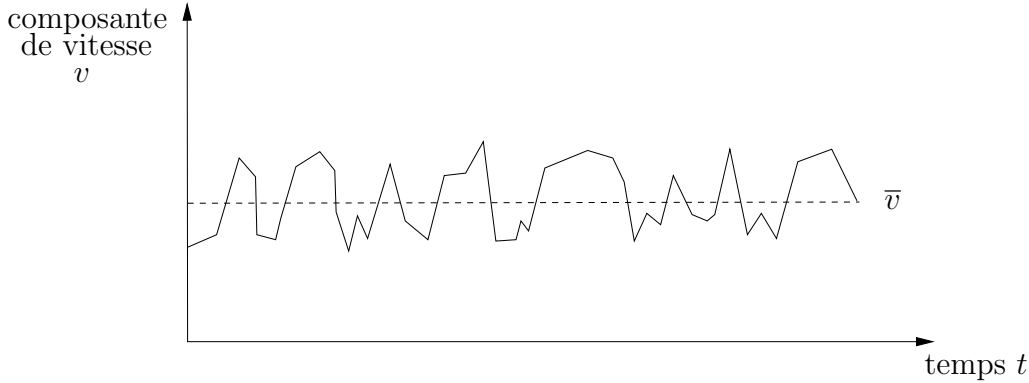


FIGURE 1.4 – Schéma de la vitesse temporel mesuré dans un écoulement turbulent

La variable aléatoire ϕ se décompose alors en une partie moyenne, $\bar{\phi}$, et une partie fluctuante, ϕ' , c'est la décomposition dite de Reynolds :

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (1.26)$$

Par définition, la moyenne des fluctuations est nulle : $\overline{\phi'} = 0$. La partie moyenne, $\bar{\phi}$, est une moyenne statistique, c'est-à-dire qu'elle peut être assimilée à la moyenne temporelle (si l'écoulement est statistiquement stationnaire) ou à la moyenne spatiale (si l'écoulement considéré est statistiquement homogène suivant une direction). Dans les écoulements à masse volumique variable, les équations moyennes au sens de Reynolds obtenues sont très différentes des équations moyennes pour les écoulements à la masse volumique constante (l'apparition de corrélations croisées avec les fluctuations de masse volumique), ces équations deviennent donc inextricables. Afin de retrouver les formes usuelles pour ces équations, on introduit une moyenne pondérée par la masse volumique appelée la moyenne de Favre [34] qui est définie à partir de la moyenne de Reynolds par :

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \quad (1.27)$$

Comme pour la moyenne de Reynolds la valeur instantanée peut être écrit sous la forme de sa valeur moyenne et des fluctuations :

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (1.28)$$

Par définition, la moyenne de Favre des fluctuations est nulle : $\tilde{\phi} = 0$ mais $\bar{\phi} \neq 0$. Lorsque la masse volumique est constante, les moyennes de Favre et de Reynolds sont équivalentes.

Avec la connaissance des variables moyennes, une approche statistique, souvent dénommée RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes), consiste à moyenner les équations de l'aérothermochimie et à fermer les termes inconnus par des modèles de turbulence et de combustion [94]. La résolution de ces équations ne permet de connaître que la valeur moyenne des quantités aérothermochimiques en chaque point du maillage. C'est l'approche qui reste la plus largement employée pour dimensionner les dispositifs pratiques. Les travaux de cette thèse s'organisent donc autour de la RANS et du développement de nouveau modèle pour la combustion turbulente prémélangée. Par contre, cette méthode est limitée car elle ne permet pas de connaître les effets instationnaires des flammes turbulentes. C'est pourquoi la simulation des grandes échelles, appelée LES (Large Eddy Simulations) est développée [94]. Les gros tourbillons sont résolus alors que l'effet des petites structures est modélisé par un modèle de sous-maille. La méthode consiste à filtrer les équations instantanées et à fermer les termes inconnus.

1.2.3 Equations moyennes

Avec l'application de la formulation de la moyenne d'ensemble aux équations (1.5), (1.6) et (1.20), on peut obtenir les équations de bilan des quantités moyennes :

Equation de continuité :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{v}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.29)$$

Bilan de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{v}_j}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{v}_i \tilde{v}_j}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\tau}_{ij} - \overline{\rho v_i'' v_j''}) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \quad (1.30)$$

Equation d'évolution de la variable d'avancement moyenne :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{v}_i \tilde{c}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i}} - \overline{\rho v_i'' c''} \right) + \bar{\omega}_c \quad (1.31)$$

L'opération "moyenne" réalisée sur les équations de bilan fait apparaître un terme supplémentaire dans chaque équation (mis à part l'équation de continuité). Ces termes représentent les flux turbulents des variables correspondantes :

- $\overline{\rho v_i'' v_j''}$ est le flux turbulent de la quantité de mouvement. Ce terme sera désigné par le tenseur des contraintes de Reynolds R_{ij} .
- $\overline{\rho v_i'' c''}$ est le flux turbulent de la variable d'avancement.

Ces corrélations expriment le transport par les fluctuations de vitesse.

La connaissance de la seule valeur moyenne d'un scalaire n'est pas toujours suffisante pour représenter les phénomènes associés à la turbulence. On introduit alors l'équation de la variance de la variable d'avancement ($\widetilde{c''^2}$). Cette équation s'écrit :

$$\frac{\partial \overline{\rho c''^2}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho v_i c''^2}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial c''^2}{\partial x_i}} - \overline{\rho v_i'' c''^2} \right) - 2 \overline{\rho D \frac{\partial c''}{\partial x_i} \frac{\partial c''}{\partial x_i}} - 2 \overline{\rho v_i'' c''} \frac{\partial \widetilde{c}}{\partial x_i} + 2 \overline{c'' \omega_c} \quad (1.32)$$

Elle pose certaines difficultés de fermeture qui seront évoquer au final du manuscrit.

1.2.4 Fermeture des équations

Afin de résoudre les équations moyennes, il faut préciser les flux turbulents et le terme de réaction chimique moyen (dans l'équation de transport de la variable d'avancement). Dans cette section, nous allons présenter un certain nombre de modélisations possibles du flux turbulent de la quantité de mouvement $\overline{\rho v_i'' v_j''}$ (tenseurs de Reynolds). Les modélisations du flux turbulent et de la production chimique de la variable d'avancement sont considérées dans le chapitre suivant.

Modélisation du premier ordre

Suite au concept de viscosité turbulent proposé par Boussinesq [9, 39, 92], le modèle du premier ordre est décrit généralement par analogie avec le tenseur des contraintes visqueuses τ_{ij} (Eq.(1.7)) retenu dans le cas d'un fluide newtonien,

$$\overline{\rho v_i'' v_j''} = -\mu_t \left(\frac{\partial \widetilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{v}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left(\overline{\rho k} + \mu_t \frac{\partial \widetilde{v}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (1.33)$$

où μ_t est la viscosité dynamique turbulente ($\mu_t = \overline{\rho} \nu_t$ avec ν_t est la viscosité cinématique turbulente) et l'énergie cinétique turbulente k est définie par :

$$\overline{\rho k} = \frac{1}{2} \overline{\rho v_k'' v_k''} \quad (1.34)$$

Cette modélisation fait donc intervenir une nouvelle inconnue : le coefficient de viscosité turbulente μ_t . Il y a trois principales approches proposées pour évaluer cette quantité : les

modèles algébriques qui ne demandent aucune équation supplémentaire, modèles à une équation et modèles à deux équations.

Modèles algébriques

Un modèle simple proposé par Prandtl [76] où le coefficient de viscosité turbulente est lié au gradient de la vitesse par l'expression algébrique suivante :

$$\mu_t = \frac{1}{2} \bar{\rho} l_m^2 \left| \frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} \right| \quad (1.35)$$

avec la longueur de mélange l_m à donner à l'aide de plusieurs relations empiriques mais dépend forcément de la configuration d'écoulement.

Modèles à une équation

Pour les modèles à une équation, la viscosité turbulente est donnée par :

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu l_{pk} \sqrt{k} \quad (1.36)$$

où C_μ est une constante obtenue expérimentalement égale à 0.09 et l_{pk} est une longueur caractéristique à spécifier, encore une fois sur la base de relations empiriques. Ces modèles nécessitent donc la résolution d'une équation supplémentaire de l'énergie cinétique turbulente k qui est obtenue à partir des équations de base :

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{v}_i k}{\partial x_i} = D_k + P_k + G_k - \bar{\rho} \epsilon \quad (1.37)$$

avec les termes du membre de droite suivants :

$$\begin{aligned} D_k &= -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho v_i'' v_j'' v_j''} - \overline{v_j'' \tau_{ij}} - \overline{v_j'' \tau_{ij}} \right) \\ P_k &= -\overline{\rho v_i'' v_j''} \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} \\ \bar{\rho} \epsilon &= \tau_{ij} \overline{\frac{\partial v_j''}{\partial x_i}} \\ G_k &= -\overline{v_j''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (1.38)$$

Ces termes D_k , P_k , $\bar{\rho} \epsilon$ et G_k représentent respectivement le terme de diffusion, le terme de production, le terme de dissipation et l'interaction fluctuation de vitesse et gradient de pression. Le transport turbulent de l'énergie cinétique k est modélisé par une loi gradient sous la forme :

$$D_k = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) \quad (1.39)$$

avec σ_k est égal à l'unité.

Le terme de production P_k est fermé. En suivant l'hypothèse de Boussinesq, ce terme représente une transformation d'énergie cinétique moyenne en énergie cinétique de turbulence.

Le terme d'interaction fluctuation de vitesse et gradient de pression G_k est nul lorsque la masse volumique est constante. Pour les écoulements à masse volumique variable sans réaction chimique, ce terme peut être modélisé de la façon suivante :

$$G_k = -\overline{v_j''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \quad (1.40)$$

où la constante σ_t est fixée entre 0.7 et 1 selon Bailly et Comte-Bellot [3].

Modèles à deux équations

Le modèle le plus utilisé parmi les modèles à deux équations est le modèle $k - \epsilon$ [41, 50] qui permet d'exprimer la viscosité turbulente sous la forme :

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (1.41)$$

Pour fermer les équations statistiques, l'équation de l'énergie cinétique turbulente k est écrite comme Eq.(1.37) et l'équation du taux de dissipation de la turbulence ϵ est modélisée basée la forme de celle de l'énergie cinétique turbulente :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{v}_i \epsilon}{\partial x_i} = D_\epsilon + C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon}{k} \bar{\rho} \epsilon + C_{\epsilon 3} \frac{\epsilon}{k} G_k \quad (1.42)$$

avec

$$D_\epsilon = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) \quad (1.43)$$

Les constantes du modèle $k - \epsilon$ sont répertoriées dans le tableau 1.1, voir par exemple [3, 88] :

C_μ	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	$C_{\epsilon 3}$	σ_k	σ_ϵ	σ_t
0,09	1,44	1,92	1,44	1	1,3	0,7

TABLE 1.1 – Constantes du modèle $k - \epsilon$

Le modèle $k - \epsilon$ est un des plus utilisés par sa simplicité et sa rentabilité. Les temps caractéristiques turbulents qui sont utilisés dans les modèles de combustion turbulente

peuvent être estimés respectivement par $\tau_t = k/\epsilon$ et $\tau_\eta = \sqrt{\epsilon/\nu}$ pour l'échelle intégrale et l'échelle de Kolmogorov. Les modèles du premier ordre de la turbulence comme le modèle $k-\epsilon$ assument une turbulence isotrope mais les écoulements réels présentent fréquemment des caractéristiques anisotropes fortes à grandes échelles. La formulation de Boussinesq (Eq.(1.33)) n'est plus appropriée dans ces cas. Une second méthode consiste donc à dériver directement les tenseurs de Reynolds $\overline{\rho v_i'' v_j''}$ par l'équation de transport comme Eq.(1.30). Cette approche correspond de la modélisation du second ordre pour le flux turbulent.

Modélisation du second ordre

La modélisation du second ordre des tensions de Reynolds, appelée aussi modélisation $R_{ij} - \epsilon$, consiste à résoudre six équations de transport pour les tensions de Reynolds ainsi qu'une équation pour le taux de dissipation ϵ (Eq.(1.42). Les composantes de la dissipation ϵ_{ij} sont donc estimées de la manière suivante : $\epsilon_{ij} = (2/3)\epsilon\delta_{ij}$. L'équation d'évolution pour les tensions de Reynolds s'écrit :

$$\frac{\partial \overline{\rho v_i'' v_j''}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{v}_k \overline{\rho v_i'' v_j''}}{\partial x_k} = D_{ij} + P_{ij} + G_{ij} - \bar{\rho} \epsilon_{ij} \quad (1.44)$$

avec les termes du membre de droite suivants :

$$\begin{aligned} D_{ij} &= -\frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho v_k'' v_i'' v_j''} - \overline{v_j'' \tau_{ik}} - \overline{v_i'' \tau_{jk}}) \\ P_{ij} &= -\overline{\rho v_k'' v_i''} \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_k} - \overline{\rho v_k'' v_j''} \frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_k} \\ \bar{\rho} \epsilon_{ij} &= \overline{\tau_{jk} \frac{\partial v_i''}{\partial x_k}} + \overline{\tau_{ik} \frac{\partial v_j''}{\partial x_k}} \\ G_{ij} &= -\overline{v_j''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \overline{v_i''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (1.45)$$

En utilisant la relation proposée par Daly et Harlow [28], nous pouvons écrire le terme de diffusion des tensions de Reynolds D_{ij} sous la forme suivante :

$$D_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(C_s \frac{k}{\epsilon} \overline{\rho v_k'' v_m''} \frac{\partial \widetilde{v_i'' v_j''}}{\partial x_m} \right) \quad (1.46)$$

avec $C_s = 0.25$. De la même façon que pour le terme de diffusion pour la dissipation D_ϵ dans l'Eq.(1.42), nous pouvons également écrire :

$$D_\epsilon = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(C_\epsilon \frac{k}{\epsilon} \overline{\rho v_k'' v_m''} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_m} \right) \quad (1.47)$$

avec $C_\epsilon = 0.18$. Le terme P_{ij} est fermé. Le terme de corrélation de pression moyenne G_{ij} peut être modélisé par une façon introduit dans les travaux de Djenidi et Antonia [31], Rotta [81], Naot et al. [66, 67] et Launder, Reece et Rodi [51]. Des détails supplémentaires sur le modèle $R_{ij} - \epsilon$ peuvent être trouvés par exemple dans les ouvrages de Hallback et al. [38] ou de Launder [49].

1.2.5 Flammes prémélangées turbulentes

La première description de la combustion turbulente a été considérée en 1940 par Damköhler qui a posé les bases du régime de flammelettes, i.e., structure interne de la flamme turbulente vu comme une flamme laminaire d'épaisseur très fine mais continuellement plissée et convectée par la turbulence [29]. Damköhler avait identifié aussi deux situations limites : si toutes les échelles de longueur et de temps des réactions chimiques sont faibles en comparaison des plus petites échelles de l'écoulement turbulent, la combustion doit être limitée aux zones de réaction minces similaires à celles des flammes laminaires. A l'autre extrême, si les échelles de longueur et de temps chimiques sont grandes en comparaison avec les plus grandes échelles de turbulence, la structure de la zone de réaction serait censée être plus aléatoire. Suivant cette idée, différents régimes limites de combustion en écoulement turbulent ont été proposées par différents auteurs (Barrère [4], Bray [11], Borghi [5, 6], Borghi et Destriau [7], Peters [70]) et visent à aider le modélisateur à choisir le cadre de modélisation le plus approprié pour une situation donnée.

Alors, afin de considérer l'écoulement turbulent, il est nécessaire d'introduire les échelles caractéristiques de longueur, de temps et de vitesse des réactions chimiques et de la turbulence. Nous définissons tout d'abord le nombre de Reynolds turbulent :

$$Re_t = \frac{v' l_t}{\nu} \quad (1.48)$$

où v' est l'échelle des fluctuations de vitesse ou la vitesse caractéristique de la turbulence représentative de l'intensité de la turbulence et l_t l'échelle intégrale de la turbulence. Le temps caractéristique de la turbulence est donc donné par : $\tau_t = l_t/v'$. Une définition équivalente de Re_t est déjà présentée dans l'Eq.(1.25), ici $v' = \sqrt{k}$. Pour un écoulement turbulent, nous supposons que le nombre de Reynolds turbulent est toujours supérieur

à l'unité. L'échelle de Kolmogorov l_η , voir l'Eq.(1.24), représente la taille des plus petites tourbillons dont l'énergie est totalement dissipée sous forme de chaleur. Le temps caractéristique défini par $\tau_\eta = l_\eta/v_\eta$ correspond à ces petits tourbillons, dans lequel v_η est la vitesse caractéristique de Kolmogorov. Les propriétés d'une flamme laminaire sont utilisées pour caractériser l'échelle chimique. Le temps caractéristique chimique τ_c est défini par : $\tau_c = \delta_L/S_L$ avec δ_L et S_L l'épaisseur et la vitesse de la flamme laminaire respectivement. Nous pouvons alors définir deux nombres caractéristiques sans dimensions. Ce sont les nombres de Damköhler Da et de Karlovitz Ka qui comparent le temps caractéristique chimique τ_c aux temps caractéristiques de la turbulence τ_t et τ_η :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t}{\delta_L} \frac{S_L}{v'} \quad (1.49)$$

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_\eta} = \frac{\delta_L}{l_\eta} \frac{v_\eta}{S_L} \quad (1.50)$$

Les longueurs, les temps et les vitesses caractéristiques de la turbulence peuvent être exprimés en fonction de l'énergie cinétique turbulente k , de la dissipation ϵ et de la viscosité cinématique du fluide ν :

$$v' = \sqrt{k} \quad l_t = \frac{v'^3}{\epsilon} \quad v_\eta = (\nu\epsilon)^{1/4} \quad l_\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4} \quad (1.51)$$

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

$$Re_t = Da^2 Ka^2 \quad (1.52)$$

Selon l'ouvrage de Borghi et Destriau [7], le diagramme de la figure 1.5, avec v'/S_L en ordonnées et l_t/δ_L en abscisses, met en évidence les trois grands types de flammes turbulentes prémélangées : les flammes “plissées”, les flammes “épaissies” et les flammes “plissées-épaissies”.

Les flammes “plissées”

Dans le régime de combustion des “flammes plissées” ou régime de “flammelettes”, la flamme turbulente est constituée d'une collection de flammes laminares (flammelettes) qui sont plissées par la turbulence. La structure interne de la flamme laminaire n'est pas perturbée par les tourbillons car les tailles de tourbillons sont toutes plus grandes

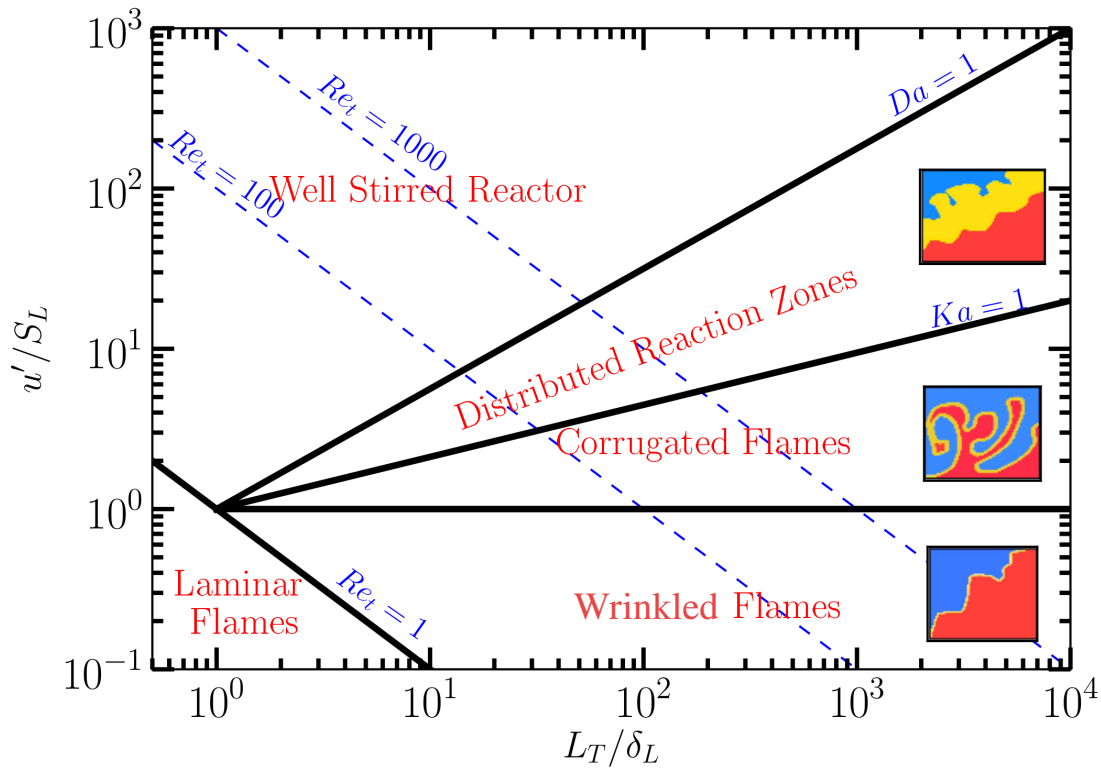


FIGURE 1.5 – Diagramme des différents régimes de combustion turbulente prémélangée.

que l'épaisseur de la flammelette, $l_\eta > \delta_L$. On distingue deux sous régimes selon que le rapport v'/S_L est inférieur ou supérieur à l'unité. Dans la situation où $v' < S_L$, les plus gros tourbillons ne sont pas suffisamment énergétiques pour provoquer des interactions entre les fronts de flamme. En revanche, lorsque l'intensité turbulente augmente ($v' > S_L$), les plus gros tourbillons sont suffisamment énergétiques pour plisser substantiellement la flamme au point de provoquer des interactions entre deux fronts adjacents. Des poches de gaz frais se forment alors dans les gaz brûlés. Pour cela, ce régime est souvent appelé "flamme plissée avec poches".

Dans ce régime, la flamme turbulente peut donc être considérée comme un ensemble de flammelettes d'épaisseur quasiment constante δ_L , courbées et plissées occupant une zone d'épaisseur δ_T . La quantité δ_T est définie comme l'épaisseur moyenne de la flamme turbulente, le "*flame brush*"¹ en anglais.

1. Dans la suite de ce mémoire, nous utilisons "*flame brush*" pour désigner l'épaisseur moyenne de la flamme turbulente ou bien le front turbulent lui-même.

Les flammes “plissées-épaissies”

Lorsque l'énergie cinétique turbulente k augmente et que l'échelle de Kolmogorov l_η diminue et devient de plus en plus proche de l'épaisseur des flammelettes δ_L , les structures turbulentes sont capables de pénétrer dans la structure de la flamme laminaire locale, provoquant ainsi son épaississement. La zone de préchauffage est donc affectée par ces tourbillons.

Les flammes “épaissies”

Si l'énergie cinétique turbulente k augmente encore et que l'échelle intégrale l_t est toujours constante de telle sorte que $\tau_t = \tau_c$ alors les interactions de flammelettes ont lieu à toutes les échelles, même les plus grandes. La flamme n'est plus plissée mais plutôt épaissie par la turbulence (les zones de préchauffage et de réaction sont perturbées par la turbulence).

Le diagramme de la figure 1.5 permet de choisir le modèle de combustion le mieux adapté à la situation que l'on cherche à représenter. Les développements proposés dans le cadre de ce mémoire concerneront principalement, mais pas exclusivement, le régime de “flammelettes”.

1.3 Conclusions

Afin d'éviter de résoudre directement les équations locales représentant l'évolution des grandeurs caractéristiques dans un écoulement réactif, nous avons simplifié ces équations en retenant un certain nombre d'hypothèses :

- la cinétique chimique peut être représentée par une réaction globale,
- le nombre de Mach est faible ($Ma \ll 1$),
- les espèces et la chaleur diffusent de la même manière à l'échelle moléculaire ($Le = 1$).

L'ensemble de ces hypothèses permet d'utiliser qu'une seule des deux variables suivantes : la variable d'avancement c ou la fraction massique Y pour connaître la température et toutes les espèces chimiques pour la combustion prémélangée. La résolution des équations

de la mécanique des fluides (conservation de la masse et quantité de mouvement), de la variable d'avancement ainsi que de la fraction massique suffisent à caractériser la flamme de prémélange en écoulement considéré. Nous n'étudierons que la résolution des équations de la mécanique des fluides et de la variable d'avancement dans la suite de ce mémoire.

Dans l'écoulement turbulent, les équations pour les quantités moyennes font apparaître des termes inconnus ($\overline{\rho v'' v''}$, $\overline{\rho v'' c''}$ et $\overline{\omega_c}$) qu'il faut modéliser. Nous utilisons dans cette étude le modèle $k - \epsilon$ pour modéliser le flux turbulent de la quantité de mouvement. La modélisation du flux turbulent scalaire et du taux de réaction chimique moyen fait l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 2

Modélisation de la combustion turbulente prémélangée

Les deux problèmes cruciaux de la combustion turbulente en général et combustion turbulente prémélangée en particulier sont de déterminer les relations de fermeture pour le taux de production chimique moyen $\overline{\omega}_c$ et pour les flux turbulents de masse, e.g., $\overline{\rho v'' c''}$. Celles-ci sont deux termes inconnus ce que nous devons modéliser pour résoudre les équations de transport moyennées. La modélisation du taux de réaction chimique moyen a fait l'objet de nombreux études avec différentes approches, basées soit sur de fermeture de type algébrique soit sur la résolution d'équation de transport. Nombreux modèles donc existent. Les modèles utilisés dans ce mémoire sont rassemblés dans ce chapitre.

2.1 Approches de Modélisation

Les trois principales approches utilisées pour décrire les flammes turbulentes sont présentées sur la figure (2.1) d'après l'article de revue de Veynante et Vervisch [96].

L'approche basée sur une analyse géométrique de la flamme décrit cette dernière comme une surface. Cette analyse est généralement utilisée avec une hypothèse de flammelettes (flammes plissées), ce qui permet à partir des propriétés physiques et dynamiques d'une isosurface (c ou Z) de déterminer le champ scalaire correspondant. La flamme est alors considérée comme une interface séparant les gaz frais des gaz brûlés (ou le combustible de l'oxydant). Il existe essentiellement deux méthodes de calcul, basées sur cette

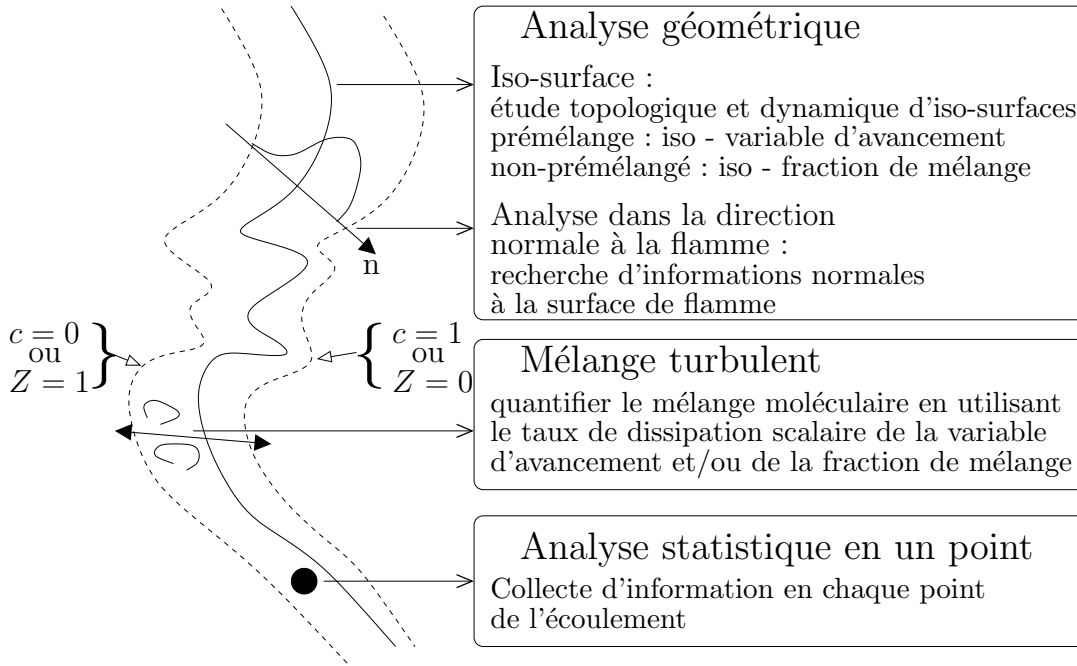


FIGURE 2.1 – Trois types d'analyses des flammes turbulentes prémélangées ou non prémélangées, d'après Veynante et Vervisch [96]

approche. La première consiste à dériver une équation de transport d'une iso-surface. La seconde utilise le concept de densité de surface de flamme, notée Σ pour estimer le taux de réaction moyen.

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). Lorsque le nombre de Damköhler (Da) est grand, le taux de réaction chimique est limité par le mélange turbulent décrit par les termes de dissipation scalaire ϵ_c , ϵ_Z qui apparaissent dans les équations pour les variances $\widetilde{c''^2}$ (1.32) et $\widetilde{Z''^2}$. On peut montrer facilement, dans le cas de flammes prémélangées plissées, qu'une relation algébrique existe entre le taux de dissipation ϵ_c et le taux de réaction chimique moyen $\overline{\omega_c}$ et le terme $\overline{c''\omega_c}$ [58]. Le taux de dissipation scalaire ϵ_c est un paramètre clé pour la modélisation de la combustion turbulente.

Les propriétés statistiques des champs scalaires, en un point de l'écoulement (moyennes, variances ...), peuvent être déduites de la fonction de densité de probabilité (PDF), notée $P(c; x, t)$. L'utilisation d'une méthode de PDF permet d'obtenir les propriétés statistiques

dans le front de flamme. Les quantités statistiques peuvent alors être exprimées :

$$\bar{c} = \int_0^1 cP(c; x, t)dc \quad \overline{c^2} = \int_0^1 (c - \bar{c})^2 P(c; x, t)dc \quad (2.1)$$

La condition de normalisation de la PDF s'écrit :

$$\int_0^1 P(c; x, t)dc = 1 \quad (2.2)$$

Lorsque plusieurs variables sont nécessaires pour décrire la structure de la flamme, une PDF jointe doit être utilisée. Par exemple, si les variables sont la vitesse et l'avancement de la réaction, la PDF s'écrit $P(c, v; x, t)$. 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 :

$$\bar{\omega}_c = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^1 \omega_c P(c, v; x, t)dvdc \quad (2.3)$$

La PDF jointe peut être décomposée en deux PDF de telle sorte que chaque PDF ne soit fonction que d'une variable. Ce procédé nécessite l'introduction d'une PDF conditionnée. La PDF $P(c, v; x, t)$ s'exprime alors de la façon suivante :

$$P(c, v; x, t) = P(c|v; x, t)P(v; x, t) \quad (2.4)$$

$P(v; x, t)$ est la PDF de la vitesse indépendante de la variable d'avancement et $P(c|v; x, t)$ est la PDF de la variable d'avancement conditionnée en une valeur particulière de la vitesse.

Lorsque la masse volumique varie, il est plus pratique d'utiliser une PDF définie au sens de Favre, soit $\tilde{P}(c; x, t)$:

$$\tilde{P}(c; x, t) = \frac{\rho P(c; x, t)}{\bar{\rho}} \quad (2.5)$$

Dans ce mémoire, les modèles de combustion turbulent utilisés sont basés sur l'approche statistique par le biais de PDF de type présumée. Nous allons maintenant présenter des modèles qui ont été proposés pour représenter les flammes turbulentes.

2.2 Modèles de combustion turbulente

2.2.1 Modèle “Eddy Break-Up”

Le modèle “Eddy Break-Up” est basé sur l’analyse des prémélanges du régime des flammes plissées où les phénomènes chimiques sont très rapides comparés aux phénomènes turbulents : $\tau_c \ll \tau_t$ et $\tau_c < \tau_\eta$. La zone de réaction est alors comme une collection de poches de gaz frais et de gaz brûlés séparées par des interfaces réactives. Le taux de réaction chimique moyen est donc contrôlé par le temps caractéristique de turbulence τ_t . Ce temps caractéristique peut être estimé de l’énergie cinétique turbulente k et taux de dissipation ϵ : $\tau_t = k/\epsilon$. Les travaux de Spalding [91] ont abouti, après quelques modifications, à la relation suivante pour le taux de réaction chimique moyen :

$$\bar{\omega}_c = C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \quad (2.6)$$

où C_{EBU} est la constante du modèle et de l’ordre de l’unité. La formule (2.6) a été justifiée théoriquement plus tard par Bray et Moss [58] ce qui a permis de donner une interprétation physique à la constante C_{EBU} .

2.2.2 Modèle Bray-Moss-Libby

Le modèle BML a été proposé initialement en 1977 par Bray et Moss [58] et a depuis développé par Bray, Moss et Libby puis par Bray, Champion et Libby, voir pour plus de détails [12].

L’idée de base est de présumer la forme de la PDF de la variable d’avancement c comme une somme de gaz frais, de gaz brûlés et de gaz en train de brûler :

$$\tilde{P}(c; x, t) = \underbrace{\alpha_c(x, t)\delta(c)}_{\text{gaz frais}} + \underbrace{\beta_c(x, t)\delta(1 - c)}_{\text{gaz brûlés}} + \underbrace{\gamma_c(x, t)\tilde{f}(c; x, t)}_{\text{gaz en cours de réaction}} \quad (2.7)$$

où α_c , β_c et γ_c sont respectivement les probabilités de trouver des gaz frais, des gaz brûlés et des gaz en train de brûler. $\delta(c)$ et $\delta(1 - c)$ sont respectivement les distributions de Dirac correspondant aux gaz frais et aux gaz brûlés. La normalisation de la PDF conduit à :

$$\alpha_c + \beta_c + \gamma_c = 1 \quad (2.8)$$

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

$$\bar{\omega}_c(x, t) = \bar{\rho}/\rho \gamma_c(x, t) \int_0^1 \omega(c) \tilde{f}(c; x, t) dc \quad (2.9)$$

L'objectif est de déterminer les paramètres inconnus de la PDF α_c , β_c , γ_c ainsi que la fonction $\tilde{f}$.

On considère maintenant le régime des flammes plissées, c'est-à-dire que les nombres de Reynolds et de Damköhler sont grands. Dans ce régime, la combustion est contrôlée par le transport turbulent et la zone de réaction peut être considérée comme étant infiniment mince. La PDF de c est alors quasiment bimodale ($\gamma_c \ll \alpha_c, \beta_c$), elle s'écrit :

$$\tilde{P}(c; x, t) = \alpha_c(x, t)\delta(c) + \beta_c(x, t)\delta(1 - c) + \mathcal{O}(1/Da) \quad (2.10)$$

La normalisation de la PDF et l'expression de $\tilde{c}$ permettent de déterminer les paramètres α_c et β_c :

$$\tilde{c} = \int_0^1 c \tilde{P}(c; x, t) dc = \beta_c \quad \text{et} \quad \alpha_c = 1 - \beta_c \quad (2.11)$$

La variance peut être calculée en fonction de $\tilde{c}$, elle s'écrit alors :

$$\widetilde{c''^2} = \alpha_c \tilde{c}^2 + \beta_c (1 - \tilde{c})^2 = \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \quad (2.12)$$

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

On constate que la PDF ne permet pas de calculer le terme source moyen car $\gamma_c \rightarrow 0$ dans l'équation (2.9). Cependant, on peut démontrer que dans ce cas limite, le terme source moyen est proportionnel au taux de dissipation scalaire. En simplifiant une équation de transport pour la variance ($\tilde{c}(1 - \tilde{c})$), on obtient :

$$-2\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i} \frac{\partial c}{\partial x_i} = \bar{\omega}_c - 2\bar{c}\bar{\omega}_c \quad (2.13)$$

En posant $\bar{\rho}\epsilon_c = \overline{\rho D(\partial c''/\partial x_i)^2}$ et $c_m = \bar{c}\bar{\omega}_c/\bar{\omega}_c$, le terme source moyen s'exprime alors de la façon suivante :

$$\bar{\omega}_c = \frac{\bar{\rho}\epsilon_c}{(2c_m - 1)} \quad (2.14)$$

Le terme source moyen est donc fonction de la dissipation ϵ_c qui caractérise le mélange et de c_m qui caractérise la réaction chimique. La dissipation peut être résolue par un modèle

algébrique de relaxation linéaire : $\bar{\rho}\epsilon_c = \overline{\rho c''^2}/(R_c\tau_t)$, R_c est constant. On obtient alors :

$$\bar{\omega}_c = \frac{1}{(2c_m - 1)} \frac{\overline{\rho c''^2}}{R_c\tau_t} = \frac{1}{(2c_m - 1)} \bar{\rho} \frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}{R_c\tau_t} \quad (2.15)$$

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

$$C_{EBU} = 1/R_c(2c_m - 1) \quad (2.16)$$

2.2.3 Modèle Bray-Champion-Libby

Lorsque le temps chimique n'est plus infiniment petit devant le temps caractéristique de la turbulence, la PDF de l'avancement de la réaction c ou de la température ne peut plus être considérée comme quasi bimodale. La forme de la PDF doit passer d'un pic $\delta(c)$ dans les gaz frais à un pic $\delta(1 - c)$ dans les gaz brûlés de façon continue. La variance $\widetilde{c''^2}$ doit également varier à la traversée de la flamme, en restant inférieure à sa valeur maximale $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$, valeur pour laquelle la PDF est bimodale. La forme présumée de la PDF dépend maintenant des trois paramètres α_c , β_c et γ_c comme (2.7). La variable d'avancement moyenne $\tilde{c}$ (premier moment) et la variance $\widetilde{c''^2}$ (second moment) peuvent s'écrire de la manière suivante :

$$\tilde{c} = \beta_c + \gamma_c I_1 \quad (2.17)$$

$$\widetilde{c''^2} = \beta_c + \gamma_c I_2 - \tilde{c}^2 \quad (2.18)$$

où les quantités intégrales I_1 et I_2 désignent les moments conditionnés en premier-ordre et en second-ordre dans la structure de flamme, qui s'expriment de la façon suivante :

$$I_1 = \int_0^1 c \tilde{f}(c) dc \quad (2.19)$$

$$I_2 = \int_0^1 c^2 \tilde{f}(c) dc \quad (2.20)$$

La fonction $\tilde{f}(c)$ représente la PDF conditionnée dans la structure interne de flammelettes, i.e. $0 < c < 1$, sa condition de normalisation s'écrit :

$$\int_0^1 \tilde{f}(c) dc = 1 \quad (2.21)$$

Cette fonction $\tilde{f}(c)$ peut être exprimée de la façon suivante [96] :

$$\tilde{f}(c) = \frac{1}{\delta_L} \left(\frac{dc}{dx} \right)_f^{-1} \quad (2.22)$$

La variance de la variable de progrès $\widetilde{c''^2}$ tend vers sa valeur maximale $\widetilde{c}(1 - \widetilde{c})$ à la traversée de la flamme, le taux de ségrégation S peut être donc défini comme le rapport de la variance à sa valeur maximale de la façon suivante :

$$S = \frac{\widetilde{c''^2}}{\widetilde{c}(1 - \widetilde{c})} \quad (2.23)$$

En utilisant les équations (2.17) et (2.18), la probabilité de trouver les structures de flammelettes γ_c peut s'exprimer de la manière suivante :

$$\gamma_c = (1 - S) \frac{\widetilde{c}(1 - \widetilde{c})}{I_1 - I_2} \quad (2.24)$$

Ainsi, le taux de réaction chimique moyen présenté par l'équation (2.9) se ré-écrit :

$$\overline{\omega}_c = \overline{\rho}(1 - S)\widetilde{c}(1 - \widetilde{c}) \frac{I_\omega}{I_1 - I_2} \quad (2.25)$$

où I_ω est le taux de réaction chimique moyen conditionné à l'intérieur de la structure flammelette qui peut être obtenu des calculs de flamme laminaire. Le taux de réaction chimique laminaire s'exprime sous la forme de type Arrhénius comme l'équation (1.21). La quantité I_ω s'écrit alors :

$$I_\omega = \int_0^1 \frac{\omega(c)}{\rho} \widetilde{f}(c) dc = \int_0^1 B(1 - c) \exp \left[\frac{-\beta(1 - c)}{1 - \alpha(1 - c)} \right] \widetilde{f}(c) dc \quad (2.26)$$

L'expression du taux de réaction chimique (2.25) a la forme qui est proportionnelle au terme $\widetilde{c}(1 - \widetilde{c})$. Ce terme apparaît aussi dans les modèles de combustion turbulente EBU et BML. Pourtant, l'expression (2.25) comporte également le taux de ségrégation S qui n'est pas constant à la traversée du *flame brush*. Ce modèle BCL est présenté dans l'ouvrage de Bray et al. [19].

2.2.4 Modèles à une Equation de Transport

Comme l'on a montré dans la paragraphe du modèle BML, le taux de réaction moyen est proportionnel à la dissipation scalaire, voir l'Eq. (2.14). Ce taux de dissipation peut être résolu aussi par une équation de transport. Une équation de transport pour ce taux de dissipation d'un scalaire a été proposée par Mantel et Borghi [56] et modifiée après par Mura et Borghi [61] dans le cas où les réactions chimiques sont très rapides et la masse

volumique constante :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\rho} \epsilon_c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} (\tilde{v}_i - \tilde{U}_{L_i}) \epsilon_c \right) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} D_T \frac{\partial \epsilon_c}{\partial x_i} \right) \\
&+ C_{P_Y} \bar{\rho} D_T \frac{\epsilon}{k} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} + C_{P_U} \bar{\rho} \nu_T \frac{\epsilon_c}{k} \frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_k} \\
&+ \bar{\rho} \alpha_0 \frac{\epsilon}{k} \epsilon_c - \bar{\rho} \beta_0 \frac{\epsilon_c^2}{c''^2}
\end{aligned} \tag{2.27}$$

où α_0, β_0 sont des constantes du modèle et $\tilde{U}_{L_i}$ est la moyenne des vitesses de propagation des flammes locales, exprimée de la façon suivante :

$$\tilde{U}_{L_i} = \frac{S_L}{1 + v''/S_L} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} / \sqrt{\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_j}} \tag{2.28}$$

Afin d'appliquer à des configurations réelles de combustion, une équation de transport pour la dissipation en prenant en compte les effets de variations de masse volumique est étudiée, voir l'article de Mura et al. [60] pour référence. Compte tenu de la complexité de ce modèle, on ne l'utilise pas dans la suite du mémoire.

2.2.5 Conclusions

Nous avons présenté les différents modèles pour le taux de réaction chimique moyen en combustion turbulente prémélangée, où le régime de flammelettes est considéré. Ces modèles (EBU, BML et BCL) ont été très utilisés dans les codes de calcul industriel et laboratoire car ils sont simples à mettre en œuvre puisqu'ils ne nécessitent aucune équation de transport supplémentaire.

Pour compléter l'interaction combustion-turbulence, nous allons considérer la modélisation du flux turbulent scalaire dans la suite de ce chapitre.

2.3 Transports turbulents scalaires

L'équation de transport moyenne pour la variable d'avancement (1.31) fait apparaître le flux scalaire turbulent $\overline{\rho v_i'' c''}$. La première modélisation du flux turbulent est d'utilisation une hypothèse de "transport gradient" pour la variable d'avancement c , elle s'écrit :

$$\overline{\rho v_i'' c''} = -\bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \tag{2.29}$$

où $D_t = \nu_t / Sc_t$ est le coefficient de diffusion turbulente, $\mu_t = \bar{\rho} \nu_t$ la viscosité turbulente et Sc_t le nombre de Schmidt turbulent. Comme la définition de D_t , cette quantité est alors toujours positive. Le gradient $\partial \tilde{c} / \partial x_i$ est aussi positif et la relation (2.29) conduit donc à un signe négatif pour le flux turbulent : $\overline{\rho v_i'' c''} < 0$.

Des études théoriques et expérimentales [16, 53, 90] ont montré que le flux turbulent $\overline{\rho v_i'' c''}$ peut avoir, dans certaines régions de l'écoulement, le même signe que le gradient de la variable d'avancement moyenne $\partial \tilde{c} / \partial x_i$. Dans ce cas, il est évident que l'expression (2.29) n'est plus applicable. Ce phénomène est connu comme le transport turbulent à contre-gradient ou le transport turbulent non-gradient.

2.3.1 Transport turbulent contre-gradient

Le transport turbulent à contre-gradient peut-être expliqué théoriquement utilisant l'approche de Bray, Moss et Libby décrit au paragraphe 2.2.2. Dans le régime de flamme-lettes où les nombres de Reynolds et Damköhler sont grands, la probabilité d'être dans les flammelettes γ_c est négligeable : $\gamma_c \sim \mathcal{O}(1/Da)$. On considère maintenant un écoulement monodimensionnel turbulent réactif normal au front de flamme moyen. La PDF jointe de vitesse et d'avancement s'écrit de façon analogue à la relation (2.10) :

$$\tilde{P}(v, c; x, t) = \alpha_c(x, t) \delta(c) P(v|c=0) + \beta_c(x, t) \delta(1-c) P(v|c=1) + \mathcal{O}(1/Da) \quad (2.30)$$

La vitesse moyenne $\tilde{v}$ peut alors être décomposée de la manière suivante :

$$\tilde{v} = \alpha_c \bar{v}_u + \beta_c \bar{v}_b = (1 - \tilde{c}) \bar{v}_u + \tilde{c} \bar{v}_b \quad (2.31)$$

$\bar{v}_u$ et $\bar{v}_b$ sont respectivement les vitesses moyennes conditionnées dans les gaz frais et dans les gaz brûlés :

$$\bar{v}_u = \int v \tilde{P}(v|c=0) dv \quad \text{et} \quad \bar{v}_b = \int v \tilde{P}(v|c=1) dv \quad (2.32)$$

Cette PDF jointe permet d'exprimer le flux turbulent de c :

$$\widetilde{v'' c''} = \tilde{c}(1 - \tilde{c})(\bar{v}_b - \bar{v}_u) \quad (2.33)$$

Du fait de l'expansion thermique $\rho_b < \rho_u$ et de la conservation de la masse à la traversée du front de flamme local $\rho_b \bar{v}_b = \rho_u \bar{v}_u$, on a :

$$\bar{v}_b > \bar{v}_u \quad (2.34)$$

L'expression (2.33) conduit donc à un signe positif pour le flux turbulent : $\widetilde{v''c''} > 0$.

Cette relation, le transport turbulent est donc dans ce cas à contre-gradient.

Lorsque le facteur d'expansion thermique τ augmente, le transport turbulent à contre-gradient sera augmenté aussi [57]. Les résultats des simulations numériques directes [82, 93, 95] ont montrés que la diffusion du scalaire est influencée par l'intensité de la turbulence v'/S_L dans les gaz frais.

Pour prendre en compte le transport turbulent à contre-gradient dans les simulations numériques, une proposition utilisée plus générale est de résoudre une équation de transport pour ce terme. Les termes inconnus apparus dans l'équation de transport peuvent être extraits des simulations numériques directes. Cependant, la modélisation de ces termes est complexe pour le cadre de ce mémoire. Pour cette raison, nous allons considérer un modèle algébrique permettant de représenter le flux à contre-gradient.

Une analyse simple proposée et vérifiée par Veynante et al. [95] dans laquelle le nombre de Bray $N_B = \tau S_L/v'$ a été introduit dans le but de caractériser la transition d'un type de transport gradient à un contre-gradient. Ce nombre sans dimension est aussi un paramètre important dans la fermeture de la modélisation généralisée du flux turbulent scalaire que nous allons présenter dans le chapitre 4.

2.3.2 Conclusion

L'hypothèse gradient employée pour la diffusion turbulente d'un scalaire est mise en défaut dans les flammes prémélangées. Pour prendre en compte la diffusion à contre-gradient, un modèle qui permet la transition d'un type de transport à un autre doit être modélisé. Cela est aussi l'objectif dans le chapitre 4 de ce mémoire. Dans certains cas, pour des raisons de simplicité, l'hypothèse gradient pour la diffusion turbulente est encore utilisée dans les simulations numériques.

Chapitre 3

Etude de flammes prémélangées monodimensionnelles

Dans ce chapitre, la géométrie que nous considérons est celle d'une flamme plane monodimensionnelle se propageant au sein d'un prémélange réactif de la droite vers la gauche. Les réactions chimiques sont représentées par le biais d'un mécanisme global et irréversible du type : R (réactifs) $\rightarrow$ P (produits). De plus, nous faisons l'hypothèse que le nombre de Mach de l'écoulement est largement inférieur à l'unité ce qui nous permet de négliger l'effet des variations de pression. Enfin, nous faisons l'hypothèse que le transport moléculaire suit la loi de Fick.

3.1 Equation de conservation

Dans le cas d'une flamme laminaire monodimensionnelle, l'équation de continuité (1.5) et l'équation de transport de la variable d'avancement (Eq.1.20) peuvent être ré-écrites de la manière suivante, où l'indice 1 est omis pour simplifier les notations :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v}{\partial x} = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \frac{\partial \rho v c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \omega_c \quad (3.2)$$

Le coefficient de diffusion moléculaire est une fonction de la variable d'avancement, i.e. $D = D(c)$. La solution instationnaire correspond à un front qui se propage à vitesse

constante S_L dans le repère fixe. Pour déterminer cette vitesse, nous considérons la solution de l'équation stationnaire dans le repère lié au front de flamme avec $S_L = -v.n$ et $\partial c/\partial t = 0$ où le vecteur normal au front de flamme est $n = -\nabla c/||\nabla c||$. L'équation (3.1) conduit à $\rho v = \rho_u S_L$ et à l'état stationnaire (3.2) se ré-écrit de la manière suivante :

$$\rho_u S_L \frac{dc}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\rho D \frac{dc}{dx} \right) + \omega_c \quad (3.3)$$

3.1.1 Loi d'Arrhénius

Le terme source chimique correspond strictement à une loi d'Arrhénius telle qu'elle a été définie par l'Eq.(1.21) :

$$\omega_c = \rho B(1 - c) \exp \left[\frac{-\beta(1 - c)}{1 - \alpha(1 - c)} \right] \quad (3.4)$$

L'évolution de ce terme à travers la flamme est représentée sur la figure (3.1) ci-dessous.

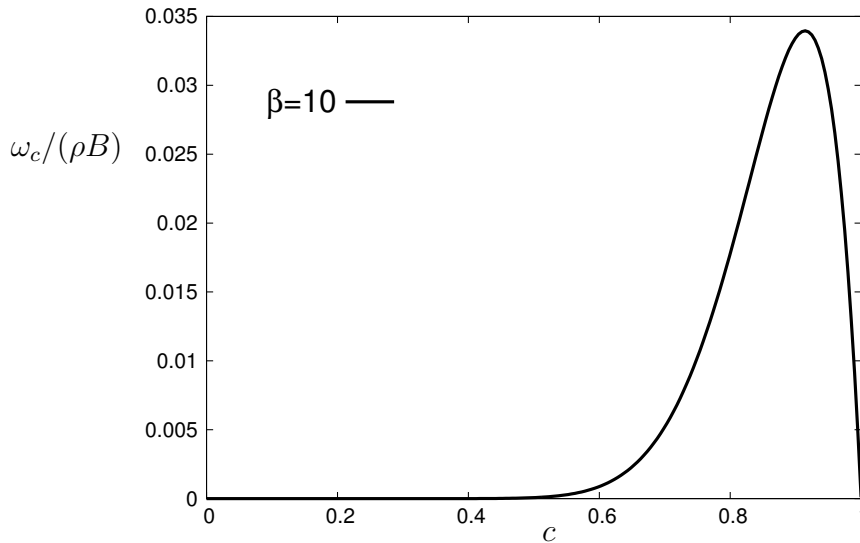


FIGURE 3.1 – Taux de réaction chimique d'une flamme laminaire pour une valeur du nombre de Zel'dovich $\beta = 10$.

La structure interne d'une flamme laminaire présente deux zones principales : une zone de préchauffage, plus large, qui est dominée par les processus de convection et de diffusion moléculaire suivie d'une zone plus fine où les réactions chimiques se produisent (équilibre diffusion-réaction). Pour les grandes valeurs du nombre de Zel'dovich β , l'épaisseur de la zone réactive tend vers 0. On montre que l'épaisseur de cette zone est inversement

proportionnelle au nombre de Zel'dovich, i.e., $\delta_R = \delta_L/\beta$. Les résultats expérimentaux montrent que, dans le cas des hydrocarbures usuels, la valeur de β est de l'ordre de 10.

3.1.2 Solution numérique pour une flamme laminaire

Nous cherchons la solution de l'équation (3.3) en considérant la forme adimensionnelle suivante :

$$\frac{dc}{d\xi} = \frac{d}{d\xi} \left(\frac{\rho D}{\rho_u D_u} \frac{dc}{d\xi} \right) + E \mathcal{F}(c; \tau, \beta) \quad (3.5)$$

où

$$\xi = \frac{S_L}{D_u} x, \quad E = \frac{B D_u}{S_L^2}$$

D_u désigne le coefficient de diffusion moléculaire dans les gaz frais et E est un nombre sans dimension. Suivant (3.4), le taux de réaction chimique est donné par $\omega_c = \rho_u B \mathcal{F}(c; \tau, \beta)$ avec la fonction $\mathcal{F}(c; \tau, \beta)$ définie de la manière suivante :

$$\mathcal{F}(c; \tau, \beta) = \frac{1-c}{1+\tau c} \exp \left[\frac{-\beta(1-c)}{1-\alpha(1-c)} \right] \quad (3.6)$$

En posant $Y = dc/d\xi$, l'équation (3.5) se met sous la forme :

$$\frac{dY}{dc} = 1 - \frac{E \mathcal{F}(c; \tau, \beta)}{Y} \quad (3.7)$$

où, pour simplifier, on a supposé $\rho D \approx \rho_u D_u$, E désigne la valeur propre. Cette équation est résolue par la méthode *Boundary Value Problem* (BVP) avec les conditions aux limites : $Y \approx c$ aux gaz frais et $Y \approx A(1-c)$ aux gaz brûlés, où A est évalué, suivant Bray *et al.* [19], de la manière suivante :

$$A = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4E}{1+\tau}} - 1 \right)$$

Les profils de la variable de gradient $Y(\xi)$ et de la variable d'avancement $c(\xi)$ avec les valeurs du nombre nondimensionnelle E sont présentés sur la figure 3.2 pour différentes valeurs du nombre de Zel'dovich $\beta = 5$, $\beta = 10$ et $\beta = 50$. Nous nous référons à l'ouvrage de Borghi et Champion [8] pour plus détails quant à la résolution de l'équation (3.3) lorsque le nombre de Zel'dovich tend vers l'infini ($\beta \rightarrow \infty$).

Nous allons utiliser $\beta = 10$ dès maintenant pour évaluer la valeur du facteur pré-exponentiel

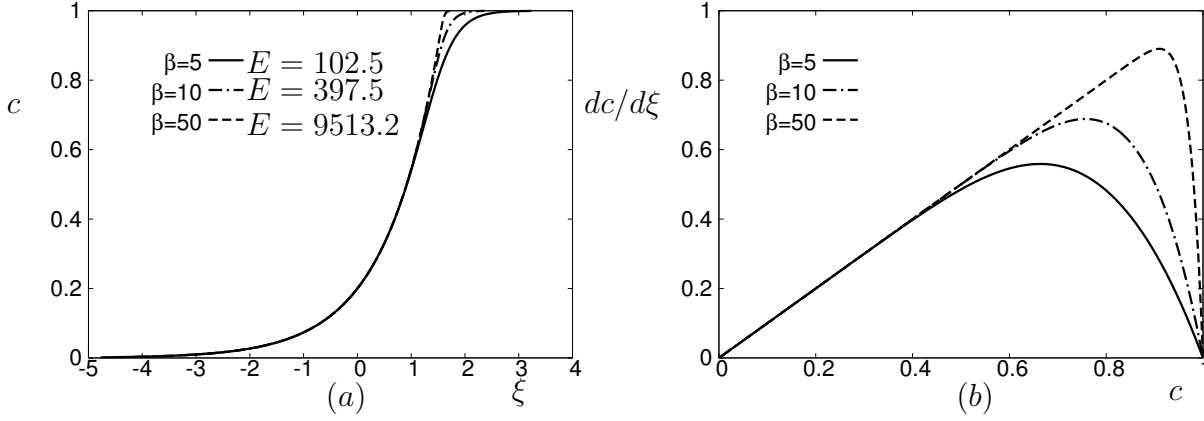


FIGURE 3.2 – Structure d’une flamme laminaire $c(\xi)$ et son gradient $dc/d\xi$ issues de simulations numériques conduites pour différentes valeurs de β .

B , avec $D_u = 5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ issu d’un calcul basé sur l’emploi d’un mécanisme chimique détaillé en utilisant la bibliothèque Cantera. Nous considérerons une procédure spécifique pour calculer cette valeur dans la section suivante. Pour un mélange de méthane et l’air en condition stoechiométrique ($\Phi = 1.0$), la vitesse de flamme laminaire S_L obtenue à partir de ces données est $S_L = 0.386 \text{ m/s}$. Le taux d’expansion τ est choisi égal à 6.5, cette valeur correspond à celle issue de Cantera avec $\Phi = 1.0$. Nous pouvons donc déterminer : $B = (ES_L^2)/D_u = 1.18 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$.

Avec les valeurs de B et D_u imposées, les vitesses de propagation laminaires peuvent être déterminées par $S_L = \sqrt{BD_u/E}$ pour différentes valeurs du nombre de Zel’dovich respectivement $S_L = 75.8 \text{ cm/s}$ pour $\beta = 5$, $S_L = 38.6 \text{ cm/s}$ pour $\beta = 10$ et $S_L = 7.9 \text{ cm/s}$ pour $\beta = 50$. Un des premiers développements asymptotiques pour déterminer la vitesse de propagation laminaire S_L est proposé dans le travail de Zel’dovich et Frank-Kamenetskii [99]. Ainsi, le régime de flamme laminaire est aujourd’hui appelé le régime de type *ZFK*. La valeur de la vitesse obtenue est proportionnelle à la racine carrée au rapport du coefficient de diffusion avec le temps caractéristique chimique :

$$S_{ZFK} = \sqrt{2 \frac{\rho_b}{\rho_u} \frac{D_u}{\beta^2 \tau_c}} \quad (3.8)$$

En comparant les expressions obtenues par le développement asymptotique (3.8) et la solution numérique $S_L = \sqrt{BD_u/E}$, cela conduit à :

$$B = \frac{1}{\tau_c} \quad \text{et} \quad E = \frac{\rho_u}{\rho_b} \frac{\beta^2}{2} = (1 + \tau) \frac{\beta^2}{2} \quad (3.9)$$

Avec la valeur de $B = 1.18 \cdot 10^6 s^{-1}$ obtenue numériquement, nous voyons que le temps caractéristique chimique est extrêmement petit.

3.1.3 Solution numérique pour la flamme laminaire obtenue avec un mécanisme chimique détaillé

Nous considérons maintenant un mécanisme chimique détaillé en utilisant la bibliothèque Cantera pour évaluer de façon plus réaliste les caractéristiques de la flamme laminaire. Un mélange de méthane et d'air de richesse $\Phi = 1.0$ est considéré. La chimie est décrite par le mécanisme détaillé GRI3.0 [10]. Cette procédure permet d'évaluer le taux de réaction chimique ω_c dont la forme est tracée sur la figure 3.3.

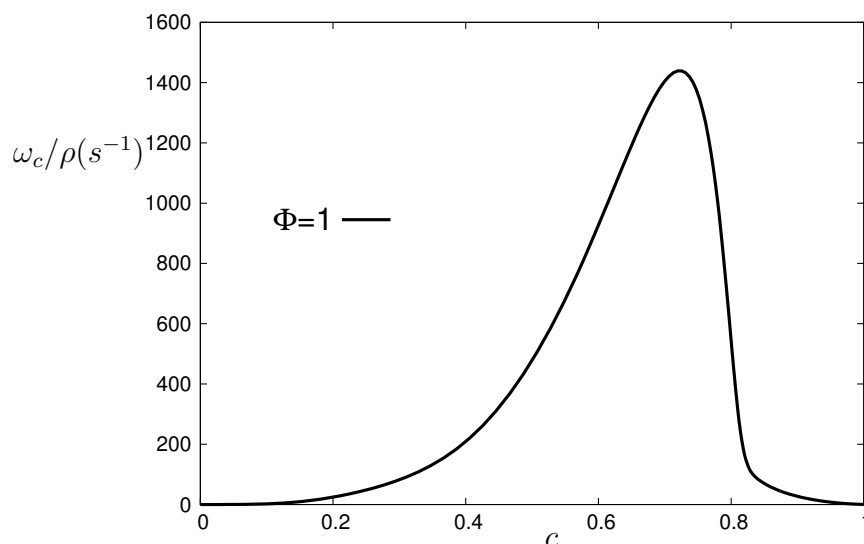


FIGURE 3.3 – Taux de réaction chimique (dégagement de chaleur normalisé) obtenu par un mécanisme chimique détaillé en utilisant la bibliothèque de Cantera.

La forme du taux de réaction chimique obtenue par le mécanisme chimique détaillé est différente de celle imposée par la loi d'Arrhénius, voir Fig. 3.1. Nous observons que le profil de réaction chimique détaillée présente un comportement spécifique du côté des gaz brûlés. Du point de vue du dégagement de chaleur, les effets de la cinétique chimique deviennent plus réduits dans la zone comprise entre $c = 0.9$ et $c = 1.0$. La figure 3.4 présente les profils de la variable d'avancement déduits de la masse volumique et l'évolution de son gradient. Nous pouvons voir le comportement spécifique du gradient de c dans la zone des

gaz brûlés. La vitesse de propagation pour $\Phi = 1.0$ est 38.6 cm/s . Afin d'estimer la valeur

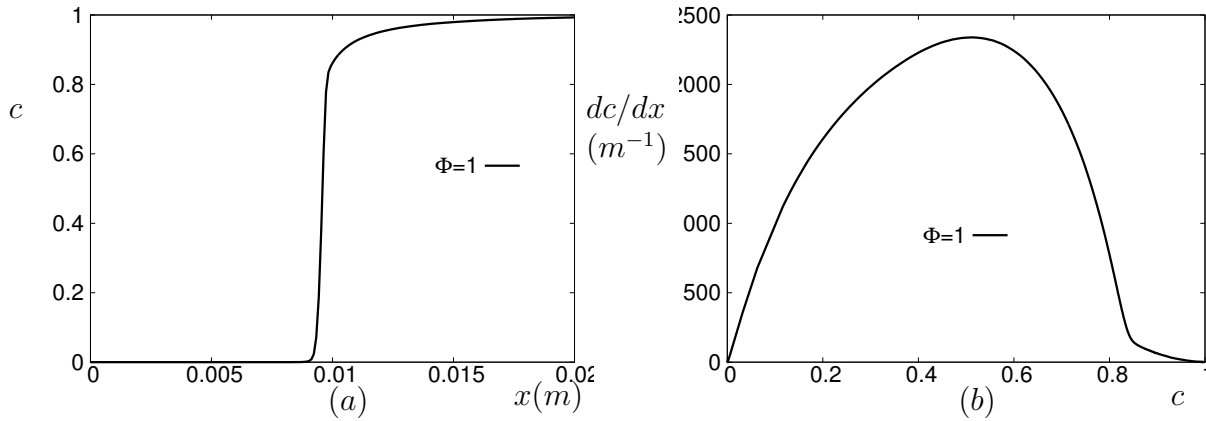


FIGURE 3.4 – Structure de flamme laminaire $c(x)$ et son gradients dc/dx issues des simulations numériques conduite avec un mécanisme chimique détaillé pour la richesse $\Phi = 1.0$.

du coefficient de diffusion moléculaire dans les réactifs D_u , nous utilisons les données obtenues de CANTERA avec $\Phi = 1.0$. L'équation stationnaire (3.3) peut être ré-écrite en fonction du coefficient diffusif D de la manière suivante :

$$\rho \frac{dc}{dx} \frac{dD}{dx} + \frac{d}{dx} \left(\rho \frac{dc}{dx} \right) D - \rho_u S_L \frac{dc}{dx} + \omega_c = 0 \quad (3.10)$$

Cette équation est du type équation différentielle ordinaire (EDO) pour la variable D . Elle peut être résolue facilement en utilisant le logiciel *Mathematica*TM. Figure 3.5(a) montre l'évolution de D en fonction de la variable d'avancement c et la figure 3.5(b) est un zoom du côté des gaz frais. Le coefficient diffusif obtenu a la forme d'une fonction

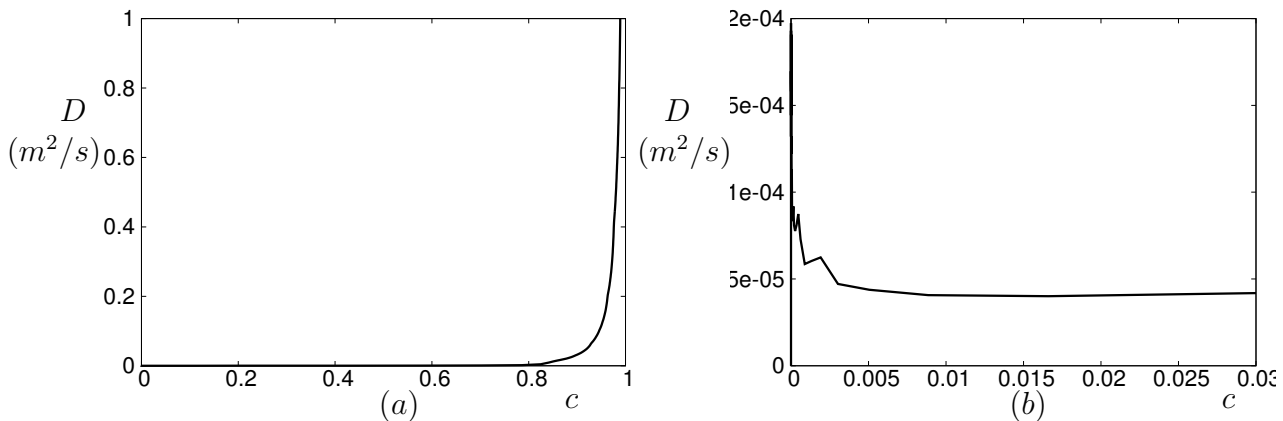


FIGURE 3.5 – Coefficient diffusion moléculaire D en fonction de la variable d'avancement issue de Cantera.

exponentielle. Il est quasiment constant du côté des gaz frais. La valeur de D_u est donc

choisie égale à $5 \cdot 10^{-5} m^2/s$ lorsque le profil devient stable, voir Fig.3.5(b). Cette valeur a été utilisée pour estimer la valeur du facteur pré-exponentiel B qui intervient dans l'expression du taux de réaction chimique d'Arrhénius dans la section précédente. Dans la suite de ce mémoire, nous estimons le coefficient de diffusion moléculaire dans les gaz frais $D_u = 5 \cdot 10^{-5} m^2/s$. Cette valeur est de l'ordre de grandeur du coefficient de diffusion thermique ($\mathcal{O}(10^{-5})$).

3.2 Flammes turbulentes prémélangées 1D

Nous considérons maintenant une flamme monodimensionnelle dans l'écoulement turbulent. L'équation de continuité moyenne (1.29) et l'équation de transport de la variable d'avancement moyenne (1.31) sont ré-écrites de la façon suivante :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{v}}{\partial x} = 0 \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\overline{\rho D \frac{\partial c}{\partial x}} - \overline{\rho v'' c''} \right) + \bar{\omega} \quad (3.12)$$

L'équation simplifiée déduite des deux équations (3.11) et (3.12) :

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{v} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\overline{\rho D \frac{\partial c}{\partial x}} - \overline{\rho v'' c''} \right) + \bar{\omega} \quad (3.13)$$

3.2.1 Analyse linéaire du comportement

Pour conduire la résolution de l'équation (3.13) nous effectuons l'analyse linéaire (AL) de l'équation au voisinage des points limites du côté des gaz frais et du côté des gaz brûlés. Cette méthode a été présentée dans les travaux de Kolmogorov *et al.* [47], Corvellec [26], Clavin et Liñán [24]. Nous revisitons tout d'abord les résultats de l'analyse par Kolmogorov, Petrovskii et Piskunov en 1937 [47] dans laquelle les caractéristiques de la propagation d'une flamme plane monodimensionnelle sont considérées sans variation de masse volumique (flamme froide) associé à un terme de production de type $c(1-c)$. Il faut préciser ici que, dans la suite, on notera indifféremment c et $\tilde{c}$. Ce type de terme source apparaît au numérateur du terme source chimique associé aux modèles de type EBU ou BML présentés dans le chapitre précédent. Le bilan de la variable d'avancement à l'état

stationnaire ($\partial c/\partial t = 0$) est alors donné par :

$$S_t \frac{dc}{dx} = D \frac{d^2c}{dx^2} + \omega(c) \quad (3.14)$$

avec le coefficient de diffusion D constant qui incorpore le flux turbulent (on suppose ici qu'il suit une loi gradient). La quantité S_t désigne la vitesse de propagation turbulente et le terme de production $\omega(c)$ est supposé satisfaire les conditions suivantes :

$$\begin{cases} \omega(0) = \omega(1) = 0 \\ \omega(c) > 0, \forall 0 < c < 1 \\ \omega'(0) = K > 0 \\ \omega'(c) < K, \forall 0 < c \leq 1 \end{cases} \quad (3.15)$$

On retient la forme suivante pour le terme de production chimique $\omega(c) = Kc(1-c)$. Le changement de variable $\xi = (S_t/D)x$ permet alors d'écrire l'équation (3.14) dans l'espace adimensionnel sous la forme :

$$\frac{dc}{d\xi} = \frac{d^2c}{d\xi^2} + Ec(1-c) \quad (3.16)$$

avec $E = KD/S_t^2$ un nombre sans dimension qui incorpore les effets de propagation (S_t), de diffusion (D) et de réaction (K). En notant ensuite $Y = dc/d\xi$, l'équation (3.16) peut être écrite dans l'espace de la composition de la façon suivante :

$$Y = Y \frac{dY}{dc} + Ec(1-c) \quad (3.17)$$

avec les conditions aux limites suivantes :

$$Y(0) = 0 \quad \text{et} \quad Y(1) = 0 \quad (3.18)$$

Nous étudions maintenant l'analyse linéaire dans l'espace $(c, Y(c))$ au point $(0,0)$ du côté des gaz frais et au point $(1,0)$ du côté des gaz brûlés :

Du côté des gaz frais

Selon le développement limité lorsque $c \rightarrow 0$ le terme source chimique peut être exprimé de la manière suivante :

$$\omega(c) = \omega(0) + \omega'(0)c + \mathcal{O}(c^2) = Kc + \mathcal{O}(c^2) \quad (3.19)$$

En posant $\boxed{Y = \kappa c}$, avec κ est le taux de décroissance, l'équation (3.17) devient :

$$\kappa^2 - \kappa + E = 0 \quad (3.20)$$

Cette équation possède des racines réelles si $1 - 4E \geq 0$, c'est à dire $E \leq 1/4$ ou $S_t \geq 2\sqrt{DK}$. Nous obtenons alors deux racines suivantes :

$$\begin{cases} \kappa_+ = 1/2 + \sqrt{1 - 4E}/2 \\ \kappa_- = 1/2 - \sqrt{1 - 4E}/2 \end{cases} \quad (3.21)$$

Compte tenu que E est toujours positif, les deux racines sont toujours positives. Nous constituons s'il existe une courbe $Y = \kappa c + Cc^n$ ($n > 1$, C est constant) est la solution de l'équation (3.17) lorsque c tend vers zero. En substituant cette solution dans l'équation (3.17) on obtient la condition $n = 1/\kappa - 1$. Alors les courbes ont tendance à partir du point origine (0,0) dans l'espace $(c, Y(c))$ avec la pente κ_- car la seule possibilité est que $1/\kappa_- - 1 > 1$ (sauf lorsque $E = 1/4$ donc $\kappa_+ = \kappa_- = 1/2$).

Du côté des gaz brûlés

Une procédure similaire est utilisée du côté des gaz brûlés quand $c \rightarrow 1$. Le développement limite permet alors d'écrire :

$$\omega(c) = \omega(1) + \omega'(1)(c - 1) + \mathcal{O}(c^2) = K(1 - c) + \mathcal{O}(c^2) \quad (3.22)$$

Nous reportons $\boxed{Y = \kappa(1 - c)}$ dans l'équation (3.17) qui devient :

$$\kappa^2 + \kappa - E = 0 \quad (3.23)$$

Cette équation possède toujours des racines réelles car $1 + 4E > 0$. Comme les racines sont de signes différents, seule la trajectoire Y de pente négative du repère du front satisfait la solution de l'équation (3.17), c'est à dire $\kappa = -1/2 + \sqrt{1 + 4E}/2$ [24].

La figure 3.6 fournit une représentation schématique du comportement des trajectoires $Y(c)$ du côté des gaz frais et du côté des gaz brûlés.

L'analyse linéaire du côté des gaz frais conduit à un spectre de vitesse de propagation tel que $S_t \geq 2\sqrt{DK}$, dans le cas général ce serait plutôt $S_t \geq 2\sqrt{D\omega'(0)}$. D'après Kolmogorov *et al.* [47], la solution de l'équation (3.14) correspond à la valeur minimale de propagation

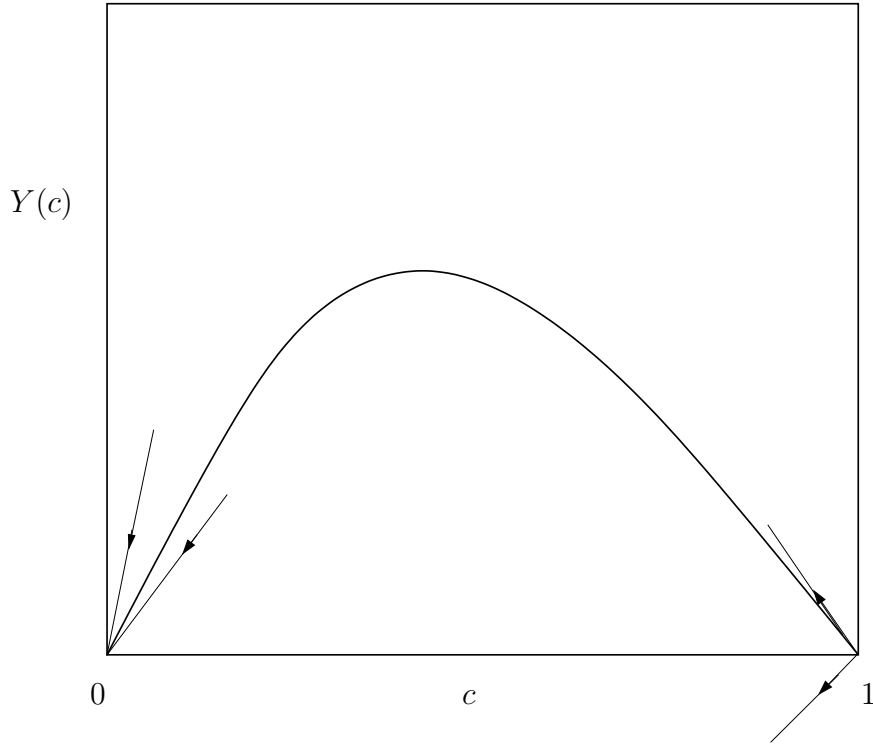


FIGURE 3.6 – Représentation schématique de la solution $Y(c)$ et ses pentes aux points limites des gaz frais et gaz brûlés.

$S_{KPP} = 2\sqrt{D\omega'(0)}$ ($E_{KPP} = 1/4$). Cette solution Y_{KPP} présente une pente à l'origine égale à $1/2$. Nous pouvons donc en conclure que la vitesse de propagation est contrôlée par le *leading edge* de flamme turbulente prémélangée. Nous allons maintenant procéder à la résolution numérique de l'équation moyenne (3.13) avec un terme de production chimique moyen de type $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$.

3.2.2 Solution numérique pour une terme de production de type $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$

Le terme de production moyen retenu est donné par la relation $\bar{\omega} = \bar{\rho}\tilde{\Omega} = \bar{\rho}K\tilde{c}(1 - \tilde{c})$. Nous considérons ici le flux turbulent donné par la loi de gradient, c'est à dire que l'effet de la diffusion contre-gradient n'est pas pris en compte :

$$\overline{\rho v'' c''} = -\bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} \quad (3.24)$$

Le coefficient de diffusion moléculaire est considéré négligeable par rapport au coeffi-

cient de diffusion turbulente. Ainsi, l'équation (3.13) s'écrit :

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{v} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} \right) + \bar{\omega} \quad (3.25)$$

Nous considérons maintenant les variables non-dimensionnelles suivantes :

$$\theta \equiv \frac{S_t^2}{D_t} t, \quad \xi \equiv \frac{S_t}{D_t} x, \quad V \equiv \frac{\tilde{v}}{S_t} \quad (3.26)$$

où D_t/S_t^2 et D_t/S_t représentent les temps et longueur caractéristiques respectivement. La masse volumique moyenne est normalisée par sa valeur du côté des gaz frais :

$$R \equiv \frac{\bar{\rho}}{\rho_u} = \frac{1}{1 + \tau \tilde{c}} \quad (3.27)$$

cela conduit à :

$$\frac{dR}{d\xi} = -\tau R^2 \frac{d\tilde{c}}{d\xi} \quad (3.28)$$

Finalement, l'équation de transport (3.25) peut être ré-écrite de la façon suivante :

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial \theta} + V \frac{\partial \tilde{c}}{\partial \xi} = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(R \frac{\partial \tilde{c}}{\partial \xi} \right) + \frac{D_t K}{S_t^2} \tilde{\Omega}^* \quad (3.29)$$

où $\tilde{\Omega}^* = \tilde{\Omega}/K$ et nous introduisons le nombre non-dimensionnel $E = D_t K/S_t^2$. En combinant (3.28) et (3.29), on obtient l'équation suivante :

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial \theta} + V \frac{\partial \tilde{c}}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 \tilde{c}}{\partial \xi^2} - \tau R \frac{\partial \tilde{c}}{\partial \xi} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial \xi} + E \tilde{\Omega}^* \quad (3.30)$$

A l'état stationnaire, avec les conditions $\partial \tilde{c}/\partial \theta = 0$ et $V = 1$, c'est à dire $\tilde{v} = S_t$, on a :

$$\frac{d\tilde{c}}{d\xi} = \frac{d^2 \tilde{c}}{d\xi^2} - \tau R \frac{d\tilde{c}}{d\xi} \frac{d\tilde{c}}{d\xi} + E \tilde{\Omega}^* \quad (3.31)$$

En notant $Y = d\tilde{c}/d\xi$ et $dY/d\xi = Y dY/d\tilde{c}$, nous obtenons l'équation différentielle du premier-ordre dans l'espace de la composition :

$$Y = Y \frac{dY}{d\tilde{c}} - \tau R Y^2 + E \tilde{\Omega}^* \quad (3.32)$$

avec deux conditions limites $Y(\tilde{c} = 0) = 0$ et $Y(\tilde{c} = 1) = 0$. Le nombre E est donc considéré comme la valeur propre d'un problème de type *Boundary Value Problem* (BVP) exprimé de la manière suivante :

$$\frac{dY}{d\tilde{c}} = 1 + \tau R Y - E \frac{\tilde{\Omega}^*}{Y} \quad (3.33)$$

$$\frac{dE}{d\tilde{c}} = 0 \quad (3.34)$$

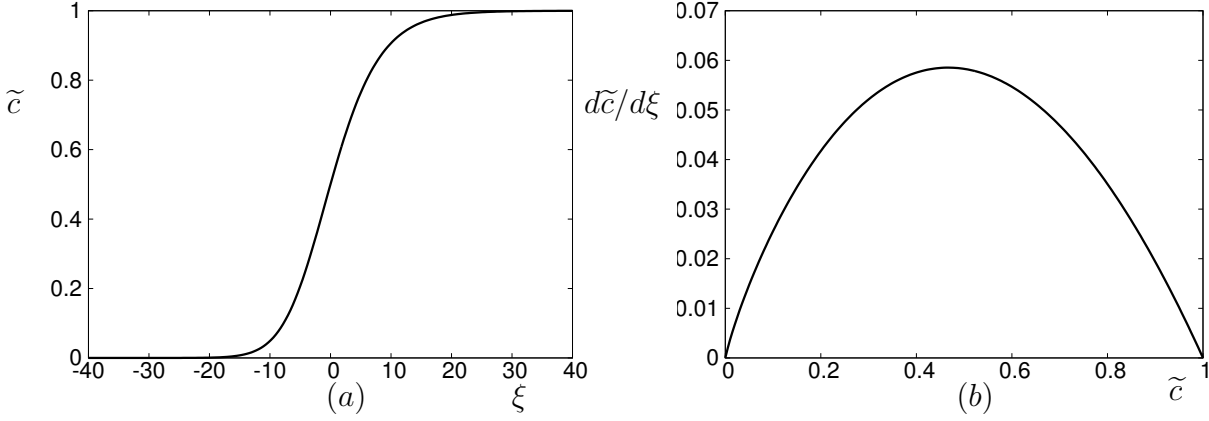


FIGURE 3.7 – Structure d’une flamme turbulente $\tilde{c}(\xi)$ et de son gradient $d\tilde{c}/d\xi$ obtenus par simulation numérique avec un terme source chimique de type $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$.

Ce système d’équations a été résolu numériquement en utilisant aussi le logiciel *Mathematica*TM. Ce logiciel permet de résoudre le *BVP* dans une zone de calcul relativement restreinte. C’est pourquoi une valeur $\tilde{c}^*$ très petite ($\tilde{c}^* \ll 1$) est introduite pour limiter le domaine de calcul $\tilde{c} \in [\tilde{c}^*, 1 - \tilde{c}^*]$. Les influences de la valeur propre initiale et de la coupure de zone de calcul sur la solution de ce système dans le programme de calcul de *Mathematica* sont présentées dans l’annexe A. Les profils de la variable d’avancement moyenne $\tilde{c}(\xi)$ et de son gradient $Y(\tilde{c})$ sont présentés sur la figure 3.7. La valeur propre obtenue avec $\tilde{c}^* = 10^{-10}$ est $E = 0.2505$ (nous observons que cette valeur tend vers la valeur analytique de KPP $E_{KPP} = 0.25$), la vitesse de propagation turbulente peut être ensuite déduite via $S_t = \sqrt{D_t K / E}$.

Cette résolution dans l’espace adimensionnel est représentative d’une résolution conduite avec différents termes de production chimique moyens comme EBU si $K \equiv C_{EBU} / \tau_t$, BML si $K \equiv 1 / (R_c(2c_m - 1)\tau_t)$ et BCL si $K \equiv B(1 - S)I_\omega / (I_1 - I_2)$ avec un taux de ségrégation S constant. En pratique, le taux de ségrégation n’est pas constant à la traversée du flame-brush, une résolution de ce cas sera présentée dans la suite.

Dans le cas du terme source de type BCL, le taux de ségrégation est considéré comme une variable tandis que $K \equiv BI_\omega / (I_1 - I_2)$, la résolution du système des équations (3.33) et (3.34) donne la variation du nombre sans dimension $E = D_t K / S_t^2$ (valeur propre) en fonction du taux de ségrégation S , voir la figure 3.8 ci-dessous.

Lorsque $S \rightarrow 0$ nous retrouvons la solution dans l’espace adimensionnel présentée sur la figure 3.7. La figure 3.8 montre que la vitesse de propagation turbulente diminue

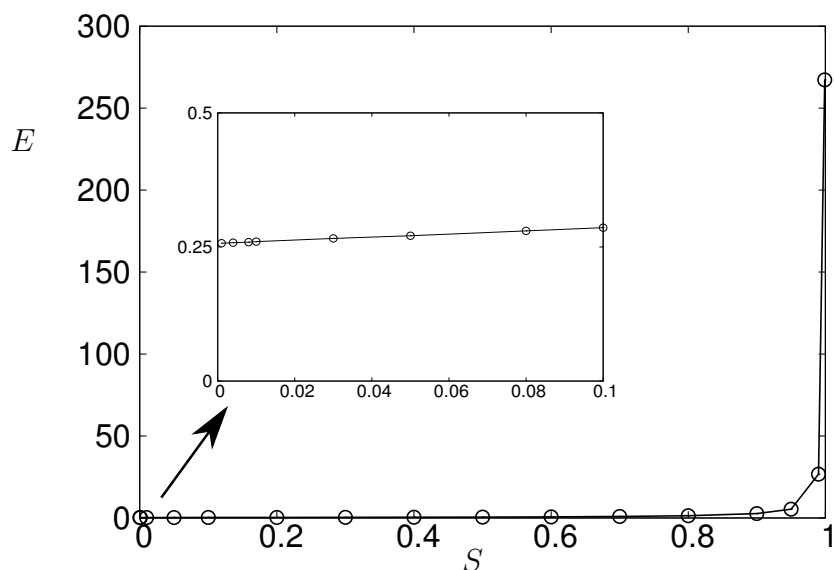


FIGURE 3.8 – Nombre non-dimensionnel $E = D_t K / S_t^2$ tracé en fonction du taux de ségrégation S . La figure intérieure est un zoom obtenu pour de petites valeurs de S

lorsque le taux de ségrégation augmente. La résolution de $Y(\tilde{c})$ est tracée sur la figure 3.9, la trajectoire Y_{KPP} correspond à $S = 0$. Nous observons bien que la trajectoire obtenue telle que $S_t < S_{KPP}$ (ou $S > 0$) est située au-dessus de Y_{KPP} .

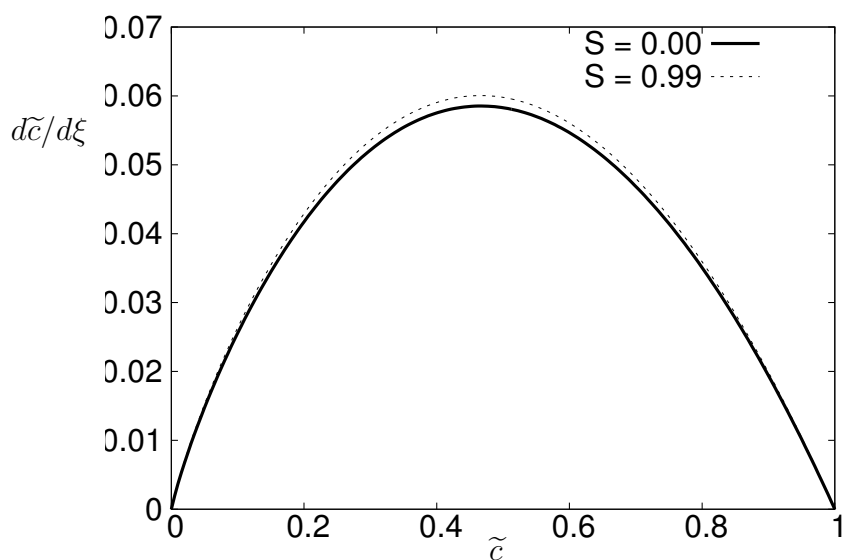


FIGURE 3.9 – Profils de $Y(\tilde{c})$ obtenus avec le terme source chimique de type BCL pour deux valeurs du taux de ségrégation

Comme la définition du taux de ségrégation $S = \tilde{c}''^2 / (\tilde{c}(1-\tilde{c}))$ apparaît dans le régime des flammes plissées (flammelettes) où l'activité chimique est très rapide comparée à

l'activité turbulente, ce taux tend vers l'unité dans la limite des grandes valeurs de Da . L'expression de la variance a été considérée dans le chapitre précédent par le biais de la forme de la PDF.

L'analyse linéaire (AL) permet donc de déterminer la vitesse de propagation qui correspond à la valeur minimale du spectre de vitesse obtenu du côté des gaz frais. La flamme ne se propage alors qu'à cette vitesse. Cependant, Hakim [37] a étudié par le biais de l'AL un terme source qui ne vérifie pas la condition (3.15) qui dans ce cas conduit à une vitesse de propagation qui ne satisfait plus la vitesse KPP.

3.2.3 Cas du terme source introduit par Hakim

Nous considérons maintenant l'équation (3.14) avec le terme de production présenté par Hakim [37] dont l'expression est la suivante :

$$\omega(c) = Kc(1 - c)(1 + \epsilon c) \quad (3.35)$$

avec K (s^{-1}) une constante et $\epsilon > 0$. Si $\epsilon = 0$, nous récupérons la solution KPP. La figure 3.10 représente l'expression (3.35) pour différentes valeurs de ϵ : $\epsilon = 0, 1, 2$ et 3 .

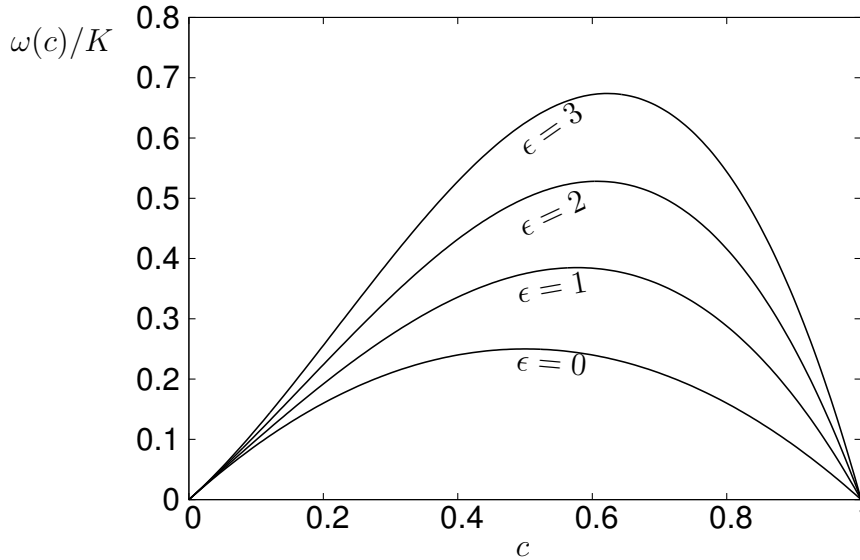


FIGURE 3.10 – Le terme source (3.35) introduit par Hakim tracé pour différentes valeurs de ϵ .

L'équation du gradient $Y = dc/d\xi$ à résoudre dans l'espace de composition s'écrit :

$$Y = Y \frac{dY}{dc} + Ec(1 - c)(1 + \epsilon c) \quad (3.36)$$

L'approche AL appliquée au voisinage du point d'origine des gaz frais permet d'aboutir à l'équation caractéristique du taux de décroissance suivante :

$$\kappa^2 - \kappa + E = 0 \quad (3.37)$$

où on a supposé que $Y = \kappa c$. Afin d'obtenir les valeurs réelles de κ la condition $E \leq 1/4$ doit être vérifiée. La résolution attendue de cette équation conduit à une solution qui tend vers la solution de KPP, c'est à dire $S_t = S_{KPP} = 2\sqrt{DK}$ quelle que soit la valeur retenue pour ϵ car ce paramètre n'intervient pas dans l'analyse linéaire. Néanmoins, ce résultat n'est pas vérifié par le calcul numérique lorsque $\epsilon \geq 2$. La vitesse tend vers alors une valeur plus grande que la valeur KPP parce que le terme source chimique ne satisfait plus les conditions (3.15). Nous voyons que la fonction $Y(c)$ peut s'écrire sous la forme d'un polynôme du second degré :

$$Y = \kappa c(1 - c) \quad (3.38)$$

En substituant cette expression dans l'équation (3.36) on obtient :

$$\kappa^2 - \kappa + E - 2\kappa c + E\epsilon c = 0 \quad (3.39)$$

et, à l'ordre dominant, nous avons :

$$\begin{cases} E = \kappa - \kappa^2 \\ E = 2\kappa^2/\epsilon \end{cases} \quad (3.40)$$

Cela conduit alors à :

$$\begin{cases} E = 2\epsilon/(2 + \epsilon)^2 \\ \kappa = \epsilon/(2 + \epsilon) \end{cases} \quad (3.41)$$

La vitesse de propagation peut être déduite comme étant la suivante :

$$S_t = \sqrt{DK} \left(\sqrt{\frac{2}{\epsilon}} + \sqrt{\frac{\epsilon}{2}} \right) \quad (3.42)$$

Ainsi, pour des valeurs de ϵ inférieures à 2, la vitesse obtenue est la vitesse KPP (elle est indépendante de ϵ) et pour les valeurs supérieures à 2, la vitesse déterminée par (3.42) dont valeurs sont toujours supérieures à la vitesse de KPP. Nous pouvons écrire :

$$S_t = \begin{cases} 2\sqrt{DK} & \text{si } \epsilon < 2 \quad (\text{indépendant de } \epsilon \text{ si } \epsilon < 2) \\ \sqrt{DK}(2 + \epsilon)/\sqrt{2\epsilon} & \text{si } \epsilon \geq 2 \quad (\text{dépendant de } \epsilon \text{ si } \epsilon \geq 2) \end{cases} \quad (3.43)$$

Le nombre nondimensionnel et le taux de décroissance correspondants s'écrivent alors :

$$E = \begin{cases} 1/4 \\ 2\epsilon/(2+\epsilon)^2 \end{cases} \quad \text{et} \quad \kappa = \begin{cases} 1/2 & \text{si } \epsilon < 2 \\ \epsilon/(2+\epsilon) & \text{si } \epsilon \geq 2 \end{cases} \quad (3.44)$$

La solution exacte de l'équation de la fonction $Y(c)$ est donc : $Y(c) = \kappa c(1 - c)$.

L'expression analytique de c peut être déduite de Y comme la forme suivante :

$$c = \frac{1}{1 + \exp(-\kappa\xi)} \quad (3.45)$$

avec $\kappa = \kappa(\epsilon)$ est donné par l'expression (3.44). Les profils de la variable d'avancement dans l'espace adimensionnel obtenus analytiquement via (3.45) et numériquement sont présentés sur la figure 3.11 pour différentes valeurs de ϵ : $\epsilon = 1$ et $\epsilon = 3$.

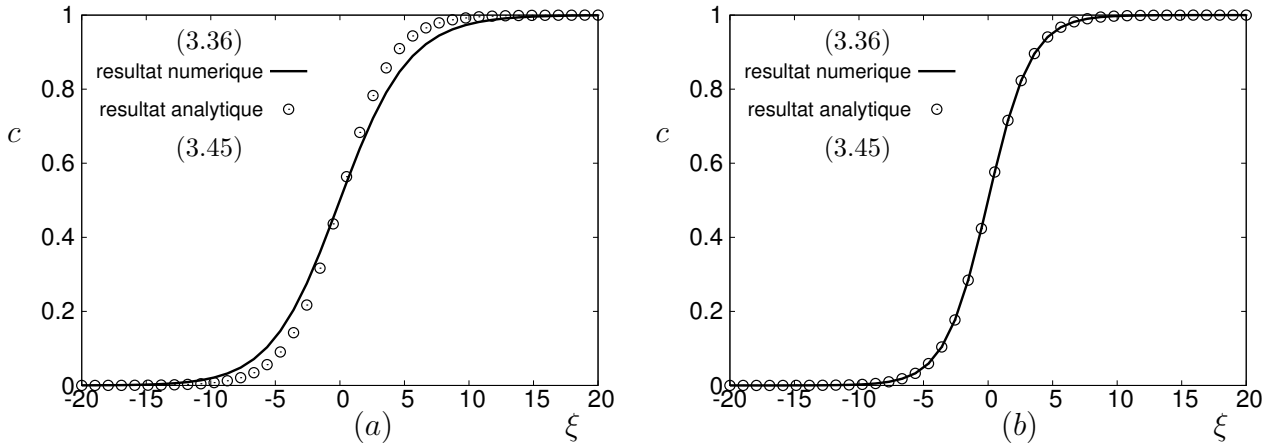


FIGURE 3.11 – La variable d'avancement tracée par l'équation (3.45) pour différentes valeurs de ϵ : (a) : $\epsilon = 1$ et (b) : $\epsilon = 3$.

La figure 3.11(b) montre que la solution numérique est en très bon accord avec la solution analytique lorsque $\epsilon = 3$ (ou en général $\epsilon \geq 2$) mais l'expression (3.45) ne peut pas représenter la solution exacte de c lorsque $\epsilon = 1$, voir 3.11(a). La solution exacte lorsque $\epsilon < 2$ n'est pas étudiée complètement aujourd'hui. Il est noter que la vitesse de propagation est tout de même en accord avec (3.43), c'est à dire lorsque $\epsilon < 2$, la vitesse de propagation tend vers toujours la vitesse de KPP.

Nous constatons que l'approche AL ne peut pas être appliquée pour déterminer la vitesse de propagation pour certains formes de terme source chimique qui ne satisfont pas les conditions (3.15). Un comportement similaire est observé quand l'effet de la diffusion contre-gradient est pris en compte. Nous allons étudier plus précisément ce point dans la dernière section de ce chapitre.

3.3 De la vitesse de propagation laminaire à la vitesse de la turbulente

Les modèles du terme de production chimique moyen présentés dans le chapitre précédent pour caractériser la combustion turbulente prémélangée correspondent à de grandes valeurs de Da ou à une valeur de S proche de l'unité à travers l'épaisseur des flammes entières. Pourtant, le taux de ségrégation issu des DNS [19, 60] se réduit à zéro du côté des gaz frais ($\tilde{c} \rightarrow 0$) et de côté des gaz brûlés ($\tilde{c} \rightarrow 1$) même s'il reste proche de l'unité dans la zone intermittente. Ainsi, ces valeurs limitées du taux de ségrégation sont associées aux effets de cinétique chimique finie ou valeurs faibles du nombre de Damköhler, le régime de combustion turbulente n'est plus le régime des flammelettes. L'expression du terme de production chimique moyen doit alors être modéliser pour tendre vers un modèle des flammelettes (régime KPP) lorsque $S \rightarrow 1$ et correspondu à la réaction chimique laminaire (régime ZFK) lorsque $S \rightarrow 0$. La vitesse de propagation turbulente varie donc pour correspondre à cette transition. Deux expressions différentes de ce terme présentées dans Kha *et al.* [43], seront discutées dans la partie suivante.

Avant d'envisager deux expressions pilotées par le taux de ségrégation, il convient de noter que la transition d'un comportement de réaction "turbulente" de type $c(1-c)$ à un comportement de réaction "laminaire" de type $\exp(-\beta c)$ a été proposé par Nicoli *et al.* [68] et étudié précédemment par Corvellec [26] en faisant varier l'énergie d'activation normalisée β . Une étude analogue a aussi été effectuée aussi par Aldushin *et al.* [1]. Enfin, une autre forme de terme source permettant cette transition a aussi été considérée par Joulin *et al.* [42].

3.3.1 Cas de Nicoli *et al.*

Nous re-considérons l'équation (3.14) à résoudre. Pour laquelle la variation de masse volumique est supposée négligeable. Nous considérons maintenant le terme source chimique proposé par Nicoli *et al.* [68] qui permet d'illustrer numériquement les deux régimes de propagation ZFK et KPP. Ce terme est donné par l'expression suivante :

$$\omega(c) = K \frac{\beta^2}{2} (1-c) (e^{-\beta(1-c)} - e^{-\beta}) \quad (3.46)$$

où K (s^{-1}) est un paramètre constant.

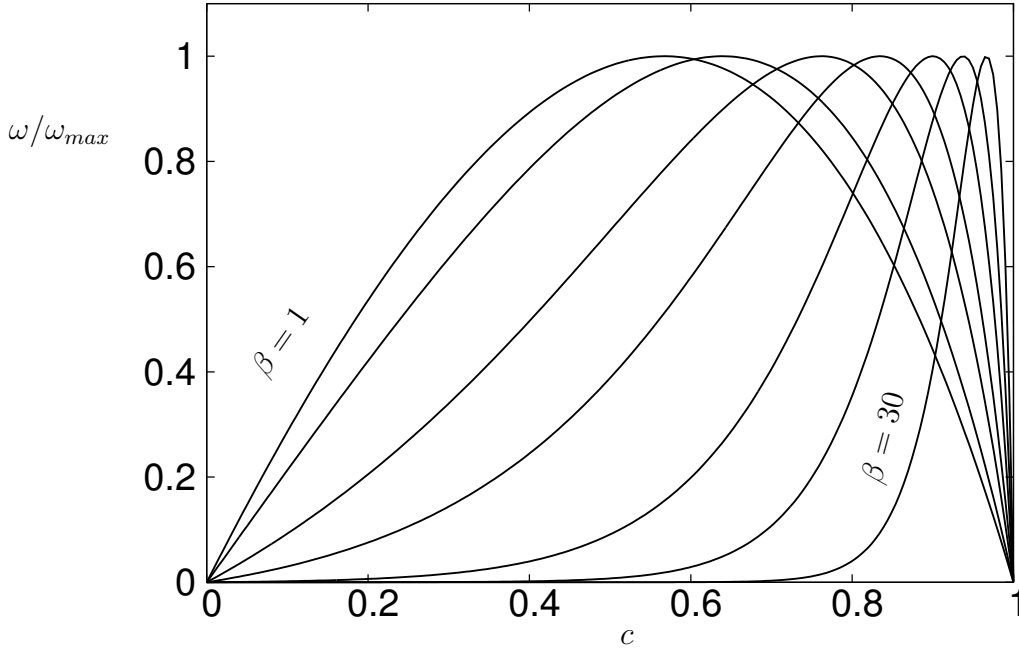


FIGURE 3.12 – Terme de production permettant de passer continument d’une forme ZFK à une forme KPP pour différentes valeurs de β

Lorsque $\beta \rightarrow \infty$ nous obtenons un terme de production de type ZFK : $\omega_{\infty}(c) = K(\beta^2/2)(1-c)e^{-\beta(1-c)}$ et, lorsque $\beta \rightarrow 0$, nous retrouvons une forme de type KPP : $\omega_0(c) = K(\beta^3/2)e^{-\beta}c(1-c)$. La figure 3.12 illustre le passage continu, en fonction de β , d’une forme KPP à une forme ZFK. Le régime ZFK correspond donc à la limite des grandes valeurs de l’énergie d’activation. La dérivée du terme de production est donnée par l’expression suivante :

$$\omega'(c) = K \frac{\beta^2}{2} [-(e^{-\beta(1-c)} - e^{-\beta}) + \beta e^{-\beta(1-c)}(1-c)] \quad (3.47)$$

Grâce aux théories ZFK et KPP, nous pouvons déterminer les vitesses de propagation associées aux formes limites du terme de production :

$$S_L = \sqrt{2 \frac{D}{\beta^2 \tau_c}} = \sqrt{DK} \quad (3.48)$$

$$S_{KPP} = 2\sqrt{D\omega'(0)} = 2\sqrt{DK \frac{\beta^3}{2} e^{-\beta}} \quad (3.49)$$

La résolution de l’équation de transport est à nouveau effectuée avec le programme *Mathematica*. Nous choisissons les valeurs de K et D : $K = 400 s^{-1}$ et $D = 5 \cdot 10^{-5} m^2/s$.

La figure (3.13) montre que la vitesse de propagation obtenue numériquement est très proche des vitesses de propagation obtenues par la théorie KPP (3.49) pour les petites valeurs de β et par la théorie ZFK (3.48) pour les grandes valeurs de β .

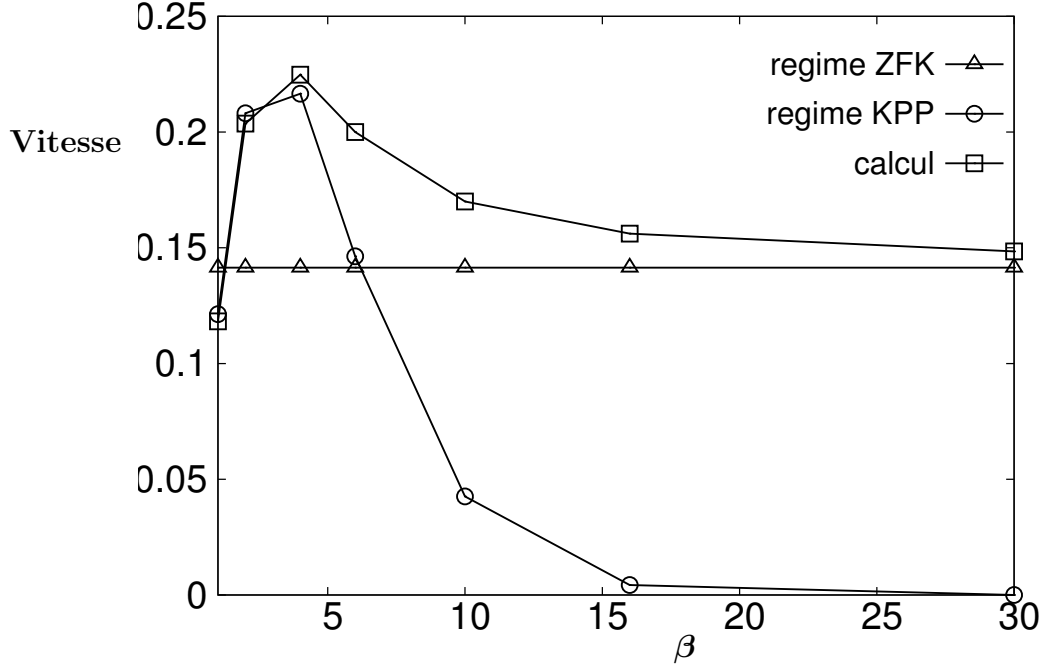


FIGURE 3.13 – Vitesse de propagation obtenues numériquement pour différentes valeurs de β , vitesse de propagation ZFK et vitesse de propagation KPP.

3.3.2 Cas d'une fonction *bridging*

Nous avons mentionné que la transition d'un régime ZFK à un régime KPP peut être contrôlée par la variance normalisée de variable d'avancement où le taux de ségrégation. Cela est modélisée par la fonction simple suivante :

$$\bar{\omega}_{BRG} = (1 - S)\bar{\omega}_{ARR} + S\bar{\omega}_{BCL} \quad (3.50)$$

où les expressions du terme source sont données par :

$$\bar{\omega}_{ARR} = \bar{\rho}B(1 - \tilde{c}) \exp\left(\frac{-\beta(1 - \tilde{c})}{1 - \alpha(1 - \tilde{c})}\right) \quad (3.51)$$

$$\bar{\omega}_{BCL} = \bar{\rho}B(1 - S)\frac{I_\omega}{I_1 - I_2}\tilde{c}(1 - \tilde{c}) \quad (3.52)$$

où trois paramètres I_1 , I_2 et I_ω sont évalués de la flamme laminaire en utilisant les expressions suivantes :

$$I_1 = \int_0^1 c \tilde{f}(c) dc \quad (3.53)$$

$$I_2 = \int_0^1 c^2 \tilde{f}(c) dc \quad (3.54)$$

$$I_\omega = \int_0^1 \omega_c \tilde{f}(c) dc \quad (3.55)$$

Ce type d'expression algébrique a déjà été utilisé avec succès pour modéliser la dissipation scalaire moyenne [59, 78]. La fonction $\tilde{f}(c) = C_n |dc/dx|^{-1}$ et le paramètre C_n

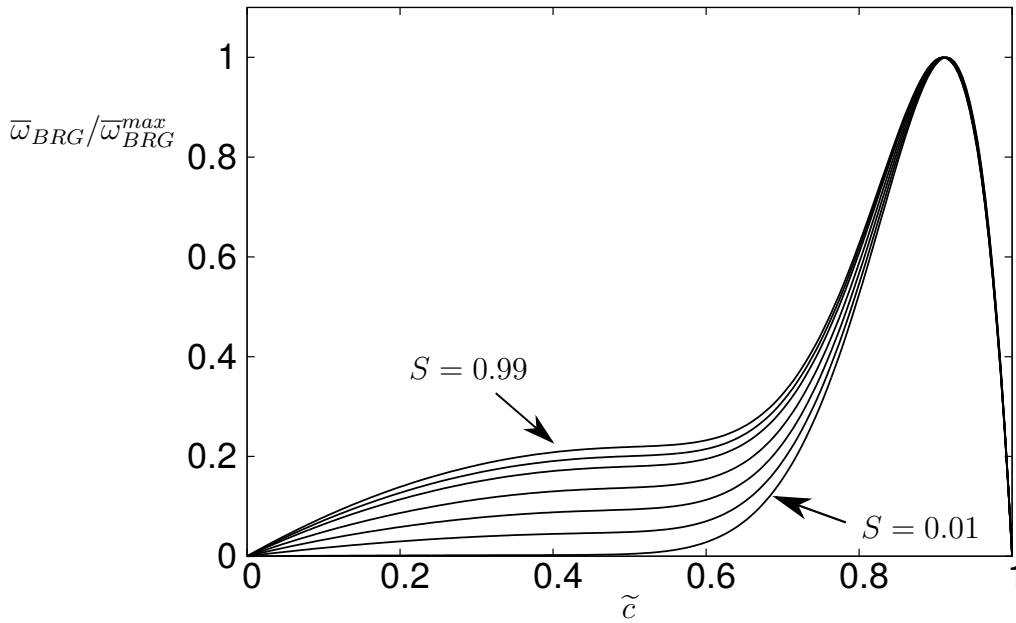


FIGURE 3.14 – Terme source chimique normalisé $\bar{\omega}_{BRG}$ tracé pour différentes valeurs de S lorsque $\beta = 10$

sont déterminés par la condition : $C_n = (\int_0^1 |dc/dx|^{-1} dc)^{-1}$. Le gradient de c a été calculé dans la section de flamme laminaire pour $\beta = 10$, nous pouvons donc évaluer $I_\omega / (I_1 - I_2) = 0.032$. La figure (3.14) présente le profil de $\tilde{\omega}_{BRG}$ en fonction de la variable d'avancement moyenne. Nous voyons que la valeur de $I_\omega / (I_1 - I_2)$ est très petite par rapport l'effet exponentiel de type d'Arrhénius. Ainsi, le comportement turbulente n'est pas totalement retrouvé quand $S \rightarrow 1$, voir la figure 3.14, le comportement de chimie laminaire est encore maintenu du côté des gaz brûlés.

La résolution du système d'équations (3.33) et (3.34) avec le terme source *bridging* (3.50) donne l'évolution de la valeur propre E . Cette évolution est présentée sur la figure

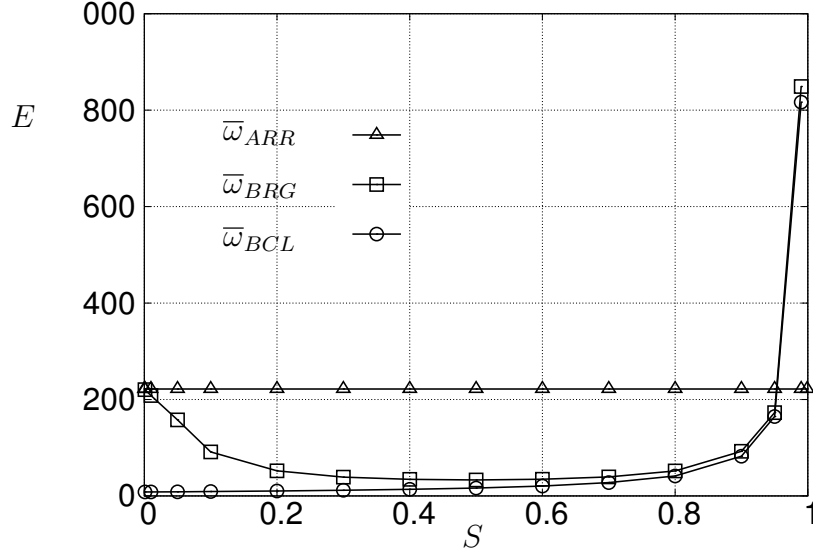


FIGURE 3.15 – Nombre sans dimension $E = D_t K / S_t^2$ tracé en fonction du taux de ségrégation S . Valeurs obtenues numériquement à partir de l'équation transport de $\tilde{c}$ (3.25) effectuée avec les termes sources $\bar{w}_{BRG}$ (3.50), $\bar{w}_{BCL}$ (3.52) et $\bar{w}_{ARR}$ (3.51).

3.15 sur laquelle les résolutions obtenues avec les termes sources $\bar{w}_{BCL}$ (3.52) et $\bar{w}_{ARR}$ (3.51) sont elles-aussi illustrées. Il faut noter que la courbe de $\bar{w}_{BCL}$ sur la figure 3.15 ne correspond pas à la courbe montrée sur la figure 3.8 parce que le terme source résolu maintenant est $\tilde{\Omega}^* = I_w / (I_1 - I_2)(1 - S)\tilde{c}(1 - \tilde{c}) = 0.032(1 - S)\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ au lieu de $\tilde{\Omega}^* = (1 - S)\tilde{c}(1 - \tilde{c})$. Pourtant la résolution du gradient de la variable d'avancement moyenne n'est pas influencée et elle donne toujours le régime KPP. On observe la transition de la solution BRG à partir de la solution ZFK (associée au terme source $\bar{w}_{ARR}$) se rapproche plutôt de la solution KPP (associée au terme source $\bar{w}_{BCL}$) quand $S \rightarrow 0.5$.

3.3.3 Cas d'une fonction basée sur des distributions de Dirac

A mesure que la valeur de nombre de Zel'dovich β augmente, l'effet du terme exponentiel est de plus en plus important dans le terme source d'Arrhénus, le terme source moyen prend la forme d'Arrhénus quand β tend vers l'infini. D'autre part, le terme source est influencé par le taux de ségrégation S lorsque S tend vers 0 et 1. Cette expression basée sur une PDF de la variable de progrès à deux pics de Dirac (fonction delta) présente certains comportements similaires avec la fermeture de Libby-Williams introduite précédemment par Libby et Williams [54], Ribert et al. [77], voir aussi Robin *et al.* [78].

$$\bar{\omega}_{TDF} = \bar{\rho}K \left[(1 - \tilde{c})(1 - c_1) \exp \left(\frac{-\beta(1 - c_1)}{1 - \alpha(1 - c_1)} \right) + \tilde{c}(1 - c_2) \exp \left(\frac{-\beta(1 - c_2)}{1 - \alpha(1 - c_2)} \right) \right] \quad (3.56)$$

où

$$\begin{cases} c_1 = \tilde{c}(1 - S) \\ c_2 = \tilde{c} + (1 - \tilde{c})S \end{cases}$$

On constate que

- lorsque $\beta \rightarrow 0$ alors $\bar{\omega}_{TDF} = \bar{\rho}K(1 - \tilde{c})e^{-\beta(1-\tilde{c})} \approx \bar{\rho}K(1 - \tilde{c})$.
- lorsque $\beta \rightarrow \infty$ et $S \rightarrow 0$ alors $\bar{\omega}_{TDF} = \bar{\rho}K(1 - \tilde{c}) \exp[-\beta(1 - \tilde{c})/(1 - \alpha(1 - \tilde{c}))]$
- lorsque $\beta \rightarrow \infty$ et $S \rightarrow 1$ alors $\bar{\omega}_{TDF} = \bar{\rho}K(1 - S)\tilde{c}(1 - \tilde{c})$

Dans ce mémoire, nous ne considérons que la limite des grandes valeurs du nombre de Zel'dovich ($\beta \rightarrow \infty$). Nous notons que $K \rightarrow B$ lorsque $S \rightarrow 0$ et $K \rightarrow BI_\omega/(I_1 - I_2)$ lorsque $S \rightarrow 1$. Cette expression conduit à $I_\omega/(I_1 - I_2) \rightarrow 1$. C'est un cas extrêmement spécial car le rapport des moments conditionnés est normalement en l'ordre de 0.01. Donc il existe deux cas de figure quand β tend vers l'infini, le terme source moyen se rapproche de la solution ZFK ou de la solution KPP suivant la valeur du coefficient ségrégation. Les profils de $\bar{\omega}$ sont illustrés sur la figure suivante.

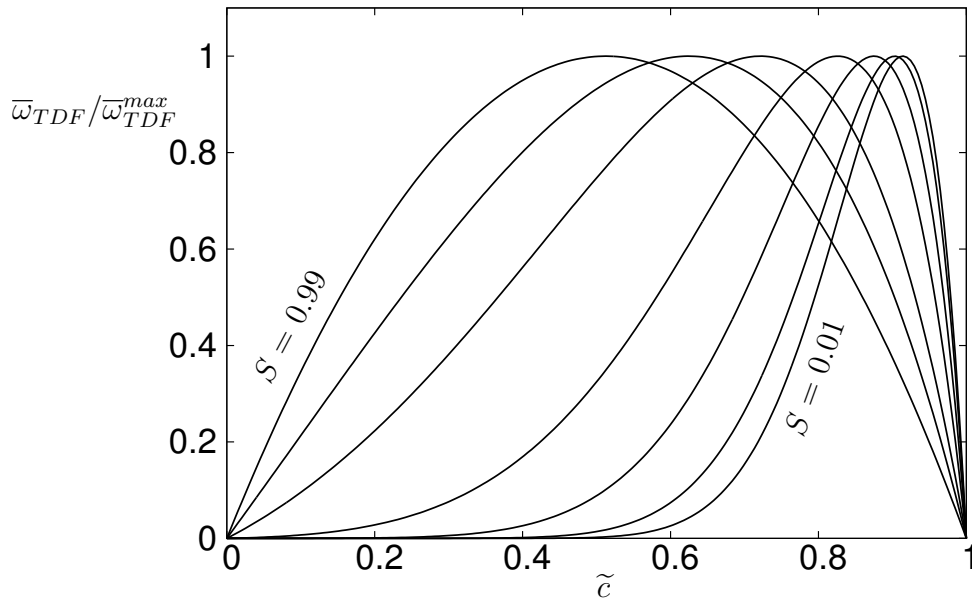


FIGURE 3.16 – Terme source chimique normalisé $\bar{\omega}_{TDF}$ tracé pour différentes valeurs de S lorsque $\beta = 10$

La figure 3.16 illustre le terme source chimique quand β est fixé égal à 10 et S varie. Le passage de manière continue de la forme ZFK à la forme KPP est bien vérifié sur cette figure. Nous pouvons prévoir la vitesse de propagation de la flamme en fonction de S lorsque le nombre de Zel'dovitch est fixé. Les résultats numériques obtenues correspondent à la vitesse KPP lorsque S tend vers 1 et à la vitesse ZFK lorsque S tend vers 0.

Nous appliquons maintenant le terme source de TDF dans l'équation (3.25). La procédure de résolution de cette équation a été présentée dans le paragraphe 3.2.2. Le système des équations (3.33) et (3.34) est résolu dans l'espace de composition. La valeur propre E déduite de ce système d'équations est illustrée sur la figure 3.17.

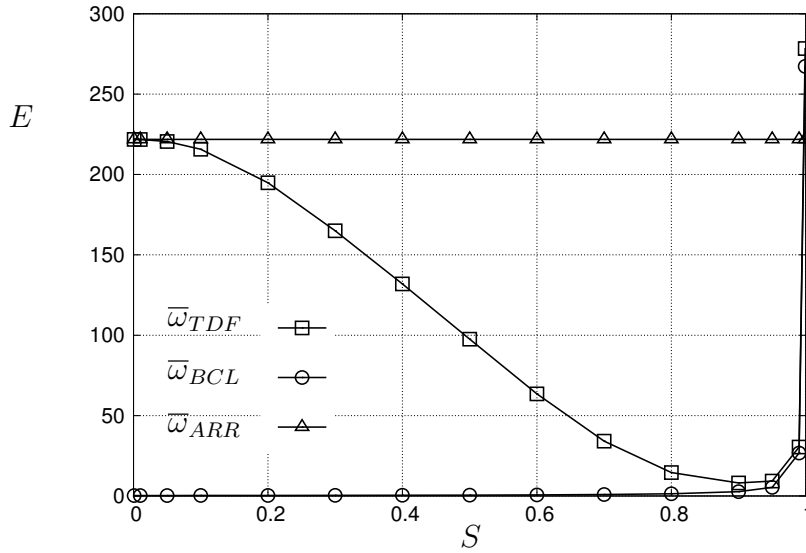


FIGURE 3.17 – Nombre sans dimension $E = D_t K / S_t^2$ tracé en fonction du taux de ségrégation S . Valeurs obtenues numériquement à partir de l'équation de transport de $\tilde{c}$ (3.25) effectuée avec les termes sources $\bar{w}_{TDF}$ (3.56), $\bar{w}_{BCL}$ (3.52) et $\bar{w}_{ARR}$ (3.51).

Les calculs correspondants ont été effectués pour plusieurs valeurs du taux de ségrégation $S \in [0 : 1]$. Ces valeurs sont comparées à celles issues du modèle Arrhénius (3.51) (solution ZFK), et du modèle BCL (solution KPP) (3.52). La courbe de la solution KPP a déjà été présentée sur la figure 3.7. Le modèle d'Arrhénius ne considère pas le taux de ségrégation et la valeur de E est donc toujours constante. Nous voyons que la courbe de $\bar{w}_{TDF}$ restitue les deux comportements limites qui sont associés à des valeurs infiniment petite et environ unitaires du taux de ségrégation. Ainsi, la vitesse de propagation déduite de E passe aussi du régime ZFK au régime KPP lorsque S varie de 0 à 1 respectivement. Ce comportement

de la vitesse est similaire celui présenté par Nicoli *et al.*, voir figure 3.13.

3.4 Effet de la diffusion à contre-gradient sur la vitesse de propagation

Dans la suite de cette section, l'effet de la diffusion contre-gradient est pris en compte dans le flux turbulent présente dans l'équation de transport (3.13). Cette analyse a été étudiée initialement par Corvellec *et al.* [27]. Il est noter que la diffusion moléculaire reste encore négligeable par rapport la diffusion turbulente. Comme la forme de la diffusion contre-gradient a été présentée dans la chapitre précédent, le flux turbulent scalaire est décomposé en deux contributions distinctes : $\overline{\rho v'' c''} = -\bar{\rho} D_t \partial \tilde{c} / \partial x + \bar{\rho} \Delta_v \tilde{c} (1 - \tilde{c})$ où $\Delta_v = \bar{v}_b - \bar{v}_u > 0$. Par souci de simplicité, Δ_v est considéré comme constant dans ce paragraphe. L'équation (3.13) peut donc se ré-écrire de la manière suivante :

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{v} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\overline{\rho D_t \frac{\partial c}{\partial x}} - \bar{\rho} \Delta_v \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \right) + \bar{\omega} \quad (3.57)$$

Cette équation a aussi été étudiée dans les travaux de Sabelnikov et Litpanikov [86, 87].

3.4.1 Problème rencontré

La forme adimensionnelle de l'équation est obtenue en introduisant $\theta = S_t^2 / D_t t$, $\xi = (S_t / D_t) x$ et $V = \tilde{v} / S_t$ sont respectivement le temps normalisé, la distance normalisée et la vitesse de convection normalisée. Le nombre équivalent du nombre de Bray défini par $N = \Delta_v / S_t^1$ est également introduit :

$$R \frac{\partial \tilde{c}}{\partial \theta} + R V \frac{\partial \tilde{c}}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[R \frac{\partial \tilde{c}}{\partial \xi} - R N \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \right] + R E \tilde{\Omega} \quad (3.58)$$

où $R \equiv \bar{\rho} / \rho_u$, $E = D_t K / S_t^2$ le nombre non-dimensionnel valeur propre et $\tilde{\Omega} = \tilde{c} (1 - \tilde{c})$; nous considérons le terme source de type KPP pour des raisons de simplicité. La solution stationnaire est étudiée en fixant les conditions : $\partial \tilde{c} / \partial \theta = 0$ et $V = 1$. L'équation (3.58) s'écrit à l'état stationnaire :

$$\frac{d \tilde{c}}{d \xi} + \frac{1}{R} \frac{d}{d \xi} \left[R N \tilde{c} (1 - \tilde{c}) - R \frac{d \tilde{c}}{d \xi} \right] = E \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad (3.59)$$

1. Pour des raisons de simplicité, ce nombre N est appelé le nombre de Bray.

Cette équation stationnaire fait apparaître un terme de convection supplémentaire en forme $\tilde{c}d\tilde{c}/d\xi$. En posant $Y = d\tilde{c}/d\xi$, nous obtenons l'équation différentielle du premier ordre :

$$Y \frac{dY}{d\tilde{c}} = [1 + N(1 - 2\tilde{c}) - \tau RN\tilde{c}(1 - \tilde{c})] Y + \tau RY^2 - E\tilde{c}(1 - \tilde{c}) \quad (3.60)$$

avec les conditions limites : $Y(0) = Y(1) = 0$.

L'équation (3.60) et ses conditions limites correspondent à nouveau à un problème aux valeurs fixées aux limites, i.e., *boundary value problem* (BVP). Ce problème a été étudié dans le système de deux équations (3.60) et (3.34). Ainsi, si l'analyse linéaire est appliquée à l'équation (3.60) cela conduit à exprimer $Y = \kappa\tilde{c}$ au voisinage du point d'origine des gaz frais. Nous obtenons l'équation caractéristique suivante :

$$\kappa^2 - (1 + N)\kappa + E = 0$$

Cette équation admet deux racines

$$\kappa_+ = \frac{1 + N}{2} + \sqrt{\frac{(1 + N)^2}{4} - E} \quad (3.61)$$

$$\kappa_- = \frac{1 + N}{2} - \sqrt{\frac{(1 + N)^2}{4} - E} \quad (3.62)$$

Parce que $\tilde{c}(\xi)$ est une fonction positive, les deux valeurs κ_+ et κ_- sont réelles. La solution existe seulement si la condition suivante est satisfaite :

$$E \leq E_{max} = \frac{(1 + N)^2}{4} \quad (3.63)$$

Si $N = 0$, l'équation (3.63) est équivalente à celle étudiée par KPP. La valeur propre E devrait tendre vers la valeur maximale E_{max} . Pourtant, lorsque $N > 1$, la borne supérieure de E ne satisfait plus la valeur calculée numériquement. L'AL est donc inutile pour $N > 1$. Ainsi, nous disons que la vitesse de propagation n'est pas contrôlée par le *leading edge* des flammes mais par le profil intérieur. Il existe une autre méthode qui permet de rechercher la solution analytique de ce problème, il s'agit de celle proposée par Murray [64].

3.4.2 L'approche de Murray

Murray a examiné une équation diffusion-réaction adimensionnelle équivalente à l'équation de KPP mais comportant un terme convection supplémentaire :

$$\frac{\partial c}{\partial \theta} - kc \frac{\partial c}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 c}{\partial \xi^2} + c(1 - c) \quad (3.64)$$

avec les conditions limites : $c(-\infty) = 0$ et $c(+\infty) = 1$. Si $k = 0$ ce problème est identique au problème KPP. Si $k \neq 0$ l'équation (3.64) contient un terme de convection non-linéaire $kc\partial c/\partial \xi$. Dans le repère lié au front, $c(\zeta) = c(\xi + \Lambda\theta)$ (Λ est défini la vitesse de propagation normalisée), l'équation (3.64) s'écrit sous la forme :

$$\Lambda \frac{dc}{d\zeta} - kc \frac{dc}{d\zeta} = \frac{d^2c}{d\zeta^2} + c(1 - c) \quad (3.65)$$

Si l'approche AL est appliquée, i.e., $dc/d\zeta = \kappa c$, quand $\zeta \rightarrow -\infty$, nous obtenons le même spectre de vitesse que celui de KPP $\Lambda \geq \Lambda_{min} = 2$. Cependant, Murray a montré, grâce à l'étude de l'équation stationnaire pour plusieurs valeurs de k , que la vitesse de propagation ne tend vers la vitesse minimale obtenue à partir de la méthode AL que dans un domaine restreint de k , ici $k < 2$. En particulier, il a montré que la solution de l'équation (3.65) pour $k \geq 2$ peut être écrite de la façon suivante :

$$\frac{dc}{d\zeta} = \kappa c(1 - c) \quad (3.66)$$

La substitution de cette solution dans l'équation (3.65) permet d'obtenir la vitesse $\Lambda = k/2 + 2/k$. La vitesse de propagation totale s'écrit alors :

$$\Lambda = \begin{cases} 2 & \text{si } k < 2 \\ k/2 + 2/k & \text{si } k \geq 2 \end{cases}$$

On constate que $k/2 + 2/k \geq 2$. Nous pouvons également déterminer la solution explicite exacte pour $k \geq 2$ qui est :

$$c = \frac{1}{1 + \exp(-k\zeta/2)} \quad (3.67)$$

Ce résultat montre que le terme de convection non-linéaire qui n'apparaît pas dans la théorie KPP, peut changer la forme de la solution. Si k est supérieur à une valeur critique $k_{cr} = 2$, la solution obtenue est celle donnée par l'équation (3.67) et si k est inférieur à k_{cr} la solution est celle associée à $\Lambda = 2$. Cela signifie également que l'effet du terme convection devient négligeable pour $k < 2$.

Le point plus important de l'approche de Murray est la solution de l'équation adimensionnelle, pour la région de k dans laquelle l'approche de AL n'est plus utilisable, qui peut s'écrire sous la forme d'un polynôme du second degré $c(1 - c)$.

3.4.3 Transition de la vitesse de propagation

Revenons maintenant à notre problème en considérant l'équation (3.60). Lorsque $N < 1$, nous avons déterminé que la valeur de E obtenue numériquement tend vers la valeur maximale $E_{max} = (1 + N)^2/4$, cf. équation (3.63). Pour $N \geq 1$, selon l'approche de Murray, l'équation (3.60) donne la solution explicite : $Y = \kappa\tilde{c}(1 - \tilde{c})$. Substituant cette solution dans l'équation (3.60) donne la valeur propre $E = N$. Ainsi, le nombre E est donné par :

$$E = \begin{cases} (1 + N)^2/4 & \text{si } N < 1 \\ N & \text{si } N \geq 1 \end{cases} \quad (3.68)$$

et les taux de décroissance associés sont :

$$\kappa = \begin{cases} (1 + N)/2 & \text{si } N < 1 \\ N & \text{si } N \geq 1 \end{cases} \quad (3.69)$$

Nous voyons qu'à partir de deux racines (3.61) et (3.62), si $N < 1$ nous avons $\kappa_+ = \kappa_- = (1 + N)/2$ tandis que $N \geq 1$ donne $\kappa_+ = N$ et $\kappa_- = 1$. Si $N \geq 1$, la forme de la solution Y conduit à la solution de $\tilde{c}$ sous l'expression suivante :

$$\tilde{c} = \frac{1}{1 + \exp(-\kappa\xi)} \quad \text{avec } \kappa = \kappa(N) = N \quad (3.70)$$

La solution analytique pour $N < 1$ où le n'est pas encore trouvée et nous ne pouvons qu'obtenir les solutions numériques dans ce cas. Le flux turbulent normalisé peut s'écrire :

$$f_t = RN\tilde{c}(1 - \tilde{c}) - R\frac{d\tilde{c}}{d\xi} \quad (3.71)$$

Nous voyons que le flux normalisé s'annule $f_t = 0$ lorsque $N \geq 1$. La diffusion gradient domine la diffusion contre-gradient lorsque $N < 1$, voir figure 4.16. On n'observe jamais la diffusion contre-gradient du flux total quel que soit la valeur du nombre de N . Pour observer ce comportement, il faudrait modifier soit la forme du terme source chimique soit la forme de la partie contre-gradient du flux.

Les valeurs de E obtenues à partir des résolution numériques sont comparées avec celles obtenues par l'expression (3.68) sur la figure 3.19. Nous observons que les valeurs propres E obtenues par les calculs satisfont celles de l'étude analytique. Alors, la vitesse de propagation S_t peut être déduite de l'équation (3.68). Lorsque la diffusion contre-gradient n'est plus négligeable (ou bien N est augmenté) la vitesse de propagation est réduite.

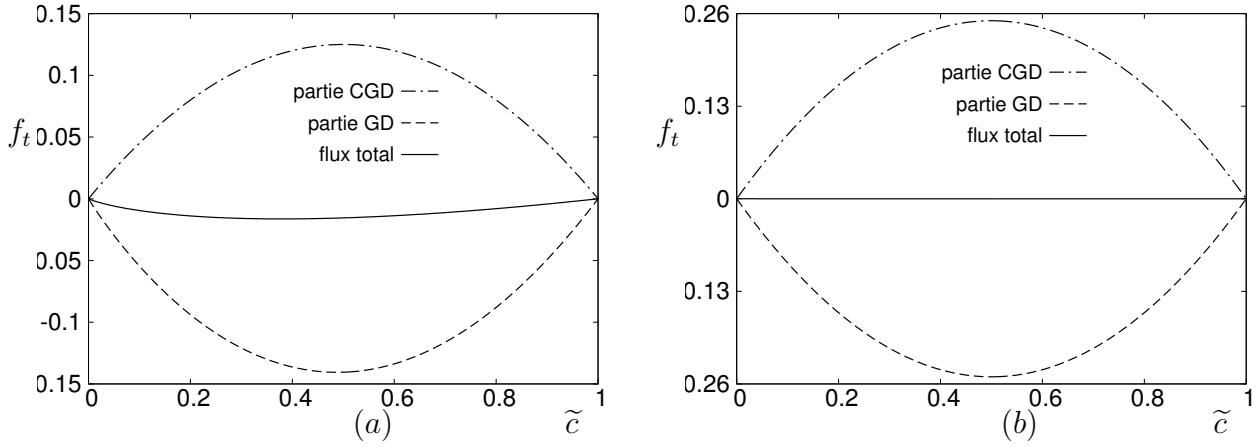


FIGURE 3.18 – Le flux turbulent normalisé f_t (3.71) tracé pour deux valeurs de N : (a). $N = 0.5$ et (b). $N = 1$.

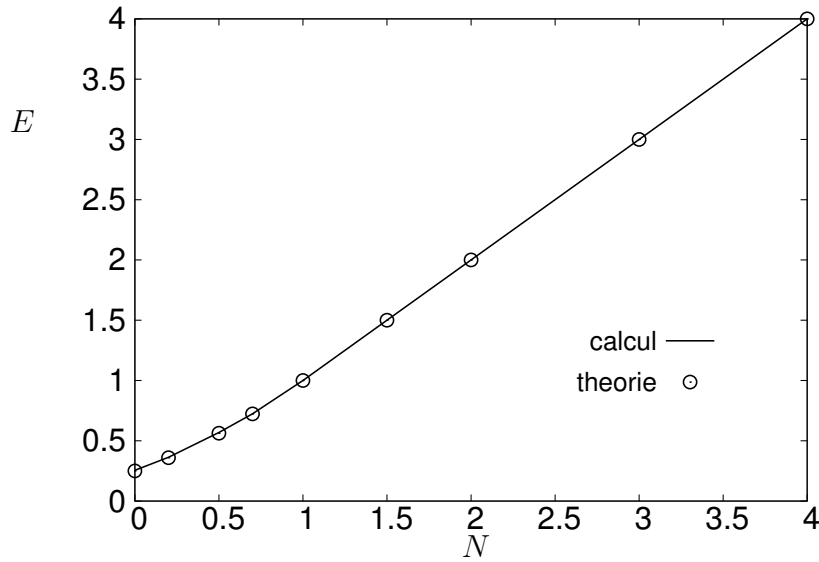


FIGURE 3.19 – Valeurs du nombre sans dimension $E = D_t K / S_t^2$ issues des calculs numériques (3.60) et de l'expression analytique (3.68) tracées en fonction du nombre de Bray N .

Solution stationnaire

L'équation transport en l'état stationnaire de la variable d'avancement moyenne (3.60) dans l'espace composition est considérée. Comme nous avons analysé le système des équations (3.60) et (3.34), la valeur propre E satisfait l'expression (3.68) dépend du nombre de Bray N . Les profils de la variable d'avancement issues des calculs numériques sont présentés sur la figure 3.20(a). Lorsque N est plus grand, la courbe caractérisée est

plus raide.

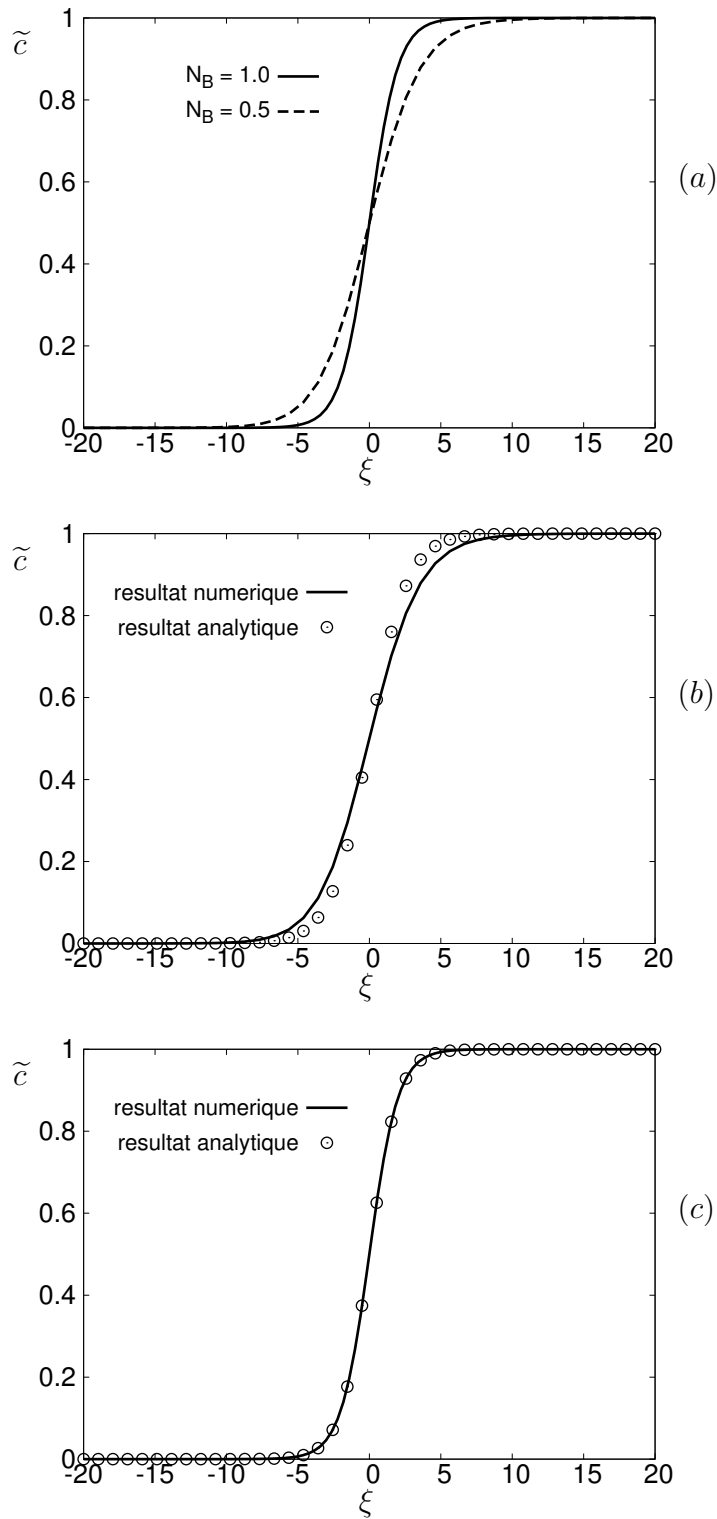


FIGURE 3.20 – (a) : profils de la variable d’avancement tracés pour deux valeurs de N : $N = 0.5$ et $N = 1.0$. (b) et (c) : profils obtenus numériquement sont comparés avec celles de l’expression analytique (3.70) pour $N = 0.5$ (b) et $N = 1.0$ (c).

Ces profils sont comparés avec ceux donnés par l'équation (3.70). Si $N = 0.5$, la solution analytique avec le taux de décroissance $\kappa = (1 + N)/2$ donne un profil plus raide que le résultat numérique de la figure 3.20(b). En revanche, si $N = 1.0$, le profil calculé par résolu le système des équations (3.60) et (3.34) est en bien accord avec celle calculé par l'équation exacte (3.70) avec $\kappa = N$, voir la figure 3.20(c). Ces deux exemples confirment que l'expression (3.70) ne satisfait que la condition $N \geq 1$.

Dans le code de calcul *Mathematica*, le BVP est résolu par une méthode dite de “tir corrigés” ou “Shooting” [65].

Solution instationnaire

Nous considérons l'équation (3.58) pour déterminer une solution instationnaire. Compte tenu que le nombre sans dimension E apparaît dans l'équation (3.58), ce nombre est considéré comme un paramètre d'entrée. Sa valeur est obtenue par la résolution stationnaire qui satisfait l'équation (3.68). Ainsi, pour exécuter un calcul instationnaire nous avons besoin de 3 paramètres d'entrées N , E et V . Dans la suite de cette étude, nous considérons V constante.

Nous proposons une forme de type exponentielle inverse pour la condition initiale ($\theta = 0$) :

$$\tilde{c}(\xi, \theta = 0) = \frac{1}{1 + \exp(-\kappa_{ini}\xi)} \quad (3.72)$$

où κ_{ini} est le taux de décroissance initial. Cette forme est utilisée dans l'article de Ebert et Saarloos [33]. Nous savons que :

$$\tilde{c}(\xi, \theta = 0) = \frac{1}{1 + \exp(-\kappa_{ini}\xi)} \longrightarrow \begin{cases} \exp(-\kappa_{ini}\xi) & \text{quand } \xi \rightarrow \infty \\ 1 & \text{quand } \xi \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (3.73)$$

Si la flamme se propage de la gauche vers la droite, la résolution numérique nécessite d'adapter la solution initiale dans un domaine $(0, \xi_{fin})$:

$$\tilde{c}(\xi, \theta = 0) = \exp(-\kappa_{ini}\xi) \longrightarrow \begin{cases} \exp(-\kappa_{ini}\xi_{fin}) & \text{quand } \xi \rightarrow \xi_{fin} \\ 1 & \text{quand } \xi \rightarrow 0 \end{cases} \quad (3.74)$$

La valeur de κ_{ini} influence la solution $\tilde{c}$ ainsi que la vitesse normalisée $d\xi/d\theta$, nous en discutons de façon plus détaillée dans la suite. L'autre condition initiale temporelle est

$\tilde{c}(\xi = 0, \theta) = 1$. Afin de résoudre l'équation instationnaire, la méthode dite “method of lines” est utilisée [89]. Les calculs sont effectués sur un maillage délimité par $(\xi_{ini}, \xi_{fin}) = (0, 300)$ pour un temps défini par $(\theta_{ini}, \theta_{fin}) = (0, 80)$.

Sur la figure 3.21 nous représentons la propagation du front de flamme moyenne au cours du temps normalisé, avec les paramètres $N = 1$, $E = 1$ et $V = 0$. Le profil initial satisfait l'équation (3.74). Nous voyons qu'à partir de ce profil initial, nous obtenons assez rapidement un profil limite qui n'évolue plus au cours du temps. C'est à dire que lorsque $\theta = 80$, le régime de propagation stationnaire est atteint. La figure 3.22 représente les profils de gradient de la variable d'avancement au cours du temps normalisé. Elle confirme que la propagation tend vers le régime stationnaire lorsque $\theta = 80$. Compte tenu que la vitesse de propagation est pilotée par la valeur de N , nous considérons deux valeurs distinctes $N = 0.5$ et $N = 1$ caractérisées par $N < 1$ et $N \geq 1$.

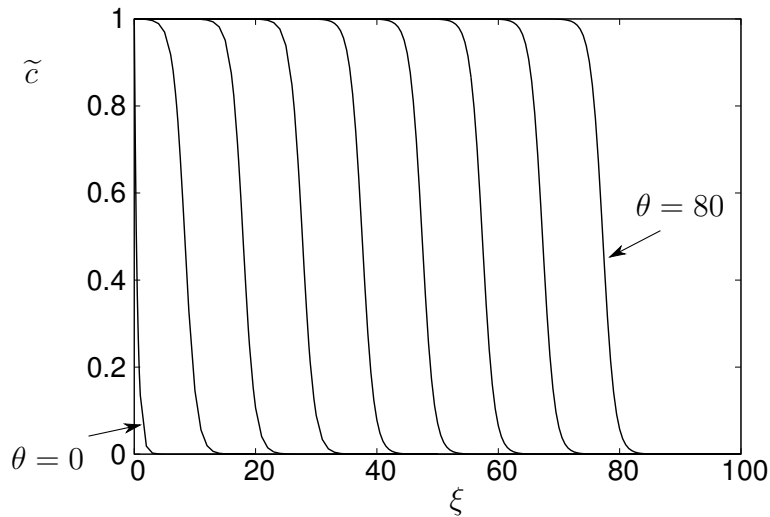


FIGURE 3.21 – Evolution temporelle des profils spatiaux de la variable d'avancement moyenne.

La figure 3.23 présente les profils de la variable d'avancement moyenne calculés par résolutions numériques de l'équation instationnaire. Ils sont comparés avec ceux calculés par résolutions stationnaires pour $N = 0.5$ (à gauche) et $N = 1$ (à droite). Les profils de l'équation instationnaire sont ceux obtenus au temps $\theta = \theta_{fin} = 80$. Un très bon accord est obtenu pour la variable d'avancement moyenne. Cela montre que la capacité de la méthode numérique que nous avons utilisé à rendre compte de l'évolution de la variable d'avancement moyenne. Il convient de mentionner la rapidité des calculs conduits avec

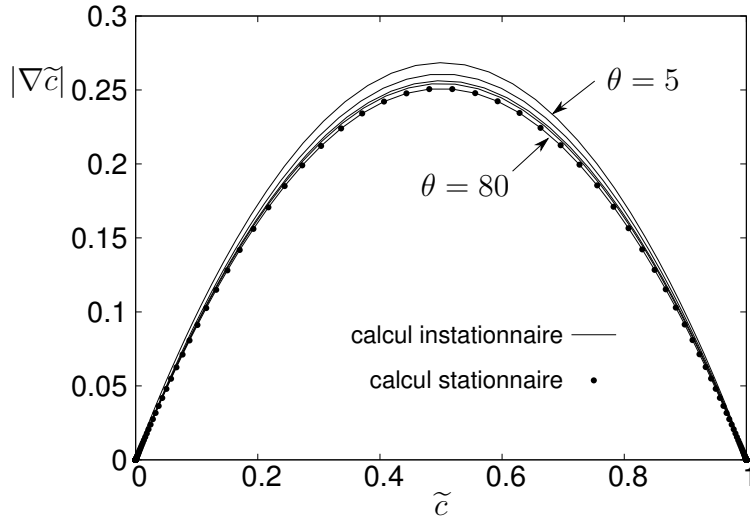


FIGURE 3.22 – Evolution temporelle des profils de gradient de la variable d'avancement moyenne.

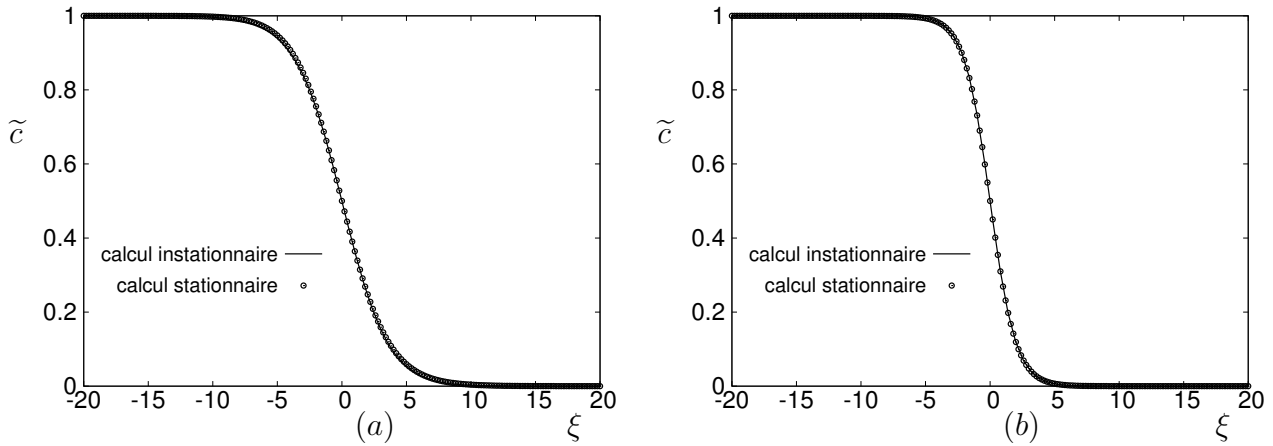


FIGURE 3.23 – Profil limite de la variable d'avancement moyenne obtenu quand le régime de propagation stationnaire est atteint est comparé avec le profil déduit de l'équation stationnaire ($\theta = 80$) pour deux valeurs de N : (a). $N = 0.5$ et (b). $N = 1$.

Mathematica.

Comme le changement variable que nous avons imposé $\theta = S_t^2/D_t t$ et $\xi = S_t/D_t x$, la vitesse normalisée peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\frac{d\xi}{d\theta} = \frac{1}{S_t} \frac{dx}{dt} \quad (3.75)$$

Si nous supposons que le mélange gazeux est initialement au repos en moyenne ($V = 0$), la vitesse de propagation du front de flamme moyen S_t est déterminée par la pente de la valeur moyenne de la variable d'avancement : par exemple $S_t = |dx/dt|_{\tilde{c}=0.5}$. Cela conduit

à la vitesse normalisée $d\xi/d\theta = 1$. Si $V \neq 0$, nous avons $d\xi/d\theta = 1 - V$. Nous pouvons établir cette relation à partir de l'équation (3.58). En multipliant $\partial\xi/\partial\tilde{c}$ à l'équation (3.58) donne :

$$\frac{d\xi}{d\theta} = \frac{1}{R} \frac{d}{d\tilde{c}} \left[R \frac{\partial c}{\partial \xi} - RN\tilde{c}(1 - \tilde{c}) \right] + E \frac{\partial \xi}{\partial \tilde{c}} \tilde{c}(1 - \tilde{c}) - V \quad (3.76)$$

Dans la partie stationnaire, la résolution donne le gradient de la variable d'avancement moyenne sous la forme $d\tilde{c}/d\xi = \kappa\tilde{c}(1 - \tilde{c})$. Substituant cette forme à l'équation ci-dessus permet d'obtenir :

$$\frac{d\xi}{d\theta} = (\kappa - N) \frac{1}{R} \frac{d}{d\tilde{c}} [R\tilde{c}(1 - \tilde{c})] + \frac{E}{\kappa} - V \quad (3.77)$$

$$= (\kappa - N) [1 - 2\tilde{c} - \tau R\tilde{c}(1 - \tilde{c})] + \frac{E}{\kappa} - V \quad (3.78)$$

En considérant $\tilde{c} \rightarrow 0$ nous obtenons la relation suivante²

$$\frac{d\xi}{d\theta} \rightarrow \kappa + \frac{E}{\kappa} - N - V \quad (3.79)$$

Les deux quantités κ et E satisfont deux équations (3.69) et (3.68). Si $N < 1$, en remplaçant $\kappa = (1 + N)/2$ et $E = (1 + N)^2/4$ à l'équation (3.79) on obtient :

$$\frac{d\xi}{d\theta} \rightarrow \frac{1 + N}{2} + \frac{1 + N}{2} - N - V = 1 - V \quad (3.80)$$

et, si $N \geq 1$, avec $\kappa = N$ et $E = N$ l'équation (3.79) devient :

$$\frac{d\xi}{d\theta} \rightarrow N + 1 - N - V = 1 - V \quad (3.81)$$

L'expression de la vitesse normalisée est obtenue. La figure 3.24 représente cette vitesse normalisée en fonction du temps calculée par certaines valeurs de variable d'avancement moyenne $\tilde{c} = 0.01, 0.1, 0.5, 0.9$ respectivement de haut en bas. Pour simplifier, la valeur de V est zero dans les deux cas ($N < 1$ et $N > 1$), enfin comme le montre les équations (3.80) et (3.81) $d\xi/d\theta$ tend vers l'unité dans les deux cas.

La vitesse normalisée des calculs instationnaires est en accord avec les expressions théoriques (3.80) et (3.81) quand $\theta \rightarrow \theta_{fin}$. Nous voyons que la vitesse tend vers l'unité pour $N = 1$ (Fig. 3.24(b)) plus rapide que celle pour $N = 0.5$ (Fig. 3.24(a)). Cela montre que si N est plus grand la convergence au régime de propagation stationnaire est plus

2. La vitesse correspondante est la vitesse de propagation normalisée du front.

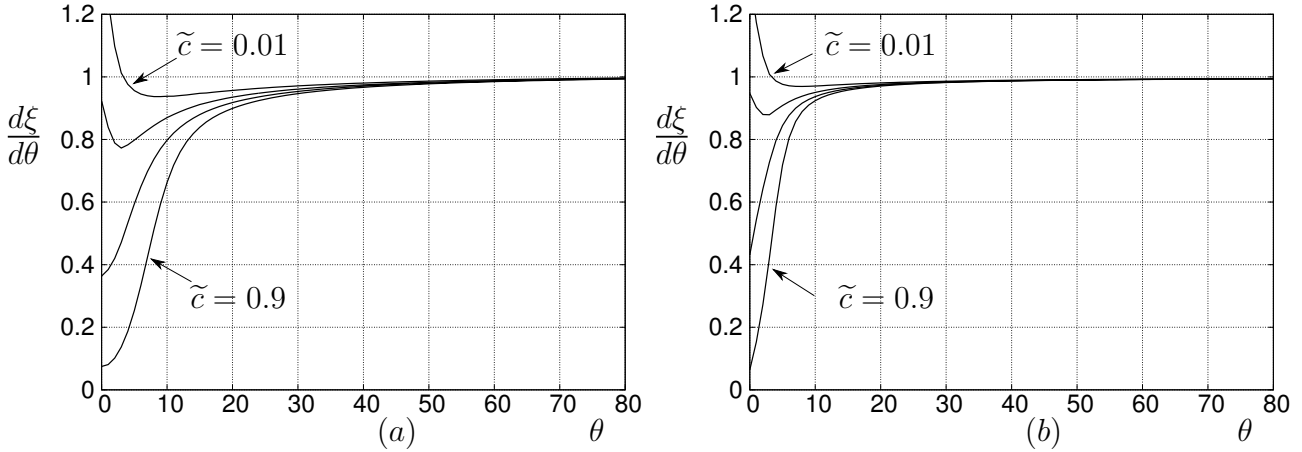


FIGURE 3.24 – Profils de la vitesse normalisée au cours du temps obtenus numériquement de l'équation instationnaire pour deux valeurs de N : (a). $N = 0.5$ et (b). $N = 1$.

rapide. Afin d'obtenir l'équation (3.79) la forme du gradient de variable progrès moyenne, soit la solution de l'équation stationnaire (3.60) lorsque $N \geq 1$, est utilisée. Pourtant, la vitesse pour $N < 1$ satisfait aussi à l'équation (3.79). Cela montre que la vitesse de propagation normalisée n'a qu'un comportement quelle que soit la valeur de N .

L'approche AL appliquée à l'équation stationnaire du côté des gaz frais permet d'obtenir deux taux de décroissance κ_+ et κ_- qui sont les suivants :

$$\kappa = \begin{cases} \kappa_+ = \kappa_- = (1 + N)/2 & \text{si } N < 1 \\ \kappa_+ = N, \kappa_- = 1 & \text{si } N \geq 1 \end{cases} \quad (3.82)$$

Si $N = 0.5$ alors $\kappa_- = 0.75$ et si $N = 1$ alors $\kappa_- = 1$. La solution pertinente est associée à la branche κ_- si $N < 1$, tandis qu'elle est associée à la branche κ_+ si $N \geq 1$, voir l'équation (3.69). L'influence de la valeur initiale du taux de décroissance κ_{ini} sur la structure des flammes est donc considérée. Les résultats sur les figures 3.23 et 3.24 sont obtenus avec $\kappa_{ini} = 2 > \kappa_-$. Nous considérons maintenant $\kappa_{ini} = 0.5 < \kappa_-$ et re-réolvons l'équation (3.58) avec même maillage. La figure 3.25 illustre la comparaison des profils spatiaux de variable d'avancement moyenne calculés avec $\kappa_{ini} = 0.5$ et $\kappa_{ini} = 2$ pour $N = 0.5$ et $N = 1$.

Nous observons que si la solution initiale retenue n'est pas suffisamment raide ($\kappa_{ini} = 0.5 < \kappa_-$), alors la solution obtenue quand $\theta = \theta_{fin}$ ne peut pas converger vers le profil obtenu avec $\kappa_{ini} = 2 > \kappa_-$. Suivant l'équation (3.70), la variable progrès moyenne satisfait

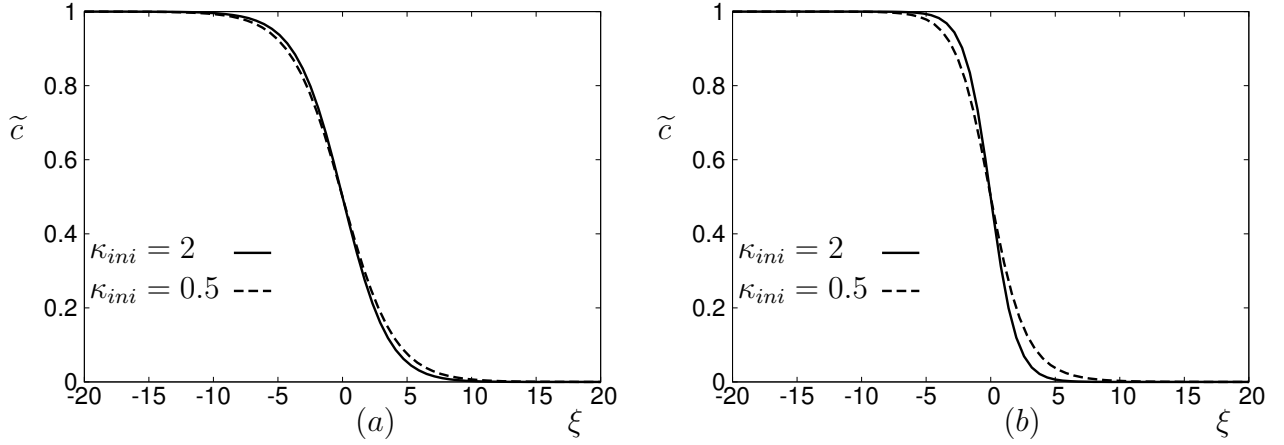


FIGURE 3.25 – Profils limites de la variable d’avancement moyenne obtenues pour $\kappa_{ini} = 0.5$ comparés avec ceux issus de $\kappa_{ini} = 2$ pour deux valeurs de N : $N = 0.5$ (a) et $N = 1$ (b).

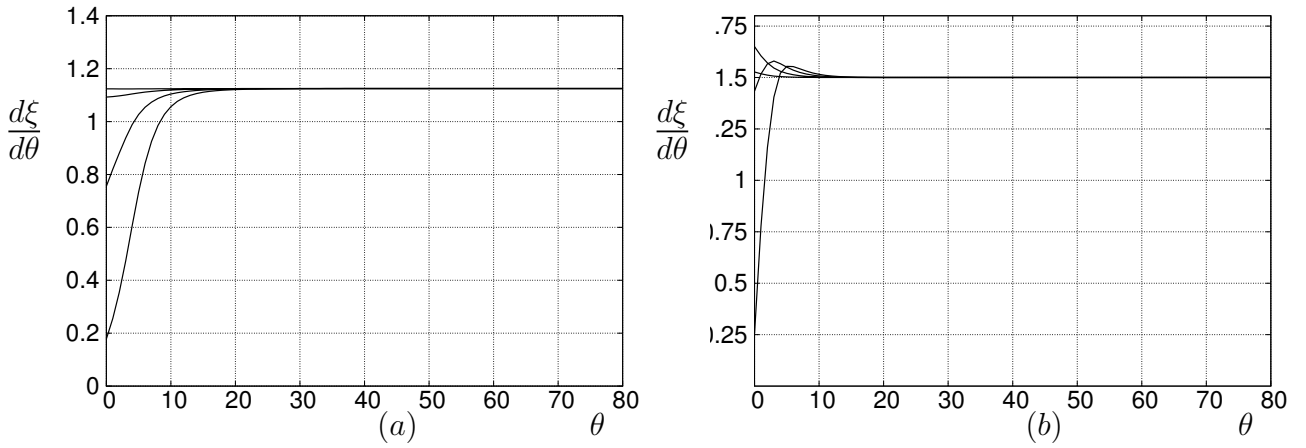


FIGURE 3.26 – Profils de la vitesse normalisée au cours du temps obtenus numériquement via l’équation instationnaire avec le taux de décroissance initial $\kappa_{ini} = 0.5$ pour deux valeurs de N : $N = 0.5$ (a) et $N = 1$ (b).

l’expression suivante si $N \geq 1$:

$$\tilde{c} = \frac{1}{1 + \exp(-\kappa_{ini}\xi)} \quad (3.83)$$

La solution converge donc à la vitesse $d\xi/d\theta \rightarrow \kappa_{ini} + E/\kappa_{ini} - N - V$ (issu de l’Eq. (3.79)) et, si $V = 0$, nous obtenons $d\xi/d\theta \rightarrow 1.125$ pour $N = 0.5$, et $d\xi/d\theta \rightarrow 1.5$ pour $N = 1$. Ces valeurs sont validées sur la figure 3.26.

3.5 Conclusion

Ce chapitre présente une étude analytique et numérique des caractéristiques propagatives du front de flammes prémélangées turbulentes monodimensionnelles. Lorsque le taux de réaction est modélisée par une approche de type flammelette, on peut évaluer analytiquement la vitesse de propagation, en utilisant l'analyse linéaire, par les valeurs des paramètres du côté des gaz frais. L'équation de transport de la variable d'avancement moyenne est résolue numériquement utilisant le changement de variable à un système d'équations de type BVP. La vitesse de propagation turbulent est alors déterminée S_t via un nombre sans dimension E qui est la valeur propre du système d'équations.

Compte tenu du passage d'un régime des flammelettes à un régime de réaction chimique laminaire à la traversée du *flame brush*, différents modèles du terme source chimique ont été présentés [1, 42, 68]. On introduit aussi deux modèles du taux de réaction chimique moyen $\bar{\omega}_{BRG}$ et $\bar{\omega}_{TDF}$ pour caractériser ce phénomène via l'évolution du taux de ségrégation.

Lorsque l'effet de la diffusion à contre-gradient est pris en compte, la solution de l'équation de transport moyenne dépend de la valeur initiale d'un nombre sans dimension N . La vitesse de propagation est contrôlée aussi par la valeur initial du taux de décroissance κ_{ini} . Les résultats numériques (stationnaire et instationnaire) confirment les résultats théoriques. Cependant, on ne peut pas déterminer la forme explicite pour la vitesse de propagation S_t dans le cas instationnaire.

Chapitre 4

Modèle généralisé pour la combustion turbulente prémélangée

Les travaux présentés dans ce chapitre ont fait l'objet d'une publication dans Journal of Fluid Mechanics (cf. Annexe C).

4.1 Echelles caractéristiques des flammelettes

4.1.1 Flammelettes laminaires et flammelettes turbulentes

La description des flammes turbulentes proposée dans cette partie repose sur le concept, très largement utilisé dans la littérature, de flammelettes. Toutefois, dans cette description, l'échelle caractéristique des flammelettes ne correspond pas nécessairement à l'épaisseur d'une flamme laminaire δ_L . En effet, les flammelettes sont considérées ici comme n'étant que des éléments ou portions de flamme laminaire dont l'épaisseur finie est notée l_x . L'introduction de cette échelle de longueur spécifique ne modifie ni la phénoménologie de l'interaction flamme-turbulence impliquée dans le régime de flammes plissées, ni les résultats de la théorie associée de Bray-Moss-Libby [14]. L'utilisation de cette longueur n'est qu'une étape nécessaire pour permettre l'analyse détaillée des bords du *flame brush*. Cette analyse constitue l'objectif de ce chapitre. Dans un premier temps, la structure d'une flamme laminaire ainsi que les régimes de combustion turbulente prémélangée sont décrits.

La variable d'avancement c , nulle ($c \equiv 0$) dans les gaz frais et égale à l'unité ($c \equiv 1$) dans les gaz brûlés, est à nouveau utilisée dans ce chapitre. Le taux de réaction chimique est donné par la loi d'Arrhénius, voir l'équation (3.4). Pour analyser la structure d'une flamme laminaire prémélangée plane, on considère un écoulement stationnaire et monodimensionnel. La forme du taux de réaction chimique permet de décrire la structure interne de la flamme laminaire comme étant composée de deux zones principales : la zone de préchauffage et la zone de réaction. La zone de préchauffage est caractérisée par un équilibre entre convection et diffusion. L'équation de transport de la variable de progrès dans cette zone s'exprime de la manière suivante (dédit de l'équation (3.3)) :

$$\rho_u S_L \frac{dc}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\rho D \frac{dc}{dx} \right) \quad (4.1)$$

Lorsque l'hypothèse : $\rho D \approx \rho_u D_u$ est utilisée, la forme adimensionnelle de cette équation peut être écrite de la façon suivante :

$$\frac{dc}{d\xi} = c \quad (4.2)$$

où $\xi = (S_L/D_u)x \equiv x/\delta_L$. L'évolution de la variable de progrès dans la zone de préchauffage est donc représentée par une fonction exponentielle à partir des gaz frais lorsque $x \rightarrow -\infty$ ($c \rightarrow 0$), où la diffusion moléculaire domine, jusqu'à la zone où les réactions chimiques se produisent. Dans la limite des grandes valeurs du nombre de Zeldovich, l'énergie d'activation est grande ($\beta \rightarrow \infty$), la zone de réaction est donc très mince comparée à la zone de préchauffage et est localisée du côté des gaz brûlés ($\xi = 0, c \rightarrow 1$). Dans ce cas, l'épaisseur de la flamme laminaire, qui correspond à la zone où la variable d'avancement c varie de manière significative, peut être déduite de la valeur maximale du gradient scalaire de la zone de préchauffage, voir Fig. 4.1. Ainsi, pour $\beta \rightarrow \infty$, l'épaisseur δ_L de la flamme laminaire correspond à la zone où la variable d'avancement est comprise entre $c_{\delta_L} = \exp(-1)$ et 1. Notons que cette valeur de c du côté des gaz frais est loin d'être négligeable. Par conséquent, l'utilisation de cette épaisseur de flamme laminaire δ_L pour caractériser les flammelettes ne sera pas valable près du bord des gaz frais où une analyse précise nécessite de décrire des structures laminares là où la variable d'avancement est susceptible d'être inférieure à cette valeur limite c_{δ_L} . C'est pour cette raison qu'une nouvelle longueur caractéristique des flammelettes, différente de δ_L , est introduite dans ce chapitre.

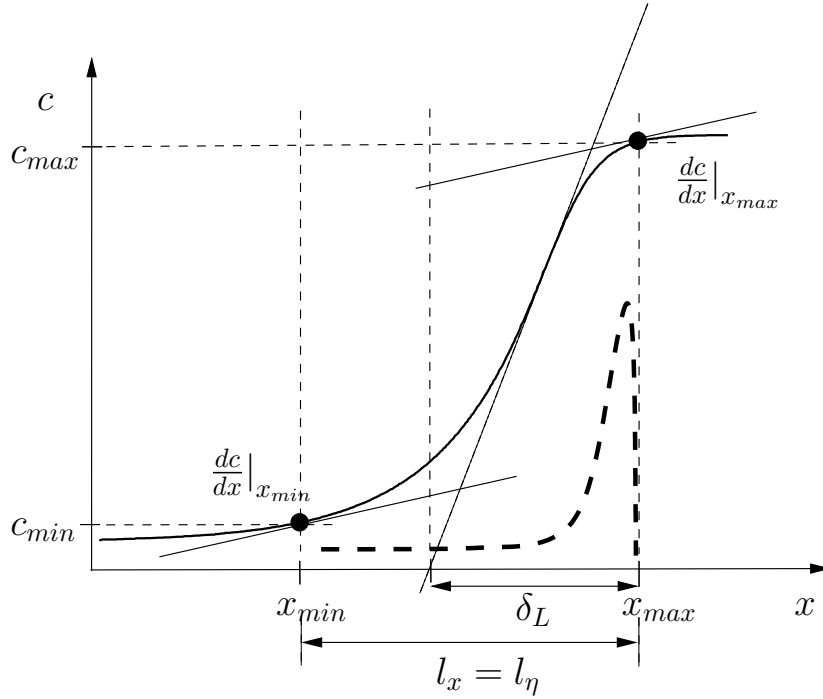


FIGURE 4.1 – Description de la procédure retenue pour définir les limites de flammelette dans l'espace physique et l'espace des compositions

Lorsque l'on étudie le régime de combustion turbulente, trois nombres non-dimensionnels Da , Ka et Re_t sont considérés. Ces nombres sont reliés entre eux par : $Re_t = Da^2 Ka^2$. Dans ce chapitre, on considère les situations correspondantes à des grandes valeurs de Da et à des valeurs faibles mais finies de Ka . Ainsi, les deux nombres Re_t et Ka sont deux grandeurs indépendantes qui permettent de caractériser le régime de combustion turbulente.

Dans le régime de flammes plissées, la structure interne de flamme laminaire n'est pas modifiée par la turbulence. Le concept de flammelette laminaire est retenu pour décrire la structure locale des zones de réaction de la flamme turbulente. Ainsi, aux plus petites échelles de l'écoulement turbulent, les processus moléculaires impliqués dans les flammes, diffusion moléculaire et réactions chimiques, sont les processus dominants. Les régimes de combustion turbulente sont délimités *a priori* à partir de l'épaisseur de flamme laminaire δ_L . Pour autant, cette quantité ne fournit aucune information sur l'épaisseur réelle des flammelettes présentes dans l'écoulement turbulent. Ainsi, on introduit l'échelle l_x pour définir l'épaisseur caractéristique des flammelettes. La quantité $Rf_x = \delta_L/l_x$ est le rapport

de l'épaisseur de flamme laminaire à l'épaisseur des flammelettes. Dans le régime de flammes plissées, l_x est nécessairement plus grand que δ_L et les flammelettes se composent de la majeure partie de la structure d'une flamme laminaire. Le cas limite $l_x \rightarrow \infty$ signifie que la structure entière de la flamme laminaire peut subsister dans l'écoulement turbulent, tandis que le cas limite $l_x \rightarrow 0$ signifie que les structures de flammes laminares n'existent pas. Finalement, les flammelettes sont considérées ici comme un ensemble de *morceaux* de flamme laminaire qui ne contiennent que les valeurs les plus élevées du gradient scalaire. Ainsi, les parties de flamme laminaire correspondant aux valeurs les plus faibles du gradient scalaire seront modifiées par les structures tourbillonnaires et ne feront pas partie des flammelettes. Les valeurs extrêmes de la variable d'avancement qui délimitent le profil de flammelette, sont notées c_{min} et c_{max} . En conséquence, l'épaisseur de flammelette dans l'espace des compositions est $\delta_c = c_{max} - c_{min}$ et $\delta_c \rightarrow 1$ lorsque $Rf_x \rightarrow 0$ et $\delta_c \rightarrow 0$ lorsque $Rf_x \rightarrow \infty$. La procédure pour déterminer ces valeurs extrêmes de c est présentée dans la section suivante. Il convient de noter que d'autres descriptions de la modification progressive par la turbulence du profil interne de flammelette ont été proposées précédemment dans la littérature par Pope et Anand [75] et Mura, Galzin et Borghi [62].

Dans un écoulement turbulent, la taille des structures dont le comportement peut être considéré comme laminaire correspond aux plus petites échelles caractéristiques de l'écoulement. Par conséquent, et pour des raisons de simplicité, on considère maintenant que l'échelle caractéristique l_x de flammelette dont la structure est laminaire correspond à la plus petite échelle de la turbulence : l'échelle de Kolmogorov l_η . Ainsi, le rapport de la flamme laminaire à l'échelle de longueur de flammelette est relié au nombre de Karlovitz :

$$Rf_x = \frac{\delta_L}{l_x} = \mathcal{O}\left(\frac{\delta_L}{l_\eta}\right) = \mathcal{O}(\sqrt{Ka}) \quad (4.3)$$

Une autre échelle de longueur peut être utilisée pour définir l_x , il s'agit de l'échelle de Gibson l_G introduite par Peters [70, 71]. La relation entre cette échelle et l'échelle intégrale est connue : $l_G = l_t(S_L/v_{RMS})^3$ avec v_{RMS} la fluctuation de vitesse caractéristique turbulente telle que $Re_t = v_{RMS}l_t/\nu$. Dans ce cas, le rapport Rf_x s'écrit $Rf_x = \mathcal{O}(\delta_L/l_G) = \mathcal{O}(Ka^2)$. Le comportement de δ_c pour ces deux définitions de l'échelle caractéristique de flammelette $l_x = l_\eta$ et $l_x = l_G$ est présenté dans la figure 4.2. Dans la section suivante, une

analyse de l'évolution des quantités statistiques sur les bords des flammes turbulentes prémélangées est proposée.

4.1.2 Calcul de la structure des flammelettes

Rappelons que la structure d'une flamme laminaire peut être étudiée numériquement en cherchant la solution du problème aux limites correspondant (*Boundary Value Problem*), voir section 3.1. Ainsi, on peut obtenir les évolutions de la variable d'avancement et du gradient quel que soit le mécanisme chimique considéré simplifié à une étape globale ou bien détaillé, voir les figures 3.2 et 3.4. Les limites des flammelettes dans l'espace physique, i.e. x_{min} et x_{max} ainsi que dans l'espace des compositions, i.e. c_{min} et c_{max} sont fonctions des valeurs du nombre de Karlovitz. La procédure pour les déterminer est la suivante :

- L'échelle de longueur de flammelette l_x est évaluée à partir de l'équation (4.3) connaissant la valeur du nombre de Karlovitz Ka et la valeur de l'épaisseur de flamme laminaire δ_L .
- De plus, les limites de la flammelette dans l'espace physique x_{min} et x_{max} satisfont les conditions suivantes : $l_x = x_{max} - x_{min}$ et $dc/dx|_{x=x_{min}} = dc/dx|_{x=x_{max}}$.

Cette procédure est illustrée dans la figure 4.1. La structure de flammelette ne comporte que les valeurs les plus élevées du gradient scalaire. Dans l'écoulement turbulent, seule cette partie de la structure interne de flammelette est maintenue. Les valeurs les plus petites du gradient scalaire sont quant à elles modifiées par les mouvements turbulents : le côté des gaz frais et le côté des gaz brûlés de la structure de flammelette laminaire sont perturbés par l'écoulement turbulent.

Dans le cas limite des valeurs infiniment grandes du nombre de Zeldovich ($\beta \rightarrow \infty$), la valeur de c_{max} tend vers l'unité, i.e. $c_{max}^{\beta \rightarrow \infty} \rightarrow 1$, quelle que soit la valeur de l_x . Donc, l'intégration de l'équation (4.2) dans la zone de préchauffage de la flammelette de $c_{min}^{\beta \rightarrow \infty}$ à 1 conduit à la valeur de $c_{min}^{\beta \rightarrow \infty}$:

$$c_{min}^{\beta \rightarrow \infty} = \exp(-1/\sqrt{Ka}) \quad (4.4)$$

On constate que cette valeur ne dépend que de la valeur du nombre de Karlovitz Ka . Si on considère $l_x = l_G$, la valeur minimale de la variable de progrès dans le cas des valeurs

infiniment grandes du nombre de Zeldovich se ré-écrit :

$$c_{min}^{\beta \rightarrow \infty} = \exp(-1/Ka^2) \quad (4.5)$$

La figure 4.2 représente l'évolution de la différence $\delta_c = 1 - c_{min}^{\beta \rightarrow \infty}$ pour les deux définitions de l_x : $l_x = l_\eta$ conduit à $\delta_c = 1 - \exp(-1/\sqrt{Ka})$ alors que $l_x = l_G$ conduit à $\delta_c = 1 - \exp(-1/Ka^2)$. De manière générale, suivant la loi puissance reliant l_x à l_t (ou l_η), on obtient $\delta_c = 1 - \exp(-1/Ka^n)$ avec $n > 0$.

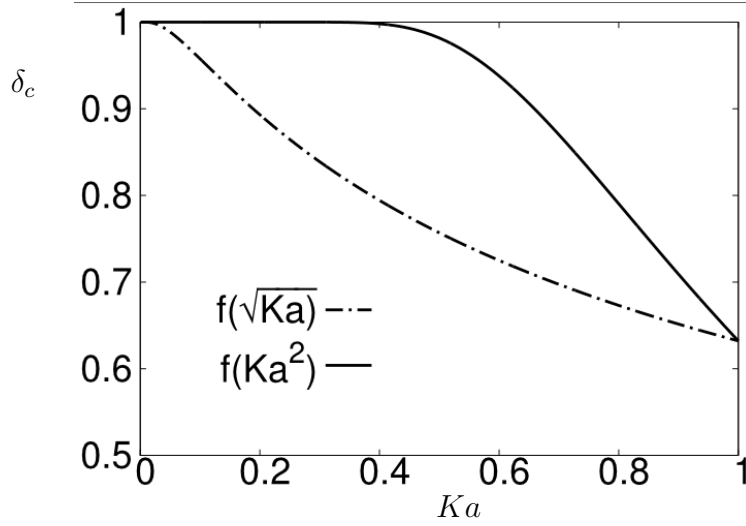


FIGURE 4.2 – Evolutions de $\delta_c = c_{max}^{\beta \rightarrow \infty} - c_{min}^{\beta \rightarrow \infty}$ en fonction du nombre de Karlovitz pour les deux définitions de l_x : $l_x = l_\eta$ (ligne discontinue) et $l_x = l_G$ (ligne continue).

On observe que cette épaisseur δ_c dans l'espace des compositions diminue très rapidement quand Ka augmente pour $l_x = l_\eta$ alors qu'en considérant l'échelle de Gibson, δ_c ne diminue qu'à partir de $Ka = 0.4$. Finalement, lorsque Ka approche l'unité cette épaisseur tend vers la même valeur $\delta_c = 1 - \exp(-1)$ pour les deux définitions. On peut donc en conclure que, même pour des valeurs modérées du nombre de Ka , les structures de flammelettes ne peuvent pas être représentées par des flammes laminaires complètes où $\delta_c \rightarrow 1$ mais seulement par des portions de flammelettes. L'approche proposée ici permet donc de quantifier cette portion de flamme laminaire en évaluant l'épaisseur de cette structure.

4.2 Description du modèle de flammelettes d'épaisseur finie

4.2.1 Valeurs aux bords des flammelettes

L'introduction de l'échelle de longueur spécifique à la flammelette conduit à une définition précise de sa structure interne et des valeurs aux bords. Cependant, pour décrire le *flame brush* turbulent en tenant compte de l'épaisseur finie des flammelettes, il est également nécessaire de définir une forme de PDF présumée cohérente avec cette description. L'une des PDF présumée la plus étudiée en combustion turbulente est la forme quasi-bimodale introduite par Bray et Moss [58]. Cette forme a été présentée dans la partie "Modèle Bray-Moss-Libby", voir (2.7) :

$$\tilde{P}(c, x) = \alpha_c \delta(c) + \beta_c \delta(1 - c) + \gamma_c \tilde{f}(c) \quad (4.6)$$

avec $\alpha_c + \beta_c + \gamma_c = 1$. Dans la limite de flamme mince non courbée ni étirée, la fonction $\tilde{f}(c)$, appelée PDF interne aux flammelettes, est inversement proportionnelle au gradient de la variable d'avancement dc/dx . Ainsi, la PDF interne s'écrit de la façon suivante :

$$\tilde{f}(c) = C_1^* (dc/d\xi)^{-1} \quad (4.7)$$

où C_1^* est une constante de normalisation sans dimension qui peut être évaluée de la manière suivante en utilisant la condition de normalisation de la PDF interne ($\int_0^1 \tilde{f}(c) dc = 1$) :

$$C_1^* = \left(\int_0^1 \frac{1}{dc/d\xi} dc \right)^{-1} = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \right)^{-1} \quad (4.8)$$

La variable d'avancement moyenne $\tilde{c}$ et sa variance $\widetilde{c'^2}$ peuvent s'écrire en utilisant la relation (4.6), de la façon suivante :

$$\tilde{c} = \beta_c + \gamma_c I_1 \quad (4.9)$$

$$\widetilde{c'^2} = \beta_c + \gamma_c I_2 - \tilde{c}^2 \quad (4.10)$$

Les deux moments conditionnés dans les flammelettes, c'est à dire les intégrales I_1 et I_2 , sont définis par :

$$I_1 = \int_0^1 c \tilde{f}(c) dc = C_1^* \int_0^1 c (dc/d\xi)^{-1} dc = C_1^* \int_{-\infty}^{+\infty} c(\xi) d\xi \quad (4.11)$$

$$I_2 = \int_0^1 c^2 \tilde{f}(c) dc = C_1^* \int_0^1 c^2 (dc/d\xi)^{-1} dc = C_1^* \int_{-\infty}^{+\infty} c(\xi)^2 d\xi \quad (4.12)$$

avec C_1^* déduit de l'expression (4.8). Toutefois, l'utilisation pratique de ces expressions nécessite d'introduire des valeurs finies pour les limites d'intégration. La constante C_1^* est donc évaluée de la façon suivante :

$$C_1^* = \left(\int_{\xi_{min}}^{\xi_{max}} d\xi \right)^{-1} = (\xi_{max} - \xi_{min})^{-1} = \delta_\xi^{-1} \quad (4.13)$$

où les valeurs retenues pour les limites ξ_{min} et ξ_{max} ont une conséquence importante sur le résultat des intégrales C_1^* , I_1 , I_2 , voir la table 4.1 (valeurs obtenues avec $\beta = 10$). La figure 4.3 représente la PDF interne $\tilde{f}(c)$ pour différentes valeurs de la constante de normalisation C_1^* obtenue en considérant la structure de flammelette laminaire décrite avec une chimie simplifiée et $\beta = 10$. Comme attendu, la PDF interne présente un comportement fortement bimodal avec deux pics sur les bords de la structure de flammelettes.

C_1^*	ξ_{min}	ξ_{max}	δ_ξ	I_1	I_2
0.05	-15.848	4.152	20	0.176	0.149
0.1	-7.137	2.863	10	0.222	0.171
0.2	-2.779	2.220	5	0.315	0.213
0.5	-0.186	1.814	2	0.509	0.171

TABLE 4.1 – Quantités intégrales C_1^* , I_1 , I_2 obtenues pour différentes valeurs des limites ξ_{min} et ξ_{max} avec $\beta = 10$.

Le taux de ségrégation a été introduit précédemment comme le rapport de la variance de la variable de progrès sur sa valeur maximale. Ce taux a été présenté dans le modèle BCL (voir la section 2.2.3) :

$$S = \frac{\widetilde{c'^2}}{\widetilde{c}(1 - \widetilde{c})} \quad (4.14)$$

Comme on en a déjà discuté dans l'introduction du modèle BCL, le taux de ségrégation

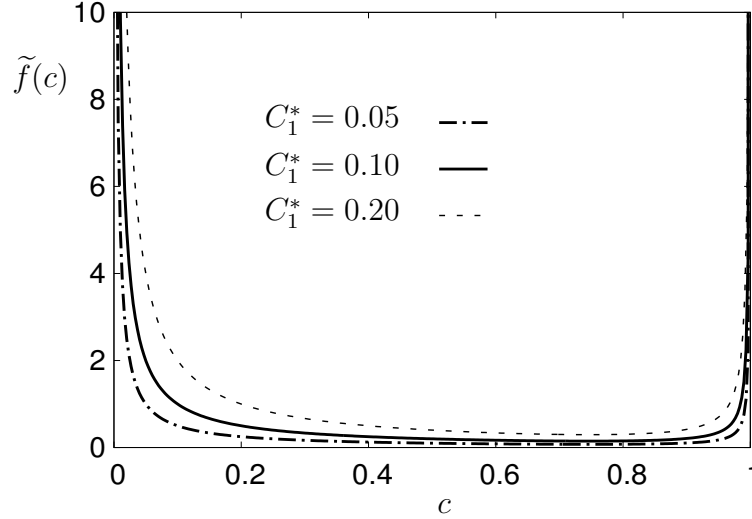


FIGURE 4.3 – Fonction densité de probabilité de la structure interne des flammelettes $\tilde{f}(c)$ obtenue avec une chimie globale à une étape et $\beta = 10$ pour différentes valeurs de la constante de normalisation C_1^* .

n'est pas constant et l'objectif de la suite de cette section est d'étudier l'évolution du taux de ségrégation S à travers le *flame brush*.

La considération de grandes valeurs du nombre de Damköhler permet de négliger γ_c ($\gamma_c \ll \alpha_c, \beta_c$) dans l'Eq. (4.6). Pourtant, le *leading edge* correspond à l'apparition de la première structure de flammelette dans l'écoulement. Ainsi, on considère ici que le *leading edge* est caractérisé par $\beta_c \ll \gamma_c$ où la probabilité de trouver des gaz brûlés devient plus petite que la probabilité d'être dans la flammelette. Les moments du premier ordre et du deuxième ordre de la variable d'avancement s'écrivent donc : $\tilde{c} = \gamma_c I_1$ et $\tilde{c}^2 = \gamma_c I_2 - \tilde{c}^2$. Le taux de ségrégation s'exprime donc de la manière suivante : $S = (I_2/I_1 - \tilde{c})/(1 - \tilde{c})$, ce qui correspond évidemment à une quantité plus petite que l'unité.

Au *leading edge*, quand $\tilde{c} \rightarrow 0$, le taux de ségrégation est donc une propriété des flammelettes :

$$S_{(\tilde{c} \rightarrow 0)} \rightarrow I_2/I_1 \quad (4.15)$$

Une analyse similaire est effectuée au *trailing edge* du *flame brush* où $\alpha_c \ll \gamma_c$. Quand $\tilde{c} \rightarrow 1$ le taux de ségrégation tend vers :

$$S_{(\tilde{c} \rightarrow 1)} \rightarrow 1 - (I_1 - I_2)/(1 - I_1) \quad (4.16)$$

Si on considère maintenant le cas limite $\beta \rightarrow \infty$ et des flammelettes infiniment minces

($Da \rightarrow \infty$), on obtient les valeurs du taux de ségrégation au *leading edge* et au *trailing edge* :

$$S_{(\tilde{c} \rightarrow 0)} = I_2/I_1 = \int_0^1 cdc / \int_0^1 dc = 1/2 \quad (4.17)$$

$$S_{(\tilde{c} \rightarrow 1)} = 1 - (I_1 - I_2)/(1 - I_1) \rightarrow 1 \quad (4.18)$$

Finalement, dans le cas particulier des grandes valeurs du nombre de Damköhler et du nombre de Zeldovich, le taux de ségrégation au *leading edge* n'est pas égal à l'unité mais à un demi. De plus, dans un cas plus général ($\forall \beta, \forall Da$), ce taux de ségrégation sur les bords du *flame brush* dépend de la constante de normalisation C_1^* et des valeurs limites des flammes locales. Ces valeurs limites doivent donc être décrites précisément via le concept d'épaisseur finie des flammelettes.

4.2.2 Forme de PDF généralisée

Afin de tenir compte de l'échelle caractéristique l_x introduite dans la section précédente, la forme de la PDF utilisée doit être généralisée. Cette forme généralisée s'écrit de la manière suivante :

$$\tilde{P}(c, x) = \alpha_c \delta(c - c_{min}) + \beta_c \delta(c_{max} - c) + \gamma_c \tilde{f}(c) \quad (4.19)$$

où c_{min} et c_{max} sont les valeurs limites de la variable d'avancement au-delà desquelles la structure de flammelette est modifiée par turbulence. Notons qu'une forme de PDF basée sur deux fonctions de Dirac positionnées dans l'espace des compositions $c \neq 0$ et $c \neq 1$ a déjà été considérée dans l'analyse de Libby et Williams [54].

Les moments du premier et du deuxième ordre de la variable d'avancement sont :

$$\tilde{c} = \alpha_c c_{min} + \beta_c c_{max} + \gamma_c I_1 \quad (4.20)$$

$$\tilde{c'^2} = \alpha_c c_{min} + \beta_c c_{max} + \gamma_c I_2 - \tilde{c}^2 \quad (4.21)$$

avec

$$I_1 = \int_{c_{min}}^{c_{max}} c \tilde{f}(c) dc \quad (4.22)$$

$$I_2 = \int_{c_{min}}^{c_{max}} c^2 \tilde{f}(c) dc \quad (4.23)$$

et

$$\int_{c_{min}}^{c_{max}} \tilde{f}(c) dc = 1 \quad (4.24)$$

La constante de normalisation C_1^* , voir Eq. (4.13), est maintenant parfaitement définie : $C_1^* = \delta_\xi^{-1} = \delta_L/l_x = Rf_x = \mathcal{O}(\sqrt{Ka})$ et elle est directement reliée au nombre de Karlovitz.

Le cas limite de flamme mince, c'est à dire $\gamma_c \rightarrow 0$, conduit à une forme quasi-bimodale de la PDF et l'équation (4.19) devient :

$$\tilde{P}(c, x) = \alpha_c \delta(c - c_{min}) + \beta_c \delta(c_{max} - c) + \mathcal{O}(\gamma_c) \quad (4.25)$$

Ainsi, le taux de ségrégation approche sa valeur maximale S_{max} , différente de l'unité et exprimée de la façon suivante :

$$\lim_{Re \rightarrow \infty} S = S_{max} = \frac{(c_{max} - \tilde{c})(\tilde{c} - c_{min})}{\tilde{c}(1 - \tilde{c})} \quad (4.26)$$

Cette expression (4.26) montre que le taux de ségrégation est nul des deux côtés du *flame brush* quand $\tilde{c} \rightarrow c_{min}$ et $\tilde{c} \rightarrow c_{max}$. La figure 4.4 représente le profil du taux de ségrégation maximal obtenu avec une loi chimie globale et pour différentes valeurs du nombre de Zeldovich β .

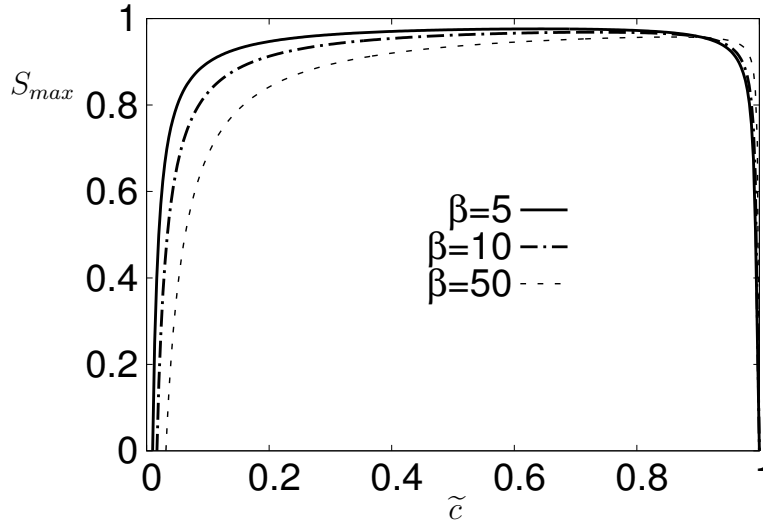


FIGURE 4.4 – Evolution du taux de ségrégation maximal S_{max} à travers le *flame brush* obtenue avec une loi chimie globale et pour différentes valeurs de nombre de Zeldovich.

L'expression (4.26) et la figure 4.4 reproduisent qualitativement l'évolution observée dans les bases de données DNS [69]. De la même manière que pour le modèle BCL (2.25),

le taux de réaction chimique moyen s'écrit :

$$\bar{\omega}_c = \bar{\rho}(S_{max} - S)\tilde{c}(1 - \tilde{c})\frac{I_\omega}{I_1 - I_2} \quad (4.27)$$

avec

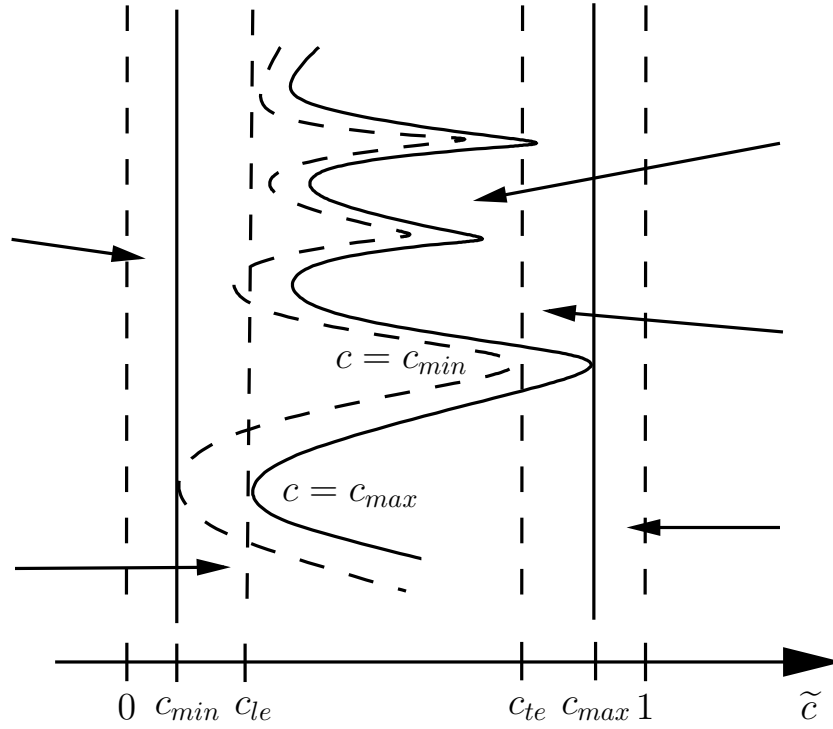
$$I_\omega = \int_{c_{min}}^{c_{max}} \frac{\omega_c(c)}{\rho} \tilde{f}(c) dc \quad (4.28)$$

Néanmoins, la valeur maximale du taux de ségrégation est maintenant S_{max} au lieu de l'unité.

La forme généralisée de la PDF proposée ci-dessus montre l'existence de couches limites associées aux bords des flammes turbulentes où les quantités statistiques varient de manière très importante, voir figure 4.4. Une analyse fine de la structure du *flame brush* et de ces différentes couches est maintenant présentée.

4.3 Structure des flammes turbulentes prémélangées

L'analyse détaillée de la structure du *flame brush* turbulent nécessite de définir plusieurs couches présentées sur le croquis de la figure 4.5. Les deux bords de la flamme turbulente sont donc respectivement définis par l'apparition de la première flammelette et la disparition de la dernière flammelette. Cette description est aussi compatible avec la PDF présumée tenant compte de l'épaisseur finie des flammelettes introduite dans ce chapitre. Le *flame brush* est limité par $c_{min} < \tilde{c} < c_{max}$. Ce sont les mêmes limites que celles utilisées pour définir les flammelettes. Cette hypothèse revient à considérer que la variable d'avancement varie très peu dans le *flame brush* en dehors des zones de flammelettes. La figure 4.5 montre qu'au *leading* et *trailing edges*, la caractéristique bimodale de la PDF n'est plus valable. Il n'y a pas de gaz brûlés au *leading edge* et pas de gaz frais au *trailing edge*. L'objectif de cette description est d'évaluer les épaisseurs des couches limites dans l'espace des compositions, i.e. $\delta_{le} = c_{le} - c_{min}$ et $\delta_{te} = c_{max} - c_{te}$. Enfin, cette description introduit une zone de préchauffage turbulente et une zone de réaction lente qui sont situées en dehors du *flame brush* respectivement pour $\tilde{c} < c_{min}$ et $\tilde{c} > c_{max}$. La description détaillée de ces différentes couches a été présentée dans l'article de Kha et al. [44], voir l'annexe C. Dans ce chapitre, seuls les résultats principaux sont présentés.

FIGURE 4.5 – Description des différentes couches du *flame brush* turbulent.

4.3.1 Zone de préchauffage turbulente

La zone de préchauffage turbulente est en amont du *flame brush*. Dans cette zone, les réactions chimiques sont exponentiellement petites et sont donc négligeables. Ainsi les mécanismes physiques conduisent à un équilibre entre la convection moyenne et le transport turbulent :

$$\rho_u S_T \frac{d\tilde{c}}{dx} = -\frac{d}{dx}(\overline{\rho v'' c''}) \quad (4.29)$$

où le flux turbulent peut être modélisé par une loi gradient : $\overline{\rho v'' c''} = -\bar{\rho} D_t d\tilde{c}/dx$. Les mécanismes physiques impliqués dans cette couche sont similaires à ceux impliqués dans la zone de préchauffage d'une flamme laminaire. Néanmoins, le mélange des espèces est contrôlé ici par les mouvements turbulents et non par la diffusion moléculaire. L'épaisseur de cette couche dans l'espace de composition est $\delta_{pl} = c_{min}$ et ne dépend que du nombre de Karlovitz, voir par exemple (4.4) pour $\beta \rightarrow \infty$.

4.3.2 Zone de réaction lente

En aval du *flame brush*, pour $\tilde{c} > c_{max}$, l'activité chimique devient de plus en plus faible. L'épaisseur de cette couche dans l'espace de composition est $\delta_{rl} = 1 - c_{max}$. Cette zone n'est pas essentielle pour décrire le mécanisme de propagation de la flamme turbulente. En revanche, elle est très importante pour caractériser la formation des espèces polluantes dont les temps caractéristiques chimiques sont grands.

4.3.3 Bords du *flame brush*

Pour évaluer l'épaisseur des couches limites du *flame brush*, c'est à dire le *leading edge* et le *trailing edge*, deux valeurs de la variable d'avancement moyenne c_{le} et c_{te} sont introduites. La valeur c_{le} correspond à l'apparition de la première poche de gaz brûlés et définit donc la fin du *leading edge* et le début de la couche intermittente. La valeur c_{te} correspond à la disparition de la dernière poche de gaz frais et définit donc le début du *trailing edge* et la fin de la couche intermittente, voir la figure 4.5. Pour des raisons de simplicité, on considère que la probabilité d'être dans une flammelette au *leading edge* est identique à la probabilité d'être dans une flammelette au *trailing edge* : $\gamma_{te} = \gamma_{le}$. De plus, pour des raisons géométriques, on considère que la probabilité d'être dans une flammelette sur les bords du *flame brush* est proportionnelle au rapport des petites échelles turbulentes (taille caractéristique des flammelettes) sur les grandes échelles (taille caractéristique des plis de la flamme). La valeur de γ_{le} est donc proportionnelle à $Re_t^{-3/4}$: $\gamma_{le} \sim l_\eta/l_t \sim Re_t^{-3/4}$. L'équation (4.20) appliquée au *leading edge* ($\beta_c = 0, \tilde{c} = c_{le}$) et au *trailing edge* ($\alpha_c = 0, \tilde{c} = c_{te}$) conduit respectivement aux expressions suivantes :

$$c_{le} = (1 - \gamma_{le})c_{min} + \gamma_{le}I_1 \quad (4.30)$$

$$c_{te} = (1 - \gamma_{te})c_{max} + \gamma_{te}I_1 \quad (4.31)$$

Ainsi, les épaisseurs des couches limites peuvent être exprimées dans l'espace de composition de la manière suivante :

$$\delta_{le} = c_{le} - c_{min} = \gamma_{le}(I_1 - c_{min}) \quad (4.32)$$

$$\delta_{te} = c_{max} - c_{te} = \gamma_{te}(c_{max} - I_1) \quad (4.33)$$

Pour des valeurs infiniment grandes du nombre de Zel'dovich, on obtient les expressions analytiques de ces épaisseurs :

$$\delta_{le}^{\beta \rightarrow \infty} = Re_t^{-3/4} (Ka^{1/2}(1 - \exp(-Ka^{-1/2})) - \exp(-Ka^{-1/2})) \quad (4.34)$$

$$\delta_{te}^{\beta \rightarrow \infty} = Re_t^{-3/4} (1 - Ka^{1/2}(1 - \exp(-Ka^{-1/2}))) \quad (4.35)$$

Ces épaisseurs dépendent donc de la valeur du nombre de Karlovitz (via c_{min} , c_{max} et I_1) et du nombre de Reynolds turbulent (via γ_{le} et γ_{te}). La figure 4.6 montre les iso-valeurs de δ_{le} et δ_{te} dans l'espace $(\log Re_t, \log Ka)$. On constate que le nombre de Reynolds a beaucoup plus d'influence que le nombre de Karlovitz sur l'épaisseur de ces couches limites.

4.3.4 Couche intermittente principale

L'épaisseur de la couche intermittente principale peut être déduite des épaisseurs des deux couches limites *leading edge* et *trailing edge*. Dans cette couche, les processus moléculaires impliqués dans les flammes se produisent aux plus petites échelles de l'écoulement turbulent et la probabilité d'être dans une flammelette γ_c est faible comparée aux probabilités d'être dans les états c_{min} et c_{max} , voir Fig. 4.5. Ainsi, les quantités moyennes du second ordre (variance, flux turbulent, etc.) sont proportionnelles à $(c_{max} - \tilde{c})(\tilde{c} - c_{min})$. L'épaisseur δ_{ml} de cette zone s'écrit de la façon suivante :

$$\delta_{ml} = c_{te} - c_{le} = (1 - \gamma_{le})(c_{max} - c_{min}) \quad (4.36)$$

Dans le cas limite $\beta \rightarrow \infty$, on obtient :

$$\delta_{ml}^{\beta \rightarrow \infty} = (1 - Re_t^{-3/4})(1 - \exp(-Ka^{-1/2})) \quad (4.37)$$

Comme pour δ_{le} et δ_{te} , l'épaisseur δ_{ml} (4.36) ne dépend que des nombres de Karlovitz et de Reynolds. Pour de grandes valeurs du nombre de Reynolds, l'épaisseur dans l'espace des compositions δ_{ml} tend vers celle des flammelettes laminaires $\delta_c = c_{max} - c_{min}$ et si les valeurs du nombre de Karlovitz sont très faibles, on retrouve $\delta_c = 1$. Les valeurs limites associées à l'épaisseur de chaque sous couche sont présentées sur le tableau 4.2.

La figure 4.7 représente les iso-valeurs de δ_{ml} tracées dans l'espace $(\log Re_t, \log Ka)$ et en considérant le cas limite des grandes valeurs du nombre de Zeldovich et un mécanisme

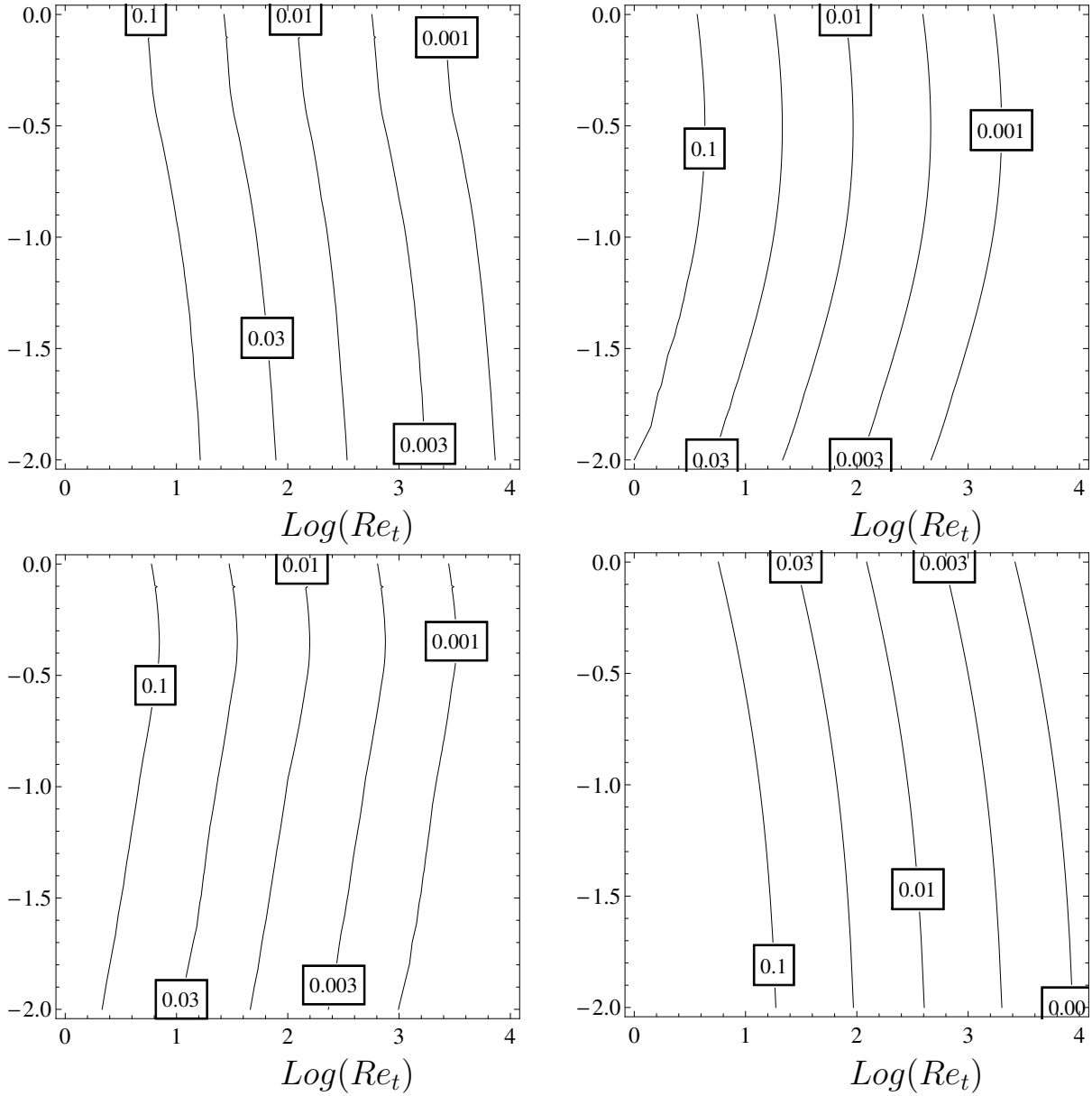


FIGURE 4.6 – Profils des iso-valeurs de δ_{le} (haut) de δ_{te} (bas) tracés en coordonnées logarithmiques associées au nombre de Reynolds (abscisses) et au nombre de Karlovitz (ordonnées). Gauche : description détaillée de la chimie ($\phi = 1.0$). Droite : valeur infinie du nombre de Zel'dovich.

chimique détaillé ($\Phi = 1.0$). On observe que la forme des iso-lignes obtenues tend à être verticale sur la partie gauche (en bas) de la figure où les nombres de Karlovitz et Reynolds sont petits. Cela signifie que le nombre de Karlovitz a peu d'influence sur l'épaisseur caractéristique δ_{ml} dans cette partie. Un comportement inverse est observé sur la partie droite (en haut) de la figure qui correspond aux grandes valeurs du nombre de Reynolds

	$Ka \rightarrow 0$	$Re_t \rightarrow \infty$	$Ka \rightarrow 0$ et $Re_t \rightarrow \infty$
Zone de préchauffage turbulente	0	c_{min}	0
Couche de leading edge	$\gamma_{le}\delta_c^-$	0	0
Couche intermittente principale	$(1 - \gamma_{le})$	δ_c	1
Couche de trailing edge	$\gamma_{le}\delta_c^+$	0	0
Zone réactive faible	0	$1 - c_{max}$	0

TABLE 4.2 – Valeurs limites de l'épaisseur caractéristique dans l'espace des compositions de chaque sous couche du *flame brush*. On utilise les définitions suivantes $\delta_c = c_{max} - c_{min}$, $\delta_c^- = I_1 - c_{min}$, $\delta_c^+ = c_{max} - I_1$, soit : $\delta_c = \delta_c^+ + \delta_c^-$.

et Karlovitz. Les iso-lignes obtenues ici tendent à être horizontales. Cela signifie que le nombre de Reynolds a peu d'influence sur δ_{ml} .

Maintenant que les épaisseurs des différentes couches dans l'espace des compositions sont définies, nous cherchons à déterminer l'évolution des quantités du second ordre : variance, flux turbulent à travers ces différentes couches.

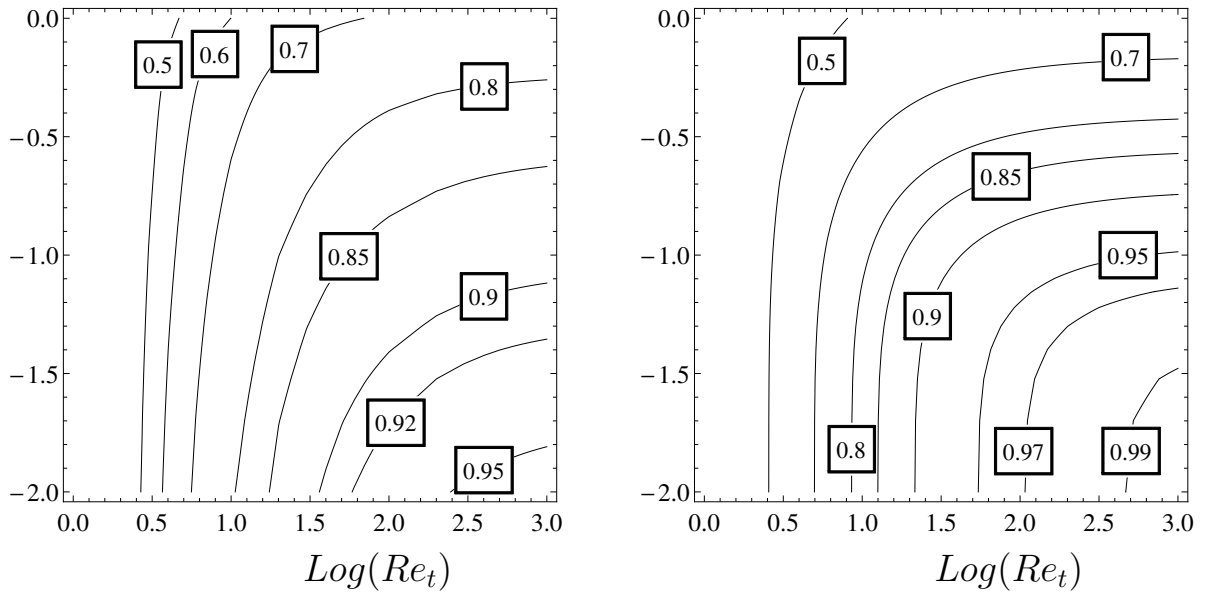


FIGURE 4.7 – Profils des iso-valeurs de δ_{ml} tracés en coordonnées logarithmiques associées au nombre de Reynolds (abscisses) et au nombre de Karlovitz (ordonnées). Gauche : description détaillée de la chimie ($\phi = 1.0$). Droite : valeur infinie du nombre de Zel'dovich.

4.3.5 Raccordement entre le *leading edge* et la couche intermittente

Au *leading edge*, la variable d'avancement moyenne $\tilde{c}$ varie de c_{min} à c_{le} ce qui correspond à l'apparition de la première flammelette jusqu'à l'apparition de la première poche de gaz brûlés. Une variable $\hat{c}$ est introduite pour décrire la composition dans la première flammelette. Ainsi, $\hat{c} = c_{max}$ lorsque $\tilde{c} = c_{le}$.

La variable d'avancement moyenne et la variance peuvent donc être écrites :

$$\tilde{c} = (1 - \gamma_{le})c_{min} + \gamma_{le}\hat{I}_1 \quad (4.38)$$

$$\widetilde{c'^2} = (1 - \gamma_{le})c_{min}^2 + \gamma_{le}\hat{I}_2 - \tilde{c}^2 \quad (4.39)$$

où les deux moments du premier et du second ordre conditionnés dans la structure de flammelette $\hat{I}_1$ et $\hat{I}_2$ sont similaires aux équations (4.22) et (4.23) mais où la variable $\hat{c}$ fournit la limite supérieure de l'intégrale :

$$\hat{I}_1 = \int_{c_{min}}^{\hat{c}} c \tilde{f}(c) dc \quad (4.40)$$

$$\hat{I}_2 = \int_{c_{min}}^{\hat{c}} c^2 \tilde{f}(c) dc \quad (4.41)$$

Lorsque $\hat{c} = c_{max}$ les équations (4.22) et (4.23) sont retrouvées. La condition de normalisation de la PDF interne s'écrit :

$$\int_{c_{min}}^{\hat{c}} \tilde{f}(c) dc = 1 \quad (4.42)$$

Pour procéder à une analyse détaillée du *leading edge*, les variables normalisées suivantes sont introduites :

$$\zeta = \frac{c}{c_{min}}, \quad \hat{\theta}_1 = \frac{\hat{I}_1}{c_{min}}, \quad \hat{\theta}_2 = \frac{\hat{I}_2}{c_{min}^2}, \quad (4.43)$$

On définit aussi la variable normalisée $\hat{\zeta} = \hat{c}/c_{min}$. En substituant les variables normalisées définies par (4.43) dans (4.40) et (4.41), on obtient :

$$\hat{\theta}_1 = \int_1^{\hat{\zeta}} \zeta \tilde{f}(\zeta) d\zeta \quad (4.44)$$

$$\hat{\theta}_2 = \int_1^{\hat{\zeta}} \zeta^2 \tilde{f}(\zeta) d\zeta, \quad (4.45)$$

où $\tilde{f}(\zeta) = \tilde{f}(c)/c_{min}$. Ainsi, à partir des équations (4.44) et (4.45), l'évolution du second moment conditionné dans la flammelette $\hat{\theta}_2(\hat{\theta}_1)$ peut être obtenue.

Dans la limite où $\beta \rightarrow \infty$, les équations (4.44) et (4.45) peuvent être ré-écrites de la manière suivante :

$$\hat{\theta}_1 = C_1^* \int_1^{\hat{\zeta}} d\zeta = C_1^*(\hat{\zeta} - 1), \quad (4.46)$$

$$\hat{\theta}_2 = C_1^* \int_1^{\hat{\zeta}} \zeta d\zeta = \frac{1}{2} C_1^*(\hat{\zeta}^2 - 1), \quad (4.47)$$

avec la condition de normalisation suivante :

$$C_1^* = \left(\int_1^{\hat{\zeta}} \zeta^{-1} d\zeta \right)^{-1} = \ln(\hat{\zeta})^{-1}. \quad (4.48)$$

Alors, les équations (4.46) et (4.47) conduisent à :

$$\hat{\theta}_1 = (\hat{\zeta} - 1) \ln(\hat{\zeta})^{-1} \quad (4.49)$$

$$\hat{\theta}_2 = \frac{1}{2} (\hat{\zeta}^2 - 1) \ln(\hat{\zeta})^{-1}, \quad (4.50)$$

après quelques manipulations algébriques de l'équation (4.49), on obtient :

$$-\frac{\exp(-1/\hat{\theta}_1)}{\hat{\theta}_1} = -\frac{\hat{\zeta}}{\hat{\theta}_1} \exp\left(-\frac{\hat{\zeta}}{\hat{\theta}_1}\right) \quad (4.51)$$

Cette fonction peut être inversée $\hat{\zeta} = f(\hat{\theta}_1)$, en utilisant la seconde branche réelle W_{-1} de la fonction de Lambert [25] :

$$\hat{\zeta} = -\hat{\theta}_1 W_{-1} \left(-\frac{\exp(-1/\hat{\theta}_1)}{\hat{\theta}_1} \right), \quad (4.52)$$

Cette équation (4.52) associée à l'équation (4.50) permet d'obtenir l'expression du moment du second ordre conditionné dans la flammelette en fonction du moment du premier ordre :

$$\hat{\theta}_2 = \frac{\left(\hat{\theta}_1 W_{-1} \left(-\frac{\exp(-1/\hat{\theta}_1)}{\hat{\theta}_1} \right) \right)^2 - 1}{2 \ln \left(-\hat{\theta}_1 W_{-1} \left(-\frac{\exp(-1/\hat{\theta}_1)}{\hat{\theta}_1} \right) \right)} \quad (4.53)$$

La figure 4.8 représente l'évolution du moment du second ordre conditionné dans les flammelettes $\hat{\theta}_2$ dans le *leading edge* pour différentes représentations de la cinétique

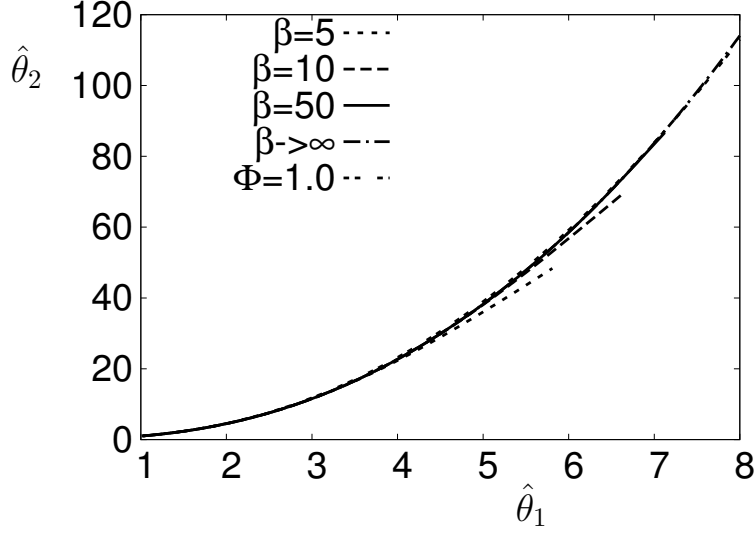


FIGURE 4.8 – Evolution du moment du second ordre conditionné dans la flammelette $\hat{\theta}_2$ en fonction du moment du premier ordre $\hat{\theta}_1$ obtenu en considérant la limite des grandes valeurs du nombre de Zel'dovich, cf. Eq (4.53), la chimie à une étape ou la chimie détaillée ($\Phi = 1.0$).

chimique. Cette expression ne caractérise que l'évolution des moyennes à la traversée de la structure interne des flammelettes. On introduit maintenant les variables internes à la couche limite correspondant au *leading edge* χ et ψ . Ces variables sont reliées à $\hat{\theta}_1$ et $\hat{\theta}_2$ de la manière suivante :

$$\chi = \frac{\hat{\theta}_1 - 1}{\theta_1 - 1}, \quad \psi = \frac{\hat{\theta}_2 - 1}{\theta_2 - 1} \quad (4.54)$$

où θ_1 et θ_2 sont respectivement I_1/c_{min} et I_2/c_{min}^2 . Les variables internes sont reliées au premier et second moments de la variable d'avancement $\tilde{c}$ et $\tilde{c}^2$ par les expressions suivantes :

$$\chi = \frac{\tilde{c} - c_{min}}{c_{le} - c_{min}}, \quad \psi = \frac{\tilde{c}^2 - c_{min}^2}{\tilde{c}_{le}^2 - c_{min}^2} \quad (4.55)$$

Alors, l'évolution de $\psi(\chi)$ à travers le *leading edge* est déduite de l'expression (4.54) :

$$\psi = \frac{1}{\theta_2 - 1} \left(\frac{\left((1 + \chi(\theta_1 - 1)) W_{-1} \left(-\frac{\exp(-1/((1 + \chi(\theta_1 - 1)))}{(1 + \chi(\theta_1 - 1))} \right) \right)^2 - 1}{2 \ln \left(-((1 + \chi(\theta_1 - 1)) W_{-1} \left(-\frac{\exp(-1/((1 + \chi(\theta_1 - 1)))}{(1 + \chi(\theta_1 - 1))} \right) \right)) \right) - 1 \right) \quad (4.56)$$

Dans la limite des flammes infiniment minces, c'est à dire $Ka \rightarrow 0$, cette expression se réduit à $\psi = \chi^2$. Le taux de ségrégation peut donc être évalué à travers le *leading edge* en fonction de la variable d'avancement normalisée χ .

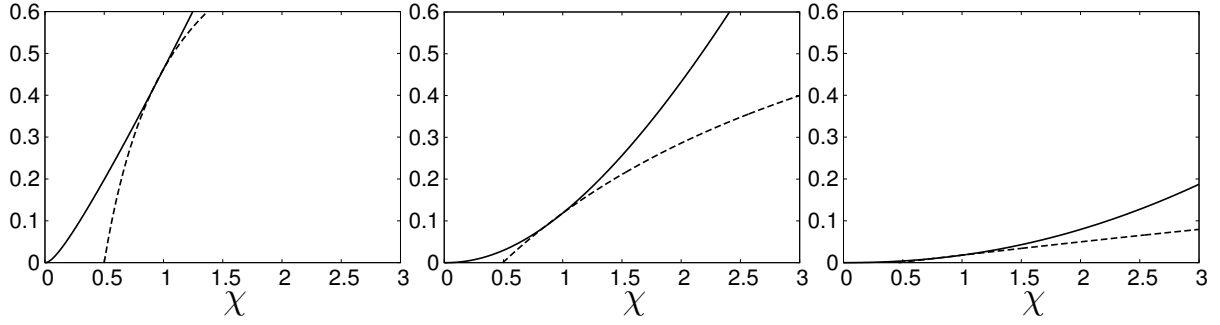


FIGURE 4.9 – Profil du taux de ségrégation obtenu pour des valeurs infiniment grandes du nombre de Zeldovich, $Re_t = 1000$ et différentes valeurs du nombre de Karlovitz ($Ka = 0.01, 0.03, 0.1$ respectivement de la gauche vers la droite). Les lignes continues correspondent à la solution de la structure interne de *leading edge* valable pour $\chi < 1$ et les lignes en pointillés correspondent à la solution de la couche intermittente valable pour $\chi > 1$.

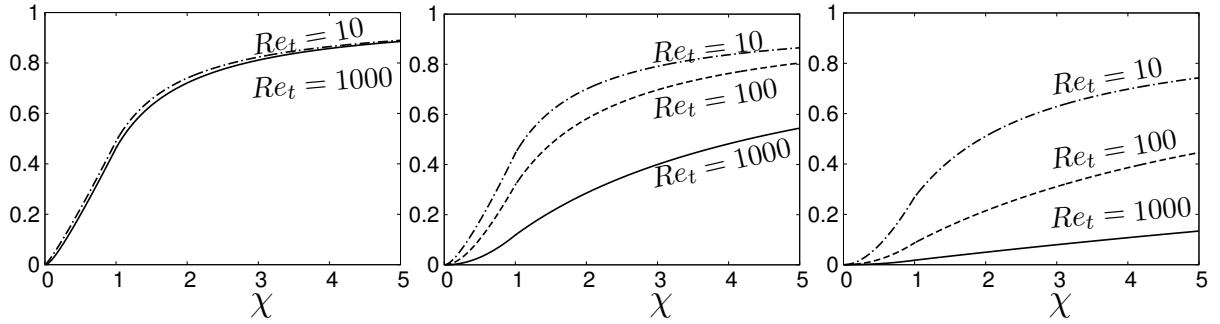


FIGURE 4.10 – Solution complète de l'évolution du taux de ségrégation dans le *leading edge* pour des valeurs infiniment grandes du nombre de Zeldovich et différentes valeurs du nombre de Reynolds et du nombre de Karlovitz ($Ka = 0.01, 0.03, 0.1$ respectivement de la gauche vers la droite).

Dans la couche intermittente principale, le taux de ségrégation peut être déduit par les équations (4.20) et (4.21). La probabilité γ_c , près du *leading edge*, est considérée constante $\gamma_c = \gamma_{le}$ et ne dépend que du nombre de Reynolds. Cette hypothèse est appliquée aux équations (4.20) et (4.21) et permet d'exprimer l'évolution du taux de ségrégation en fonction de Re_t , Ka et $\tilde{c}$. De plus, elle assure une parfaite continuité entre les solutions du taux de ségrégation obtenues dans la structure interne du *leading edge* et le début de la couche intermittente. Le raccordement a lieu en $\chi = 1$. L'évolution du taux de ségrégation est tracée sur la figure 4.9 depuis le début du *leading edge* ($\chi = 0$) jusqu'à la

couche intermittente principale ($\chi \rightarrow \infty$) pour $Ka = 0.01, 0.03, 0.1$ respectivement de la gauche vers la droite. On observe bien que ce taux augmente lentement et sa forme est plus courbée pour les grandes valeurs de Ka .

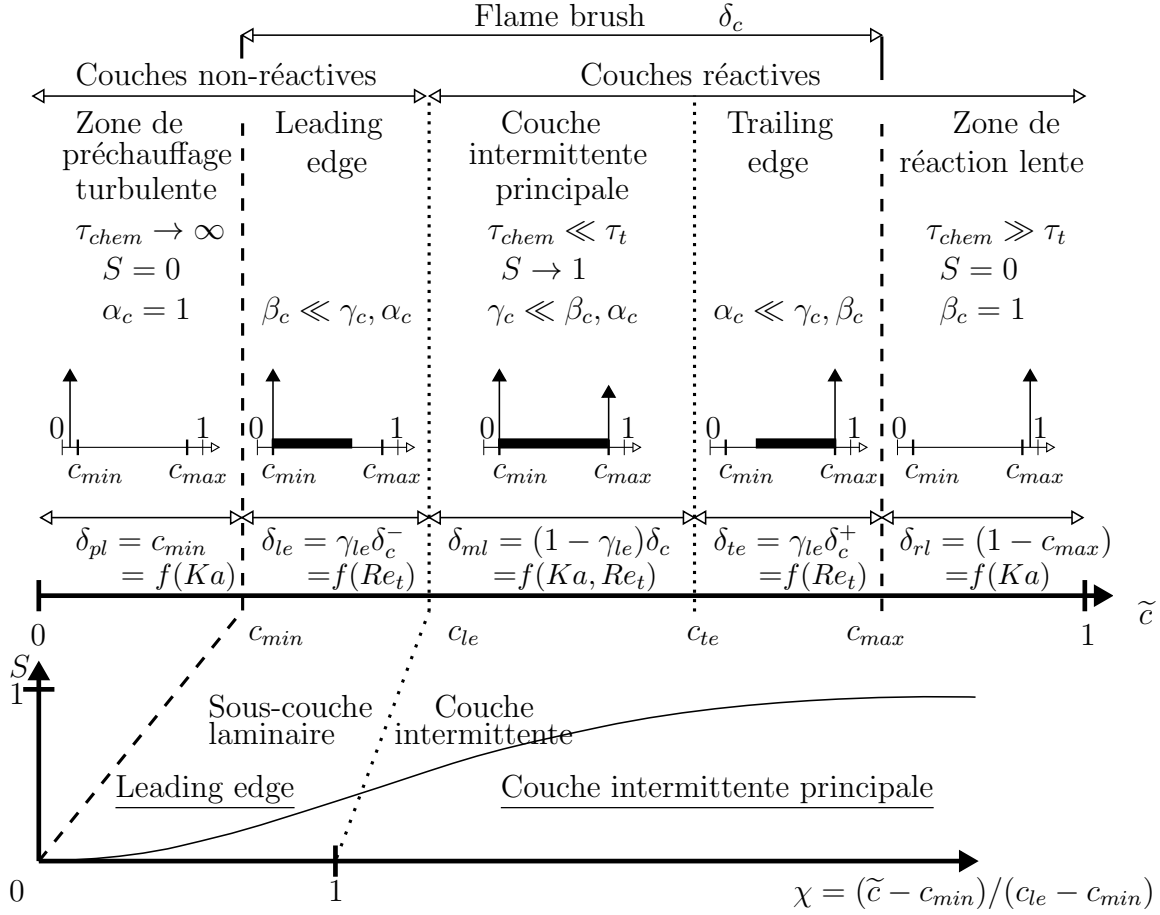


FIGURE 4.11 – Vue synthétique de la structure de flamme turbulente prémélangée, comportant chaque sous-couche du *flame brush* avec son épaisseur caractéristique.

Les solutions complètes du taux de ségrégation au *leading edge* sont tracées sur la figure 4.10 pour différentes valeurs du nombre de Reynolds. L'augmentation du taux de ségrégation observée sur la figure 4.10 est plus faible pour les valeurs plus grandes du nombre de Reynolds car l'épaisseur du *leading edge* est plus mince pour les valeurs plus grandes de Re_t . En revanche, pour les petites valeurs du nombre de Karlovitz, les profils du taux de ségrégation sont quasiment les mêmes quelle que soit la valeur du nombre de Reynolds.

La description proposée dans ce chapitre est synthétisée sur la figure 4.11. Nous pouvons conclure que le nombre de Reynolds contrôle l'épaisseur du *leading edge* alors que le

nombre de Karlovitz contrôle la structure interne des flammelettes, ainsi que la forme de l'évolution du moment du second ordre dans la couche limite.

4.4 Description des flux turbulents

L'objectif de cette second section est d'étendre l'analyse du paragraphe précédent pour décrire l'évolution des flux turbulents scalaires dans la couche limite. Là encore, les bases de données DNS [69, 80] montrent qu'il y a une variation brutale de la valeur du flux turbulent scalaire pour de très faibles valeurs de l'avancement moyen. Il a également été démontré [16, 95] que ce flux turbulent change de signe dans cette zone et passe d'un comportement classique, qui représente un mécanisme de mélange turbulent, à un comportement ségrégatif, qui représente l'éloignement des poches de gaz frais et de celles de gaz brûlés dû à l'expansion thermique. L'objectif de ce paragraphe est donc d'essayer de représenter cette évolution complexe des flux turbulents au *leading edge* grâce à la description simple de la structure d'une flamme turbulente et du concept de flammelette d'épaisseur finie introduit dans ce chapitre.

Toutefois, la considération du flux turbulent scalaire nécessite d'introduire différentes valeurs moyennes de la vitesse conditionnées dans les gaz frais, les gaz brûlés et au niveau de l'interface [55]. Leurs évolutions à travers le *flamme brush* complet sont complexes compte tenu de l'accélération forte due à l'expansion thermique. Comme notre objectif est de décrire simplement les processus physiques au niveau du *leading edge* en utilisant la variable interne à la couche limite χ , plusieurs hypothèses fortes valables seulement au niveau du *leading edge* vont être introduites. Le point de départ de l'analyse est le croquis présenté sur la Figure 4.5 sur lequel sont ajoutés les différentes manières de conditionner le calcul de vitesses moyennes, voir figure 4.12. D'un point de vue mathématique, le point de départ est la forme présumée de la PDF introduite précédemment, voir l'Eq (4.19), qui est maintenant réutilisée pour décrire la forme de la PDF jointe vitesse-scalaire $\tilde{P}(v, c)$ ¹

$$\tilde{P}(v, c) = \alpha_c \delta(c - c_{min}) P(v|c = c_{min}) + \beta_c \delta(c_{max} - c) P(v|c = c_{max}) + \gamma_c \tilde{f}(v, c) \quad (4.57)$$

1. Pour simplifier les notations, nous ne considérons ici qu'une seule composante de vitesse v . Toutes les discussions présentées ici sont généralisables au vecteur vitesse $\mathbf{v}$.

où $P(v|c)$ est la PDF de la vitesse conditionnée en une valeur particulière de la variable d'avancement et $\tilde{f}(v, c)$ est la PDF jointe vitesse-scalaire interne à la flammelette. Ainsi, la vitesse moyenne s'écrit :

$$\tilde{v} = \alpha_c \bar{v}_u + \beta_c \bar{v}_b + \gamma_c I_f^v, \quad (4.58)$$

où la vitesse conditionnée dans les gaz frais $\bar{v}_u$ et celle dans les gaz brûlés $\bar{v}_b$ sont définies par :

$$\bar{v}_u = \int_{-\infty}^{+\infty} v \tilde{P}(v|c = c_{min}) dv \quad (4.59)$$

$$\bar{v}_b = \int_{-\infty}^{+\infty} v \tilde{P}(v|c = c_{max}) dv, \quad (4.60)$$

La vitesse moyenne conditionnée à l'intérieur de la structure de flammelette est :

$$I_f^v = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{c_{min}}^{c_{max}} v \tilde{f}(v, c) dv dc. \quad (4.61)$$

Chacun des domaines physiques sur lesquels les processus de moyenne sont appliqués pour ces vitesses $\bar{v}_u$, $\bar{v}_b$ et I_f^v sont représentés sur la figure 4.12 pour une valeur particulière de l'avancement moyen. Les gaz frais et les gaz brûlés représentés sur cette figure correspondent respectivement aux états $c = c_{min}$ et $c = c_{max}$ qui, en tenant compte de la PDF $\tilde{P}(c)$ introduite précédemment, voir l'Eq (4.19), sont associés à un certain volume dans l'écoulement turbulent. Cette hypothèse consiste à considérer la distribution d'avancement dans ces zones comme étant représentée par une distribution de Dirac. Cette hypothèse est justifiée car la variable d'avancement dans ce volume ne varie quasiment pas. Ainsi, nous rappelons que la variable d'avancement moyenne s'exprime sous la forme $\tilde{c} = \alpha_c c_{min} + \beta_c c_{max} + \gamma_c I_1$ où $I_1 = \int_{c_{min}}^{c_{max}} c \tilde{f}(c) dc$ est la moyenne de l'avancement conditionnée dans la flammelette. Toutefois, il est important de noter que les états $c = c_{min}$ et $c = c_{max}$ correspondent strictement, non pas à un volume dans l'écoulement, mais plutôt à des isosurfaces définissant les limites spatiales des structures de flammelettes, voir Figure 4.12. La définition de ces limites spatiales qui n'étaient pas nécessaires à l'analyse des statistiques scalaires présentées dans le paragraphe précédent, est essentielle pour l'analyse des statistiques jointes vitesse-scalaire. En effet, les deux distributions de vitesse conditionnées dans les états $c = c_{min}$ et $c = c_{max}$, contrairement aux distributions scalaires, ne peuvent pas être représentées par des distributions de Dirac. Ainsi, il devient nécessaire

d'introduire les vitesses moyennes conditionnées sur les isosurfaces définies par $c = c_{min}^+$ et $c = c_{max}^-$:

$$\bar{v}_{su} = \int_{-\infty}^{+\infty} v \tilde{P}(v|c = c_{min}^+) dv \quad (4.62)$$

$$\bar{v}_{sb} = \int_{-\infty}^{+\infty} v \tilde{P}(v|c = c_{max}^-) dv, \quad (4.63)$$

Ces vitesses moyennes conditionnées sur les surfaces ont déjà été étudiées, voir Im et al. [40], Chakraborty et Lipatnikov [21] et sont schématisées sur la figure 4.12. De plus, comme les états correspondants $c = c_{min}^+$ et $c = c_{max}^-$ sont situés dans les flammelettes, ces vitesses moyennes conditionnées sur les surfaces peuvent aussi s'écrire :

$$\bar{v}_{su} = \int_{-\infty}^{+\infty} v \tilde{f}(v|c = c_{min}^+) dv \quad (4.64)$$

$$\bar{v}_{sb} = \int_{-\infty}^{+\infty} v \tilde{f}(v|c = c_{max}^-) dv, \quad (4.65)$$

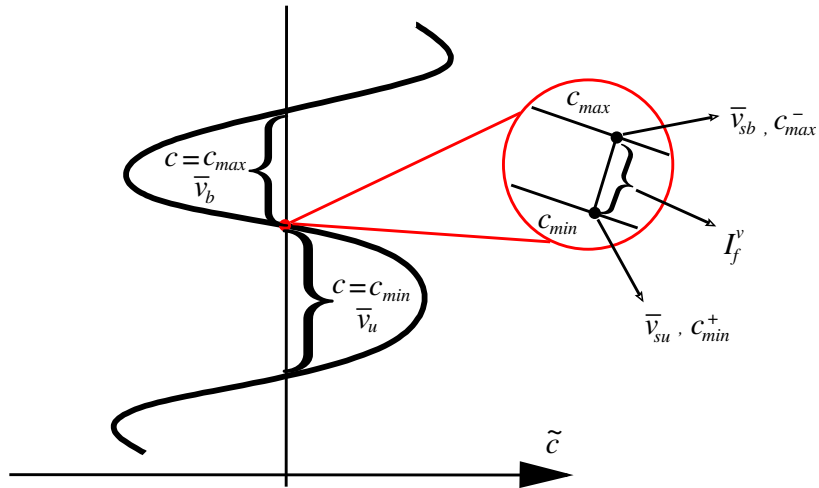


FIGURE 4.12 – Illustration des vitesses conditionnées pour une valeur particulière de l'avancement moyen

Maintenant que les différentes manières de conditionner les statistiques de vitesse sont introduites, nous pouvons étudier plus en détail les statistiques conditionnées dans la structure interne des flammelettes.

4.4.1 Vitesses moyennes conditionnées dans les flammelettes

L'hypothèse de flammelette non étirée, non courbée et non perturbée par les mouvements turbulents, utilisée dans ce travail conduit également à considérer que l'évolution de la vitesse à l'intérieur de la structure de flammelette locale est donnée par :

$$\frac{dv}{dc} = \tau S_L, \quad (4.66)$$

et n'est pas perturbée par l'écoulement. Ainsi, l'intégration de cette équation conduit à :

$$v = v^* + \tau S_L c \quad (4.67)$$

où, la constante d'intégration v^* ne dépend que de la position de la flammelette dans l'écoulement (en particulier v^* ne dépend pas de c) et peut être déterminée si une condition de vitesse à la limite de la flammelette est connue. Par exemple, pour la limite inférieure $c = c_{min}^+$, on en déduit que :

$$v^* = v|_{c=c_{min}^+} - \tau S_L c_{min}^+. \quad (4.68)$$

Néanmoins, d'un point de vue statistique, $v|_{c=c_{min}^+}$ est une quantité variable et donc v^* l'est aussi. L'équation (4.67) permet de changer de variable dans l'équation (4.61) :

$$I_f^v = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{c_{min}^+}^{c_{max}^-} (v^* + \tau S_L c) \tilde{f}(v^*, c) dv^* dc. \quad (4.69)$$

Comme v^* et c sont, par définition (cf. Eqs. (4.66) et (4.67)), deux variables statistiquement indépendantes, la PDF jointe s'écrit :

$$\tilde{f}(v^*, c) = \tilde{f}(v^*) \tilde{f}(c). \quad (4.70)$$

Ainsi, la vitesse moyenne conditionnée dans les flammelettes devient :

$$I_f^v = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} v^* \tilde{f}(v^*) dv^* \right) + \left(\int_{c_{min}^+}^{c_{max}^-} (\tau S_L c) \tilde{f}(c) dc \right) = I_f^{v^*} + \tau S_L I_1, \quad (4.71)$$

où $I_f^{v^*}$ est la valeur moyenne de v^* conditionnée dans les flammelettes et I_1 la valeur moyenne de l'avancement conditionnée dans les flammelettes qui a déjà été utilisée dans les paragraphes précédents. Si la quantité v^* est définie par l'équation (4.68) alors $\tilde{f}(v^*) = \tilde{f}(v|c = c_{min}^+)$ et un nouveau changement de variable conduit à :

$$I_f^{v^*} = \int_{-\infty}^{+\infty} v^* \tilde{f}(v^*) dv^* = \int_{-\infty}^{+\infty} v \tilde{f}(v|c = c_{min}^+) dv - \tau S_L c_{min}^+ = \bar{v}_{su} - \tau S_L c_{min}^+ \quad (4.72)$$

Finalement, la vitesse moyenne conditionnée dans les flammelettes I_f^v est reliée à la vitesse moyenne $\bar{v}_{su}$ qui est conditionnée sur l'iso-surface $c = c_{min}^+$ de la manière suivante :

$$I_f^v = \bar{v}_{su} + \tau S_L (I_1 - c_{min}^+). \quad (4.73)$$

Notons que v^* peut très bien être défini sur une autre iso-surface, par exemple $c = c_{max}^-$.

Dans ce cas on obtient :

$$I_f^v = \bar{v}_{sb} + \tau S_L (I_1 - c_{max}^-). \quad (4.74)$$

Ce résultat est parfaitement cohérent avec la structure des flammelettes considérée ici de telle sorte que l'écart de vitesse de part et d'autre d'une flammelette est directement relié à ces limites dans l'espace des compositions :

$$\bar{v}_{sb} - \bar{v}_{su} = \tau S_L (c_{max}^- - c_{min}^+). \quad (4.75)$$

Dans le cas limite des valeurs infiniment grandes du nombre de Zel'dovich, on obtient la forme analytique de cet écart :

$$\bar{v}_{sb} - \bar{v}_{su} = \tau S_L (1 - \exp(-Ka^{-1/2})). \quad (4.76)$$

4.4.2 Flux turbulent scalaire dans la couche intermittente

Dans la couche intermittente, telle qu'elle est définie au paragraphe précédent ($\chi \rightarrow \infty$) et lorsque la quasi bimodalité de la PDF est atteinte ($Re \rightarrow \infty$) de telle sorte que $\gamma_c \ll \alpha_c, \beta_c$, alors le flux scalaire s'écrit :

$$\lim_{Re \rightarrow \infty} \widetilde{v''c''} = \frac{1}{c_{max} - c_{min}} (\bar{v}_b - \bar{v}_u) (\tilde{c} - c_{min}) (c_{max} - \tilde{c}) + \mathcal{O}(\gamma_c) \quad (4.77)$$

De la même manière que pour le taux de ségrégation S , qui n'est rien d'autre que la variance normalisée par sa valeur atteinte lorsque la PDF est parfaitement bimodale, le flux turbulent scalaire normalisé peut être introduit :

$$f_c = \frac{\widetilde{v''c''}}{(\bar{v}_b - \bar{v}_u) \tilde{c} (1 - \tilde{c})} \quad (4.78)$$

Ainsi, le flux normalisé pour $Re \rightarrow \infty$ est relié à la valeur maximale du taux de ségrégation par :

$$\lim_{Re \rightarrow \infty} f_c = f_c^{max} = \frac{S_{max}}{c_{max} - c_{min}} \quad (4.79)$$

Le facteur f_c^{max} se comporte donc comme S_{max} , voir Figure 4.4, et met ainsi en évidence la variation très importante du comportement du flux sur les bords de la flamme turbulente et la nécessité d'étudier plus en détails son comportement par l'introduction de la variable interne à la couche limite χ .

De plus, la différence de vitesse moyenne conditionnée $(\bar{v}_b - \bar{v}_u)$ est susceptible de changer de signe au sein de la flamme turbulente sous l'effet de l'expansion thermique. Le flux $\overline{\rho v'' c''} = \bar{\rho} f_c (\bar{v}_b - \bar{v}_u) \tilde{c} (1 - \tilde{c})$, aura donc un effet pouvant être un effet de mélange si $(\bar{v}_b - \bar{v}_u)$ est négatif ou bien un effet ségrégatif si cet écart est positif. Toutefois, l'écart de vitesse moyenne conditionnée n'est défini que dans la couche intermittente alors que notre objectif est de décrire l'évolution des flux depuis le bord des gaz frais. Nous allons donc nous placer dans un premier temps au tout début de cette couche intermittente lorsque la première poche de gaz brûlés est apparu dans l'écoulement. Dans ce cas, comme la quantité de gaz brûlés est faible, la vitesse conditionnée sur l'isosurface $c = c_{max}^-$ tend vers la valeur de vitesse conditionnée dans les gaz brûlés :

$$\bar{v}_b \rightarrow \bar{v}_{sb} \quad (4.80)$$

En introduisant l'équation (4.75), l'écart de vitesse moyenne conditionnée peut donc s'écrire à cet endroit ($\chi = 1$) :

$$(\bar{v}_b - \bar{v}_u) = \bar{v}_{sb} - \bar{v}_u = \bar{v}_{su} - \bar{v}_u + \tau S_L (c_{max}^- - c_{min}^+) \quad (4.81)$$

L'écart de la vitesse conditionnée dans les gaz frais avec la vitesse conditionnée sur l'isosurface $c = c_{min}^+$ est maintenant considéré constante : $(\bar{v}_{su} - \bar{v}_u) \sim cte$. Cette hypothèse est parfaitement justifiée tant que l'analyse ne concerne que la couche limite des gaz frais, c'est à dire pour de très faibles valeurs de la moyenne de l'avancement $\tilde{c} \rightarrow 0$. En effet, cette hypothèse, comme celle conduisant à l'équation 4.80, néglige les effets non locaux des variations de masse volumique. Lorsque ces effets sont pris en compte l'accélération indirecte due à l'expansion thermique [80], c'est à dire l'accélération dans les zones de l'écoulement où il n'y a pas de variations de masse volumique modifie les vitesses conditionnées dans les gaz frais et les gaz brûlés.

De plus, nous pouvons dire que la vitesse conditionnée sur l'iso-surface $c = c_{min}^+$ est forcément inférieure à la vitesse moyenne conditionnée dans les gaz frais : $(\bar{v}_{su} < \bar{v}_u)$. En

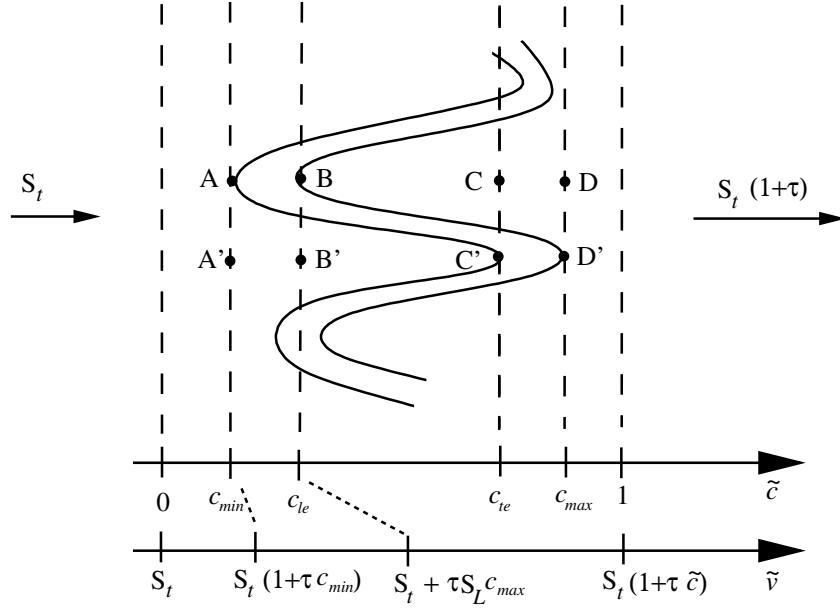


FIGURE 4.13 – Vue simplifiée de la flamme turbulente prémélangée

effet, comme on peut le voir sur la figure 4.13, si la première flammelette est localisée au point A, c'est forcément que la turbulence a conduit à une vitesse devant cette flamme suffisamment faible pour qu'elle puisse *s'engouffrer* dans l'écoulement jusqu'à ce bord des gaz frais. A l'inverse, la turbulence conduit forcément à une vitesse plus forte en A' de telle sorte que les flammelettes sont repoussées plus loin dans l'écoulement (jusqu'au point C' sur ce dessin). Ainsi, pour de faibles valeurs de l'avancement, la vitesse la plus faible, celle obtenue au point A, correspond à la vitesse devant la première flamme, c'est à dire à $\bar{v}_{su}$ alors que la vitesse la plus forte, celle obtenue au point A', correspond à la vitesse dans les gaz frais $\bar{v}_u$. Cette représentation est évidemment très simplifiée mais permet de mettre en évidence que l'écart ($\bar{v}_{su} - \bar{v}_u$) est relié aux caractéristiques de la turbulence. Pour des raisons de simplicité, nous allons considérer dans la suite que cette relation est donnée par :

$$\lim_{\tilde{c} \rightarrow 0} (\bar{v}_{su} - \bar{v}_u) \sim -v' \quad (4.82)$$

où v' est la vitesse caractéristique de la turbulence. Ainsi, l'écart de vitesse moyenne conditionnée au début de la couche intermittente est évalué par :

$$(\bar{v}_b - \bar{v}_u) \sim -v' + \tau S_L (c_{max}^- - c_{min}^+) \quad (4.83)$$

En faisant intervenir le Nombre de Bray $N_B = \tau S_L / v'$ dans cette relation, on obtient :

$$(\bar{v}_b - \bar{v}_u) \sim \tau S_L \left((c_{max}^- - c_{min}^+) - \frac{1}{N_B} \right) \quad (4.84)$$

Cette expression permet d'évaluer très rapidement, en fonction des propriétés des flammelettes et de la turbulence, le signe de l'écart de vitesse $(\bar{v}_b - \bar{v}_u)$ et donc le signe du flux turbulent au début de la couche intermittente. Ainsi, on constate que pour des valeurs du nombre de Bray supérieur à $1 / (c_{max}^- - c_{min}^+)$, le flux turbulent sera positif dès le début de la couche intermittente et donc le flux représentera un effet ségrégatif. Cette possibilité de flux de type ségrégatif (diffusion à contre-gradient) dès le début de la flamme turbulente a déjà été discutée par Corvellec, Bruel et Sabelnikov [27] et par Sabelnikov et Bruel [85]. Ce cas de figure signifie aussi que le flux turbulent a nécessairement changé de signe dans la couche limite correspondant au bord des gaz frais. Nous devons donc maintenant étudier de manière plus précise l'évolution du flux à l'intérieur de la couche limite correspondant au bord des gaz frais.

4.4.3 Flux turbulent scalaire dans la couche limite

L'expression du flux de l'équation 4.77 obtenue pour $\gamma_c \ll \alpha_c, \beta_c$ n'est valable que dans la couche intermittente pour $\chi \rightarrow \infty$. Pour étudier plus précisément la couche limite du bord des gaz frais, il est nécessaire de considérer le *leading edge* qui correspond au passage de la première flammelette ($0 < \chi < 1$) où $\beta_c \ll \alpha_c, \gamma_c$ puis le début de la couche intermittente ($1 < \chi < \infty$) où ni γ_c ni β_c ne peuvent être négligés.

Evolution au sein du *leading edge* : $0 < \chi < 1$

La probabilité de trouver des gaz brûlés est négligée ($\beta_c \ll \alpha_c, \gamma_c$) et la probabilité d'être à l'intérieur des flammelettes est supposée constante $\gamma_c \sim \gamma_{le}$. La vitesse moyenne s'écrit alors :

$$\tilde{v} = (1 - \gamma_{le})\bar{v}_u + \gamma_{le}\hat{I}_f^v \quad (4.85)$$

où l'opérateur $\hat{\cdot}$ signifie que la borne supérieure de l'intégrale suivant l'espace des compositions est $\hat{c}$:

$$\hat{I}_f^v = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{c_{min}}^{\hat{c}} v \tilde{f}(v, c) dv dc. \quad (4.86)$$

Rappelons que la variable d'avancement moyenne s'écrit toujours $\tilde{c} = (1 - \gamma_{le})c_{min} + \gamma_{le}\hat{I}_1$. En utilisant le même changement de variable que celui qui a conduit à l'équation (4.71), la vitesse conditionnée dans la flammelette s'écrit :

$$\hat{I}_f^v = I_f^{v*} + \tau S_L \hat{I}_1, \quad (4.87)$$

De la même manière, la corrélation vitesse-scalaire conditionnée dans la flammelette s'écrit :

$$\begin{aligned} \hat{I}_f^{vc} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{c_{min}}^{\hat{c}} v c \tilde{f}(v, c) dv dc \\ &= I_f^{v*} \hat{I}_1 + \tau S_L \hat{I}_2 \end{aligned} \quad (4.88)$$

$$= \hat{I}_f^v \hat{I}_1 + \tau S_L (\hat{I}_2 - \hat{I}_1^2), \quad (4.89)$$

et la corrélation vitesse-scalaire s'exprime comme :

$$\begin{aligned} \widetilde{vc} &= (1 - \gamma_{le})\bar{v}_u c_{min} + \gamma_{le} \hat{I}_f^{vc} \\ &= (1 - \gamma_{le})\bar{v}_u c_{min} + \gamma_{le} \hat{I}_f^v \hat{I}_1 + \gamma_{le} \tau S_L (\hat{I}_2 - \hat{I}_1^2) \end{aligned} \quad (4.90)$$

Finalement, le flux turbulent scalaire peut quant à lui s'exprimer (cf. annexe B) par :

$$\begin{aligned} \widetilde{v''c''} &= \widetilde{vc} - \tilde{v}\tilde{c} = (1 - \gamma_{le})\bar{v}_u c_{min} - (1 - \gamma_{le})^2 \bar{v}_u c_{min} + \gamma_{le} \hat{I}_f^{vc} - \gamma_{le}^2 \hat{I}_f^v \hat{I}_1 \\ &\quad - \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})\bar{v}_u \hat{I}_f^v - \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})\hat{I}_f^v c_{min} \\ &= \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})(\bar{v}_{su} - \bar{v}_u)(\hat{I}_1 - c_{min}) + \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})\tau S_L (\hat{I}_1 - c_{min})^2 \\ &\quad + \gamma_{le} \tau S_L (\hat{I}_2 - \hat{I}_1^2) \end{aligned} \quad (4.91)$$

De plus, la variance (4.39) peut être ré-écrite de la façon suivante (cf. annexe B) :

$$\begin{aligned} \widetilde{c'^2} &= (1 - \gamma_{le})c_{min}^2 + \gamma_{le}\hat{I}_2 - \tilde{c}^2 \\ &= \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})(\hat{I}_1 - c_{min})^2 + \gamma_{le}(\hat{I}_2 - \hat{I}_1^2) \end{aligned} \quad (4.92)$$

Le flux scalaire s'écrit alors simplement :

$$\widetilde{v''c''} = \tau S_L \left[-\gamma_{le}(1 - \gamma_{le})(\hat{I}_1 - c_{min})1/N_B + \widetilde{c'^2} \right] \quad (4.93)$$

On constate que ce flux adimensionné par $\tau S_L \tilde{c}(1 - \tilde{c})$ peut être relié au taux de ségrégation S de la manière suivante :

$$F_c = \frac{\widetilde{v''c''}}{\tau S_L \tilde{c}(1 - \tilde{c})} = -\frac{\gamma_{le}(1 - \gamma_{le})}{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}(\hat{I}_1 - c_{min})\frac{1}{N_B} + S \quad (4.94)$$

Finalement, cette expression (4.94) permet d'exprimer le profil du flux adimensionné $F(\tilde{c})$ uniquement en fonction des nombres sans dimension N_B , Ka et Re_t . Rappelons que les quantités c_{min} , c_{max} ainsi que les moments conditionnés I_1 , I_2 , $\hat{I}_1$, $\hat{I}_2$ sont calculés à partir de la valeur de Ka (cf. Eqs. (4.4), (4.22), (4.23), (4.40), (4.41)) et de la probabilité γ_{le} reliée à la valeur de Re_t ($\gamma_{le} \sim Re_t^{-3/4}$). La figure 4.14 représente le profil du flux adimensionné F tracé dans le *leading edge* pour des valeurs infiniment grandes du nombre de Zeldovich et différentes valeurs de N_B : $N_B = 1.5$, $N_B = N_B^*$ et $N_B = 4$. N_B^* désigne la valeur de N_B pour laquelle le flux change de signe lorsque $\chi = 1$.

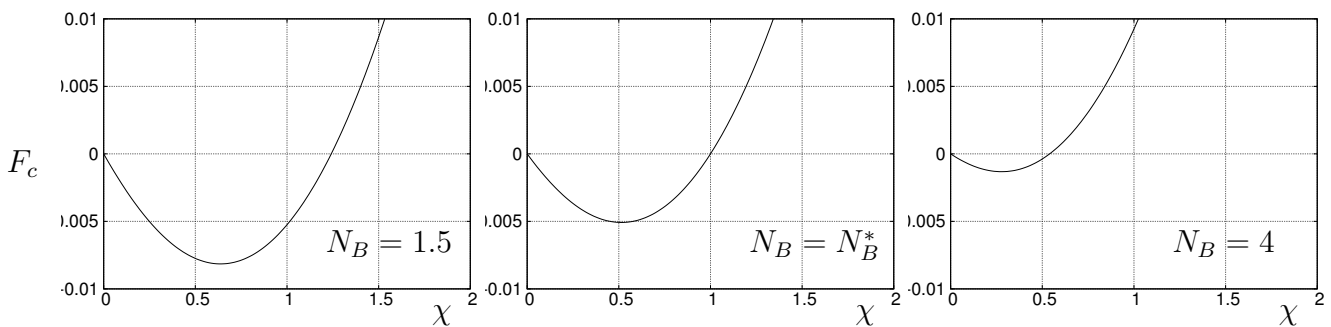


FIGURE 4.14 – Flux turbulent adimensionné F_c au *leading edge* (4.94) dans la limite $\beta \rightarrow \infty$ et pour différentes valeurs de N_B .

Evolution au sein de la couche intermittente : $1 < \chi < \infty$

La probabilité d'être à l'intérieur des flammelettes est elle-aussi supposée constante $\gamma_c = \gamma_{le}$ dans la couche intermittente juste après le *leading edge*. L'équation (4.88) permet d'exprimer, dans cette couche, la corrélation vitesse-scalaire conditionnée dans les flammelettes :

$$I_f^{vc} = I_f^v I_1 + \tau S_L (I_2 - I_1^2) \quad (4.95)$$

où I_f^v et I_1 et I_2 sont fournis par les équation (4.22) et (4.23).

Le flux scalaire peut alors s'exprimer de la manière suivante (cf. annexe B) :

$$\begin{aligned} \widetilde{v''c''} &= \widetilde{vc} - \widetilde{v}\widetilde{c} = \alpha_c \bar{v}_u c_{min} + \beta_c \bar{v}_b c_{max} + \gamma_c I_f^{vc} - (\alpha_c \bar{v}_u + \beta_c \bar{v}_b + \gamma_c I_f^v) \widetilde{c} \\ &= \tau S_L [\alpha_c (\widetilde{c} - c_{min}) (-1/N_B + I_1 - c_{min}) + \beta_c (c_{max} - \widetilde{c}) (c_{max} - I_1) + \gamma_c (I_2 - I_1^2)] \end{aligned} \quad (4.96)$$

De plus, les deux facteurs $(\tilde{c} - c_{min})$ et $(c_{max} - \tilde{c})$ s'écrivent :

$$\begin{aligned}\tilde{c} - c_{min} &= c_{min}(\alpha_c - 1) + \beta_c c_{max} + \gamma_c I_1 \\ &= -\beta_c c_{min} - \gamma_c c_{min} + \beta_c c_{max} + \gamma_c I_1 \\ &= \beta_c (c_{max} - c_{min}) + \gamma_c (I_1 - c_{min}),\end{aligned}\tag{4.97}$$

$$\begin{aligned}c_{max} - \tilde{c} &= -\alpha_c c_{min} + c_{max}(1 - \beta_c) - \gamma_c I_1 \\ &= -\alpha_c c_{min} + \alpha_c c_{max} + \gamma_c c_{max} - \gamma_c I_1 \\ &= \alpha_c (c_{max} - c_{min}) + \gamma_c (c_{max} - I_1),\end{aligned}\tag{4.98}$$

Là encore, la variance (4.21) peut être ré-écrite de la façon suivante (cf. annexe B) :

$$\begin{aligned}\widetilde{c'^2} &= \alpha_c c_{min}^2 + \beta_c c_{max}^2 + \gamma_c I_2 - \tilde{c}^2 \\ &= \alpha_c \beta_c (c_{max} - c_{min})^2 + \alpha_c \gamma_c (I_1 - c_{min})^2 + \beta_c \gamma_c (c_{max} - I_1)^2 + \gamma_c (I_2 - I_1^2)\end{aligned}\tag{4.99}$$

En combinant (4.97), (4.98) et (4.99) à l'expression (4.96), le flux turbulent scalaire s'écrit :

$$\widetilde{v''c''} = \tau S_L \left[-\alpha_c (\tilde{c} - c_{min}) 1/N_B + \widetilde{c'^2} \right]\tag{4.100}$$

où α_c peut s'exprimer de la façon suivante :

$$\alpha_c = \frac{c_{max} - \tilde{c}}{c_{max} - c_{min}} - \gamma_c \frac{c_{max} - I_1}{c_{max} - c_{min}}\tag{4.101}$$

Le flux adimensionné s'écrit alors :

$$F_c = \frac{\widetilde{v''c''}}{\tau S_L \tilde{c}(1 - \tilde{c})} = - \left[f_c^{max} - \frac{\gamma_c}{\tilde{c}(1 - \tilde{c})} \frac{(c_{max} - I_1)(\tilde{c} - c_{min})}{c_{max} - c_{min}} \right] \frac{1}{N_B} + S\tag{4.102}$$

Le flux adimensionné est relié aussi au taux de ségrégation. Lorsque la limite quasi-bimodale de la PDF est considérée ($Re \rightarrow \infty$), γ_c est négligeable, alors l'expression (4.102) restitue l'expression (4.77). L'évolution du flux adimensionné dès le début de la couche intermittente est tracée sur la figure 4.15 pour différentes valeurs de N_B .

La figure 4.16 combine les profils du flux turbulent scalaire issus des deux expressions (4.93) et (4.102) qui correspondent respectivement aux intervalles $(0 < \chi < 1)$ et $(1 < \chi < \infty)$ pour différentes valeurs de N_B . On voit que plus la valeur de N_B est grande, plus la zone négative (zone de diffusion gradient) du flux est réduite.

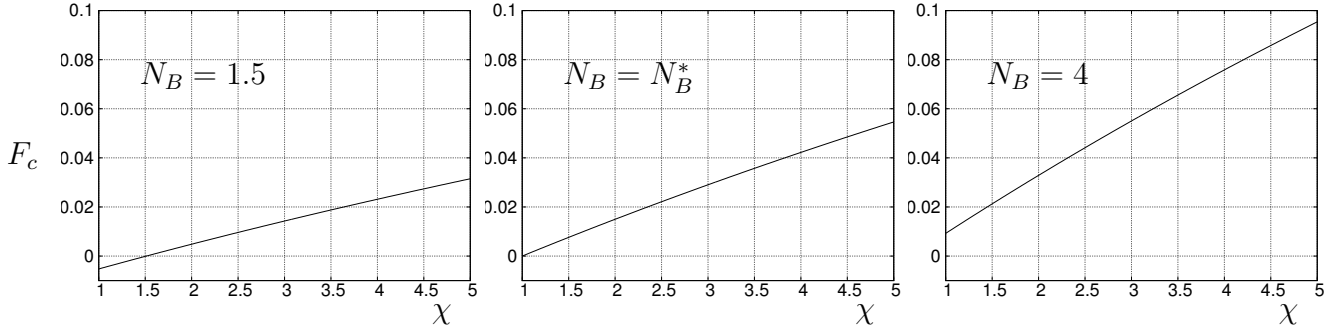


FIGURE 4.15 – Flux turbulent adimensionné F_c au début de la couche intermittente (4.102) dans la limite $\beta \rightarrow \infty$ et pour différentes valeurs de N_B .

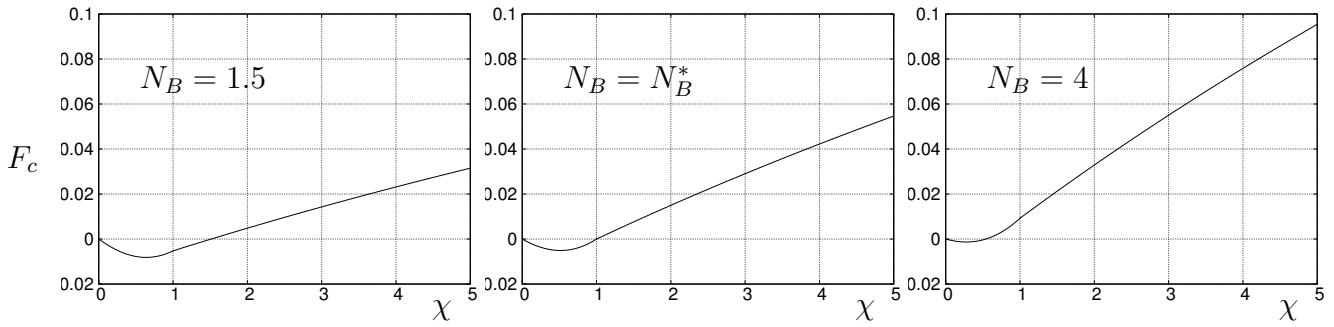


FIGURE 4.16 – Evolution du flux turbulent adimensionné F_c dans le *leading edge* dans la limite $\beta \rightarrow \infty$ et pour différentes valeurs de N_B .

4.5 Conclusion

Pour résumer les principaux résultats des paragraphes précédents, nous pouvons dire que lorsqu'une flamme turbulente est décrite par une interface infiniment mince séparant les gaz frais ($c = 0$) des gaz brûlés ($c = 1$), la variance du scalaire est toujours à sa valeur maximale, c'est à dire que le taux de ségrégation est unitaire. Dans ce cas, les quantités statistiques (variance, flux turbulent) présentent une discontinuité lors du passage de la zone amont (gaz frais prémélangé) à la zone de flamme turbulente, ce qui correspond à l'arrivée de la première interface. Si on considère maintenant que cette interface a en réalité une structure identique à celle d'une zone de préchauffage de flamme laminaire (grand nombre de Zeldovitch) alors le passage de la zone amont (gaz frais prémélangé) à la zone de flamme turbulente est continu. Dans ce cas, la variance atteint la moitié de sa valeur maximale ($S \rightarrow 1/2$), voir l'Eq (4.17), suite à la traversée de la première interface

en suivant l'évolution d'une fonction de Lambert. Puis, la variance continue d'augmenter au tout début de la zone intermittente jusqu'à tendre vers sa valeur maximale ($S \rightarrow 1$), voir l'Eq (4.18). Le flux turbulent présente les mêmes caractéristiques puisqu'il est relié à la ségrégation. De plus, ce flux change de signe à une distance du bord des gaz frais qui dépend du nombre de Bray.

L'introduction des flammelettes d'épaisseur finie a permis d'étendre l'analyse théorique des structures de flamme turbulente quel que soit le mécanisme chimique considéré et quels que soient les nombres de Karlovitz et de Reynolds. Ainsi, l'évolution de la variance et du flux turbulent dans la couche limite correspondant au leading edge d'une flamme turbulente peut maintenant être déterminée à partir de la seule connaissance des nombres sans dimension classiques de Reynolds Re_t , de Karlovitz Ka et de Bray N_B .

Chapitre 5

Simulation de flammes en V turbulentes prémélangées

5.1 Introduction

Les géométries de flamme en V prémélangée retenues pour les simulations correspondent aux dispositifs expérimentaux étudiés par Galizzi [35] et par Degardin [30]. Ce type de banc d'essais permet d'obtenir un écoulement bidimensionnel vertical d'un mélange de combustible et d'air à richesse homogène. Une flamme en V est stabilisée au sein de cet écoulement à l'aide d'un fil chaud. Le modèle de turbulence associé est le modèle $k - \epsilon$. Dans les flammes en V turbulentes étudiées ici, la partie principale du *flame brush* peut être décrite via le régime de flammelette, qui est caractérisé par des échelles de temps chimiques petites par rapport aux échelles de temps caractéristiques de la turbulence. Néanmoins, d'une part, l'augmentation de l'énergie cinétique turbulente en aval du fil chaud peut conduire à un certain épaississement de la flamme et le régime de l'écoulement réactif juste derrière le fil chaud peut être considéré comme un réacteur bien agité (régime de flammes épaissies). D'autre part, dans les gaz frais, devant le *flame brush*, le temps chimique devient infiniment grand par rapport à l'échelle de temps turbulent caractéristique et la combustion turbulente s'écarte de la limite de flamme mince. Ainsi, les modèles de combustion turbulente proposés pour la simulation numérique doivent être suffisamment réalistes pour gérer ces variations du régime de combustion turbulente. On

va considérer deux modèles simples $\bar{\omega}_{BRG}$ et $\bar{\omega}_{TDF}$ qui sont capables de changer leur forme dans le domaine de calcul suivant le régime de combustion turbulente rencontré. Ces modèles de combustion sont présentés dans le chapitre 3, cf. Eqs. (3.50) et (3.56). Ces travaux ont été présentés au 25^{ème} “International Colloquium on th Dynamics of Explosion and Reactive Systems” (ICDERS) en 2015 et ont fait l’objet d’un article accepté pour publication dans “Combustion Science and Technology” [43] (voir l’annexe D). Les simulations numériques sont effectuées avec le *Code-Saturne* qui est un logiciel de résolution des équations de Navier-Stokes pour les écoulements de fluide incompressible (à faible nombre de Mach) basé sur une approche de discrétisation de type volumes finis développé par EDF (Archambeau et al. [2]).

Dans ce chapitre, des expressions algébriques du taux de ségrégation S sont proposées pour analyser deux modèles du taux de réaction chimique $\bar{\omega}_{BRG}$ et $\bar{\omega}_{TDF}$. Puis, après une présentation générale de nos calculs : domaine de calcul, conditions aux limites correspondantes, etc., nous décrivons les résultats des simulations numériques et les comparons aux résultats expérimentaux obtenus par Galizzi et par Degardin.

Les expressions du taux de réaction chimique considérées sont les suivantes :

$$\bar{\omega}_{BRG} = (1 - S)\bar{\omega}_{ARR} + S\bar{\omega}_{BCL} \quad (5.1)$$

$$\bar{\omega}_{TDF} = \bar{\rho}K \left[(1 - \tilde{c})(1 - c_1) \exp\left(\frac{-\beta(1 - c_1)}{1 - \alpha(1 - c_1)}\right) + \tilde{c}(1 - c_2) \exp\left(\frac{-\beta(1 - c_2)}{1 - \alpha(1 - c_2)}\right) \right] \quad (5.2)$$

où $\bar{\omega}_{ARR}$ et $\bar{\omega}_{BCL}$ correspondent aux expressions (3.51) et (3.52) respectivement. Les quantités c_1 et c_2 sont liés à la variable d’avancement moyenne et au taux de ségrégation : $c_1 = \tilde{c}(1 - S)$ et $c_2 = \tilde{c} + (1 - \tilde{c})S$.

5.2 Expressions algébriques du taux de ségrégation

Au lieu de résoudre une équation transport supplémentaire pour la variance de la variable d’avancement $\widetilde{c'^2}$, le taux de ségrégation dans ce chapitre est évalué par une expression algébrique. Le taux de ségrégation doit tendre vers l’unité quand le temps caractéristique chimique τ_c devient infiniment petit en comparaison avec le temps caractéristique turbulent τ_t , et inversement ce taux doit devenir infiniment petit quand

$\tau_t \ll \tau_c$. Ainsi, une première expression empirique est proposée pour le taux de ségrégation sous la forme suivante :

$$S = \frac{1}{1 + C_2 \tau_c / \tau_t} = \frac{1}{1 + C_2 / Da} \quad (5.3)$$

où C_2 est un paramètre de modélisation et Da désigne le nombre de Damköhler. On peut noter que l'expression de la constante EBU C_{EBU} peut s'écrire de la manière suivante : $C_{EBU} = C_2 \tau_c I_\omega / (I_1 - I_2)$ dans la limite des valeurs infiniment grandes de Da .

Une autre expression algébrique du taux de ségrégation peut être obtenue par l'étude asymptotique réalisée dans la limite des valeurs infiniment grandes du nombre de Zeldovich, voir la section 4.2.2 du chapitre précédent. L'expression (4.26) représente la valeur maximale du taux de ségrégation en prenant en compte la PDF généralisée. On sait que les deux valeurs c_{min} et c_{max} sont liées au nombre de Karlovitz. Une expression analytique pour le taux de ségrégation peut alors être obtenue dans la limite des valeurs infiniment grandes du nombre de Zeldovich. Lorsque $\beta \rightarrow \infty$, on a $c_{max} \rightarrow 1$ et $c_{min} = \exp(-1/\sqrt{Ka})$, voir l'équation (4.4). Alors, l'expression (4.26) conduit à une expression qui dépend du nombre de Karlovitz :

$$\lim_{Re_t \rightarrow \infty, \beta \rightarrow \infty} S_{max} = 1 - \exp(-1/\sqrt{Ka})/\tilde{c} \quad (5.4)$$

Dans ce chapitre, on retient la deuxième forme du taux de ségrégation qui s'écrit de la façon suivante :

$$S = 1 - C_3 \exp(-1/\sqrt{Ka}) \quad (5.5)$$

où C_3 est une constante de modélisation.

5.3 Domaine de calcul et conditions aux limites

Le maillage 2D utilisé pour les simulations est non-structuré et représente la moitié du domaine physique, comme le montre la figure 5.1. Ce maillage correspond à la configuration étudiée par Degardin [30]. Les limites du domaine de calcul sont les suivantes :

- l'entrée amont se situe en bas du maillage $5mm$ au-dessous du fil chaud ($x_3 = -5mm$) et représente la moitié de la largeur du tube ;
- la sortie aval est en haut du maillage à $80mm$ au-dessus du fil chaud ($x_3 = 80mm$) ;
- le côté gauche du maillage représente la symétrie de l'écoulement ($x_1 = 0$) ;

- le côté droit tel que $x_3 < 0$ représente la paroi du tube externe ;
- le côté droit tel que $x_3 > 0$ représente la sortie ;
- le fil chaud est représenté par un demi cylindre de 0.8 millimètre de diamètre non chauffé.

Dans les simulations numériques de l'écoulement réactif, la stabilisation de la flamme résulte de la petite zone de recirculation créée par le demi cylindre. Les conditions limites d'entrée du domaine de calcul doivent donc être spécifiées très précisément car elles ont une très forte influence sur la combustion qui se développe en aval.

5.4 Evaluation préliminaire du modèle de calcul, flamme en V de Galizzi (2003)

On considère maintenant la première configuration numérique qui correspond à la flamme turbulente homogène étudiée par Galizzi [35]. Cette configuration consiste en un mélange parfaitement prémélangé de méthane et d'air à la richesse $\Phi = 0.6$. La flamme turbulente est stabilisée sur le fil chaud de 2 mm de diamètre qui est placé en aval d'une soufflerie verticale de $115 \times 115 \text{ mm}^2$ de section (Guo et al. [36]). Les conditions aux limites retenues sur les bords du domaine de calcul sont présentés sur la figure 5.1. La vitesse moyenne du mélange est $\tilde{v}_3 = 5 \text{ m.s}^{-1}$ et des mesures par anémométrie Doppler Laser (ADL) montre que la grille de turbulence est caractérisée par une intensité de 4%. L'échelle intégrale de longueur est environ 4 mm. Les profils de la variable d'avancement moyenne sont mesurés à trois abscisses distinctes ($x_3 = 30, x_3 = 60$ et $x_3 = 90 \text{ mm}$). Des études précédentes ont montré que, malgré ses limites, l'hypothèse de viscosité turbulente fournit une représentation satisfaisante du champ d'écoulement turbulent réactif [79]. Un maillage bidimensionnel non structuré composé d'environ 105000 cellules est utilisé pour représenter la moitié du domaine physique.

Les figures 5.2 et 5.3 représentent les profils de la variable d'avancement moyenne à trois distances différentes en aval du fil chaud. Ces résultats ont été obtenus en utilisant le modèle *bridging* pour le taux de réaction chimique, voir l'équation (5.1), avec le taux de ségrégation déduit de l'expression (5.3), voir la figure 5.2, ou bien avec l'expression (5.5),

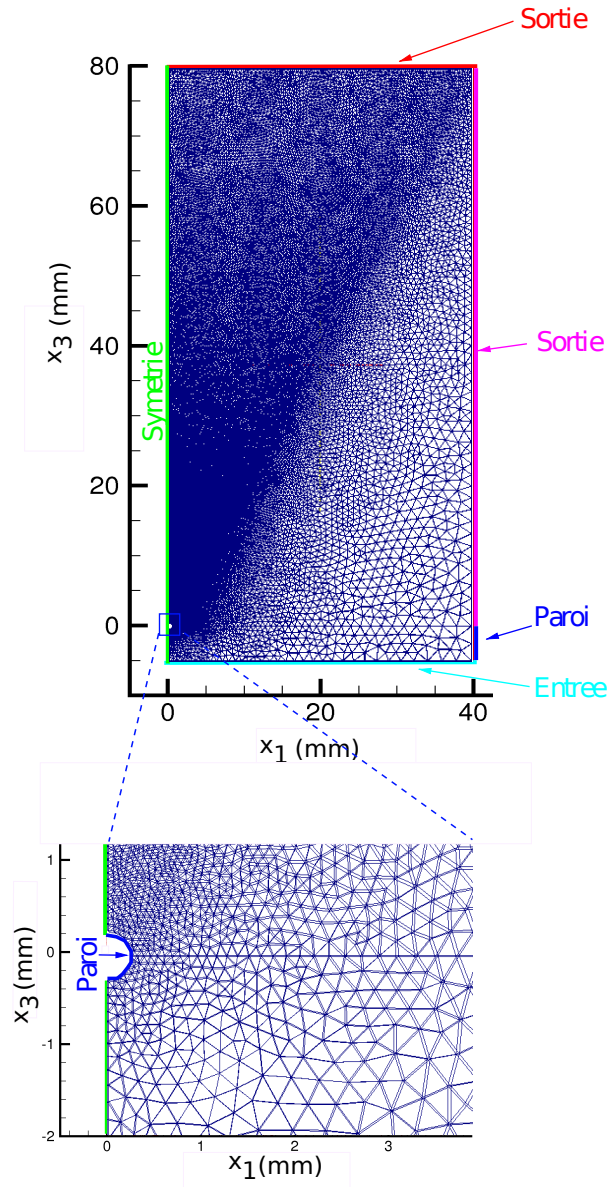


FIGURE 5.1 – Maillage non structuré considéré.

voir la figure 5.3. Les calculs correspondants montrent que les deux expressions du taux de ségrégation donnent un bon accord entre les résultats numériques et expérimentaux, une fois fixées les valeurs des paramètres C_2 et C_3 . Pour conclure cette étude préliminaire, les résultats numériques sont comparés favorablement avec les résultats mesurés et confirment la pertinence des fermetures proposées pour le taux de réaction chimique.

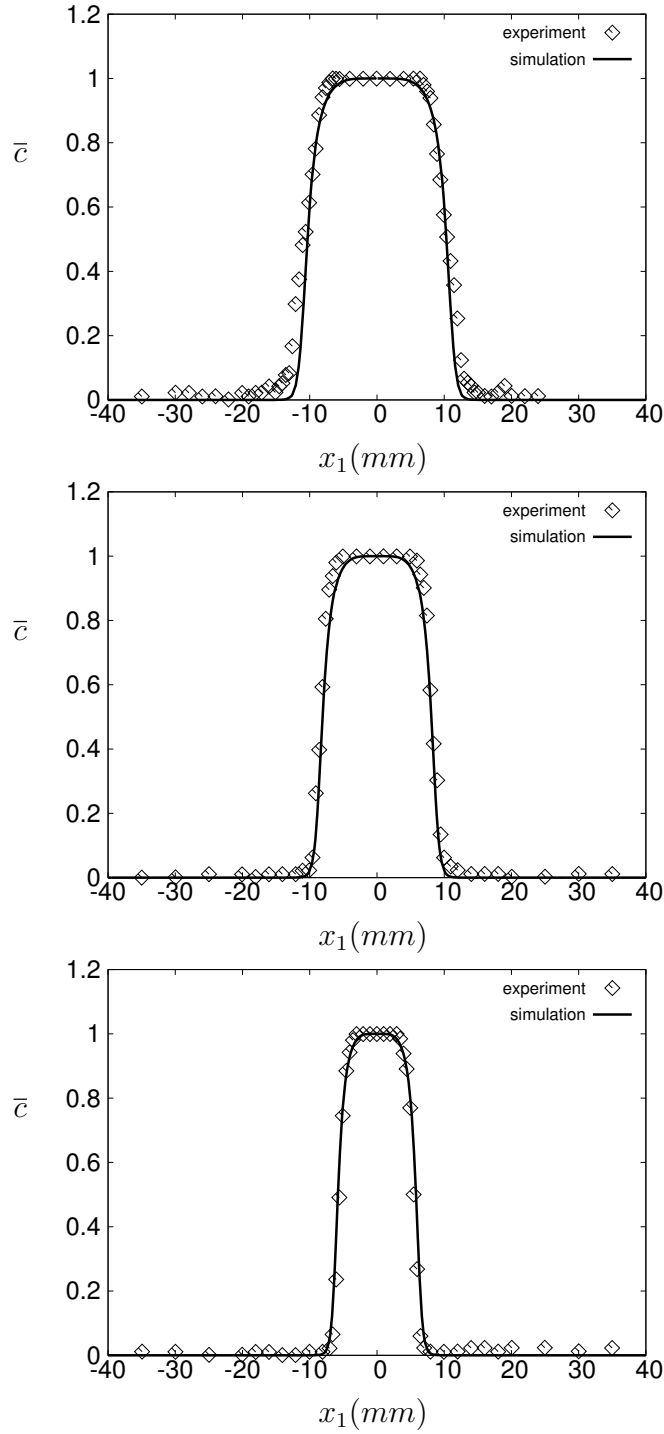


FIGURE 5.2 – Comparaison entre les profils de la variable d'avancement issus des simulations numériques et ceux mesurés par Galizzi à trois distances différentes en aval du fil chaud $x_3 = 30\text{ mm}$ (bas), $x_3 = 60\text{ mm}$ (milieu) and $x_3 = 90\text{ mm}$ (haut) avec $\tilde{\omega}_{BRG}$ donné par (5.1) et S donné par (5.3) avec $C_2 = 0.4$.

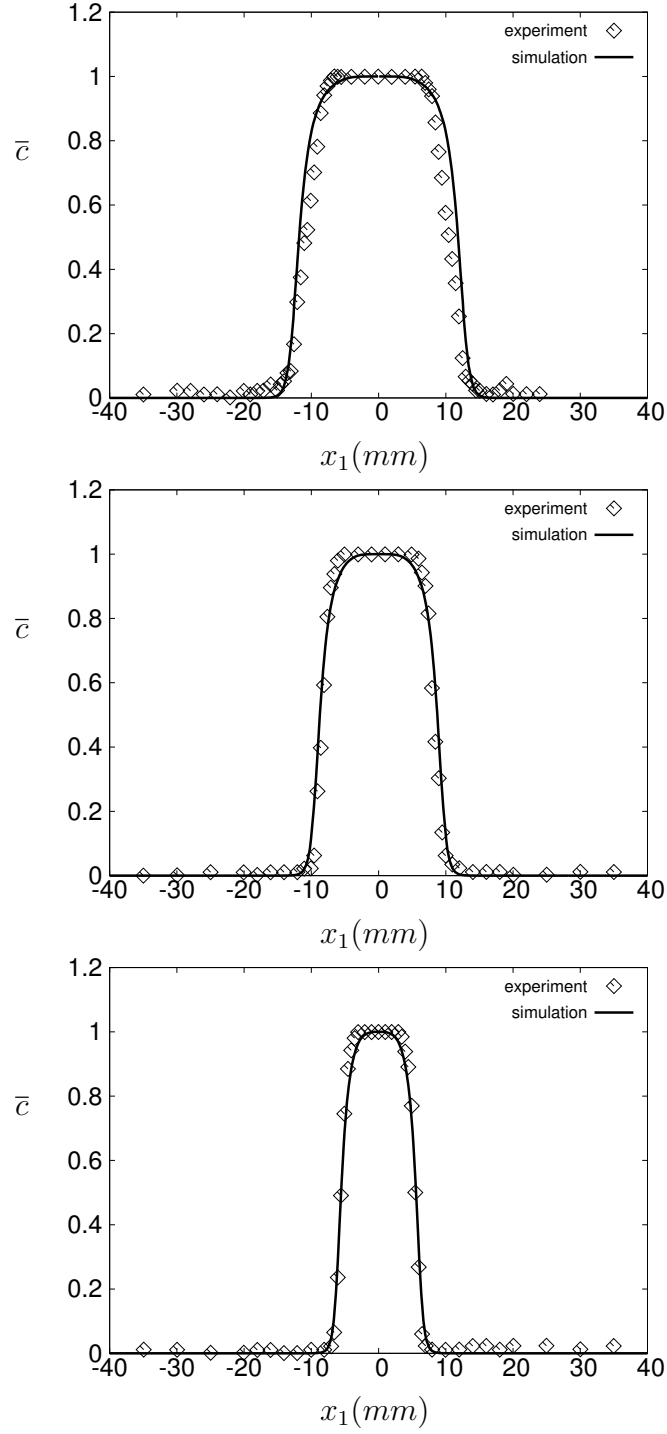


FIGURE 5.3 – Comparaison entre les profils de la variable d'avancement issus des simulations numériques et ceux mesurés par Galizzi à trois distances différentes en aval du fil chaud $x_3 = 30\text{ mm}$ (bas), $x_3 = 60\text{ mm}$ (milieu) and $x_3 = 90\text{ mm}$ (haut) avec $\tilde{\omega}_{BRG}$ donné par (5.1) et S donné par (5.5) avec $C_3 = 0.07$.

5.5 Etude détaillée de deux fermetures du taux de réaction chimique, flamme en V de Renou

On considère maintenant la configuration expérimentale étudiée par Degardin et al. [30], voir aussi Robin et al. [79] pour plus de détails. Les flammes turbulentes sont stabilisées sur un fil chaud de 0.8 mm en aval d'une veine d'essais verticale de $80 \times 80 \text{ mm}^2$ de section, voir la figure 5.1. Le débit d'air entrant est de $80 \text{ Nm}^3/\text{h}$. Un mélange de méthane et d'air homogène de richesse $\Phi = 0.6$ est considéré. L'écoulement turbulent se développe en aval d'une grille située à 70mm en amont du fil chaud ($x_3 = 0$). Les champs de vitesse ont été évalués par vélocimétrie par imagerie de particules (PIV), tandis que la température est mesurée simultanément par diffusion Rayleigh et PLIF (Planar Laser Induced Fluorescence) sur acétone. Des détails concernant les données expérimentales et les méthodes de mesure associées ont été publiés dans les articles de Degardin et al. [30] et de Robin et al. [79].

Des résultats expérimentaux obtenus dans des conditions non-réactives sont utilisés pour préciser les conditions limites d'entrée afin de reproduire correctement la turbulence de grille selon la procédure décrite par Robin et al. [79]. Les conditions d'entrée correspondantes pour le champ de vitesse sont : $\tilde{v}_3 = 3.2\text{m/s}$, $\tilde{k} = 0.12\text{m}^2/\text{s}^2$, $\tilde{\epsilon} = 10\text{m}^2/\text{s}^3$. Un maillage bidimensionnel non-structuré comportant environ 50000 cellules a été généré pour représenter la moitié du domaine physique. La figure 5.1 représente ce maillage et les conditions aux limites correspondantes. Les profils de la variable d'avancement sont mesurés à deux distances différentes $x_3 = 42.5\text{mm}$ et $x_3 = 70\text{mm}$. Le temps nécessaire pour obtenir la convergence complète des simulations numériques est d'environ deux heures sur une machine bi-processeur comportant un seul noeud de calcul et une quinzaine de minutes une fois les conditions initiales sont bien établies. Il sera donc possible de faire fonctionner ces simulations numériques sur un smartphone dans un très proche avenir.

Les figures 5.4 et 5.5 représentent les profils moyens de la variable d'avancement à différentes distances du fil chaud ($x_3 = 42.5\text{mm}$ et $x_3 = 70\text{mm}$) obtenus avec le modèle $\bar{\omega}_{TDF}$ donné par l'Eq. (5.2). Le taux de ségrégation est issu de l'Eq. (5.3) dans la figure 5.4 et de l'Eq. (5.5) dans la figure 5.5. Les paramètres correspondants ont été fixés à $C_2 = 1$ et $C_3 = 0.15$. Les résultats numériques et expérimentaux sont en bon accord dans les deux

cas du taux de ségrégation. Ce résultat est confirmé par les champs de température qui sont très similaires quelle que soit l'expression retenue pour le taux de ségrégation, l'Eq. (5.3) et l'Eq. (5.5), voir la figure 5.6. Néanmoins, il est à noter que les champs de taux de ségrégation correspondants diffèrent significativement juste en aval du fil chaud, voir la figure 5.7.

Les figures 5.8 à 5.11 représentent les profils de la variable d'avancement moyenne à deux différentes distances du fil chaud ($x_3 = 42.5mm$ et $x_3 = 70mm$) et les champs de température et taux de ségrégation obtenus avec le modèle $\bar{\omega}_{BRG}$ donné par l'Eq. (5.1). Une nouvelle fois, les deux expressions du taux de ségrégation, l'Eq. (5.3) et l'Eq. (5.5), donnent les résultats numériques qui sont en bon accord avec les résultats expérimentaux, voir les figures 5.8 et 5.9. Les champs de température présentés dans la figure 5.10 confirment aussi cette conclusion. Les valeurs de deux paramètres sont fixées à $C_2 = 0.4$ et $C_3 = 0.07$. Par ailleurs, les champs de taux de ségrégation sont similaires excepté dans la zone en aval du fil chaud, voir la figure 5.11. On peut conclure que le comportement de flamme est principalement contrôlé par les processus qui se déroulent loin du fil chaud où les deux expressions du taux de ségrégation, l'Eq. (5.3) et l'Eq. (5.5), conduisent à des résultats similaires.

De plus, on voit que les modèles $\bar{\omega}_{BRG}$ et $\bar{\omega}_{TDF}$ donnés par l'Eq. (5.1) et l'Eq. (5.2) peuvent conduire aux résultats numériques satisfaisants. Pourtant, les figures 5.6 et 5.10 montrent clairement que les formes du *flame brush* obtenues sont différentes. En fait, la vitesse de propagation du *flame brush* est plus grande, i.e. valeurs plus petites de E , pour le modèle $\bar{\omega}_{BRG}$ que pour le modèle $\bar{\omega}_{TDF}$ quand la valeur du taux de ségrégation diminue, voir les figures 3.15 et 3.17. En conséquence, l'extension de flamme en V est plus grande pour le modèle $\bar{\omega}_{BRG}$ mais juste derrière le fil chaud. Finalement, le taux de réaction chimique est validé pour différents régimes de combustion turbulente pour capturer la bonne forme de flamme en V bien que le régime de flammelette joue le rôle principal dans l'écoulement réactif.

Dans ce chapitre, la vitesse de propagation est évaluée de deux manières différentes :

- La première estimation correspond à la composante normale au *flame brush* de la vitesse d'écoulement :

$$S_t(\tilde{c}) = \tilde{v}_i n_{c,i} = \tilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n}_c \quad (5.6)$$

où $\mathbf{n}_c = -\nabla\tilde{c}/\|\nabla\tilde{c}\|$ désigne le vecteur normal à l'iso-ligne de la variable progrès moyenne.

- La seconde méthodologie utilise la forme propagative de l'équation de transport de variable progrès moyenne :

$$\bar{\rho}S_t(\tilde{c})\mathbf{n}_c \cdot \nabla\tilde{c} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho}D_t \frac{\partial\tilde{c}}{\partial x_i} \right) + \bar{\omega} \quad (5.7)$$

ce qui conduit alors à :

$$S_t(\tilde{c}) = \frac{1}{\bar{\rho}\|\nabla\tilde{c}\|} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho}D_t \frac{\partial\tilde{c}}{\partial x_i} \right) + \bar{\omega} \right). \quad (5.8)$$

La vitesse de propagation et la valeur propre correspondante $E = D_t B / S_t^2$, voir le chapitre 3, obtenues long des iso-lignes de la variable de progrès moyenne sont étudiées de façon détaillée dans l'article de Kha et al. [43], voir l'annexe C. Les valeurs propres E qui peuvent être déduite des calculs de flamme en V avec la vitesse de propagation évaluée par l'expression (5.6), sont alors tracées avec l'axe longitudinal pour quatre valeurs différentes de la variable de progrès moyenne $\tilde{c} = 0.01, 0.05, 0.10$ et 0.50 , voir la figure 5.12. Du fait de l'expansion thermique, plus $\tilde{c}$ est grand, plus $S_t(\tilde{c})$ est élevé, et plus petite est la valeur de E . Enfin, on effectue une comparaison des valeurs de E issues de l'analyse de flammes monodimensionnelles et celles déduites de la vitesse de propagation évaluée long de l'iso-ligne de la variable progrès moyenne $\tilde{c} = 0.01$ de flamme en V, voir la figure 5.13. Compte tenu que le taux de ségrégation augmente en aval du fil chaud, les valeurs de E déduites des calculs monodimensionnels augmentent long de l'axe longitudinal x_3 . Le bon accord obtenu entre ces deux types de données confirme la pertinence des études de flamme monodimensionnelle pour l'analyse des flammes en V.

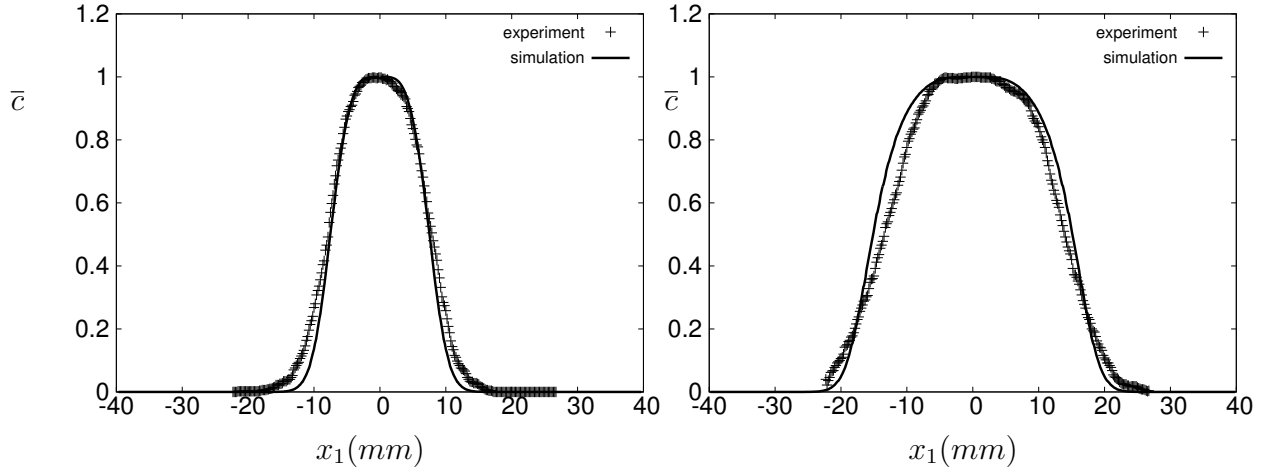


FIGURE 5.4 – Profils de la variable d’avancement obtenus expérimentalement et par simulations numériques à deux différentes distances du fil chaud $x_3 = 42.5mm$ (gauche) and $x_3 = 70mm$ (droite) avec $\bar{\omega}_{TDF}$ donné par l’Eq. (5.2) et S donné par l’Eq. (5.3) avec $C_2 = 1$.

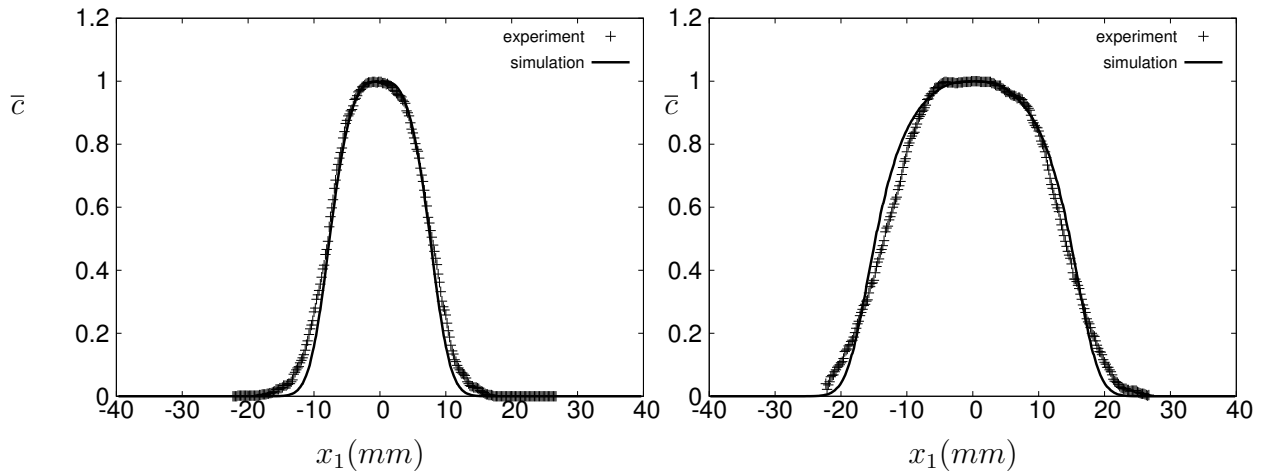


FIGURE 5.5 – Profils de la variable d’avancement obtenus expérimentalement et par simulations numériques à deux différentes distances du fil chaud $x_3 = 42.5mm$ (gauche) and $x_3 = 70mm$ (droite) avec $\bar{\omega}_{TDF}$ donné par l’Eq. (5.2) et S donné par l’Eq. (5.5) avec $C_3 = 0.15$.

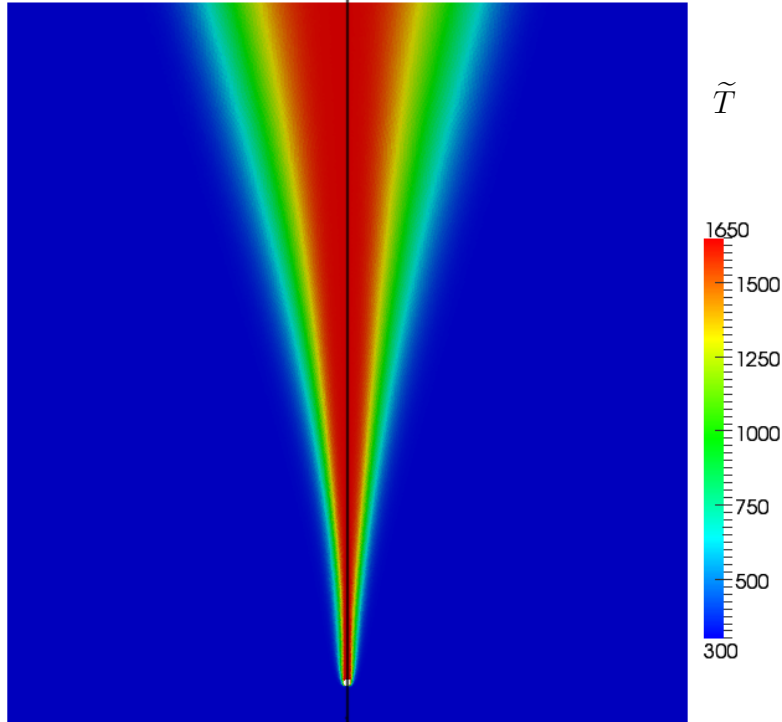


FIGURE 5.6 – Champ de température obtenu avec $\bar{\omega}_{\text{TDF}}$ donné par l'Eq. (5.2) et S donné par l'Eq. (5.3) avec $C_2 = 1$ (gauche) et par l'Eq. (5.5) avec $C_3 = 0.15$ (droite).

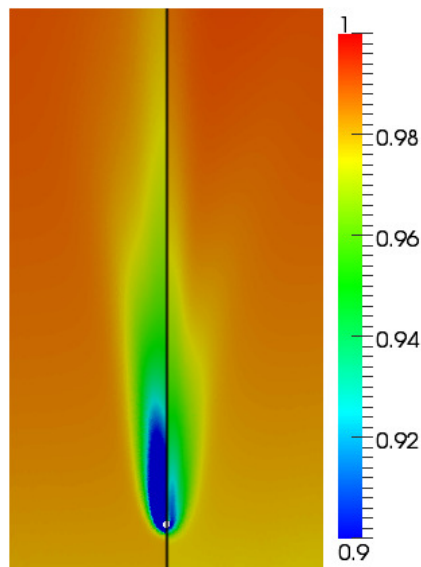


FIGURE 5.7 – Champ du taux de ségrégation obtenu avec $\bar{\omega}_{\text{TDF}}$ donné par l'Eq. (5.2) et S donné par l'Eq. (5.3) avec $C_2 = 1$ (gauche) et par l'Eq. (5.5) avec $C_3 = 0.15$ (droite).

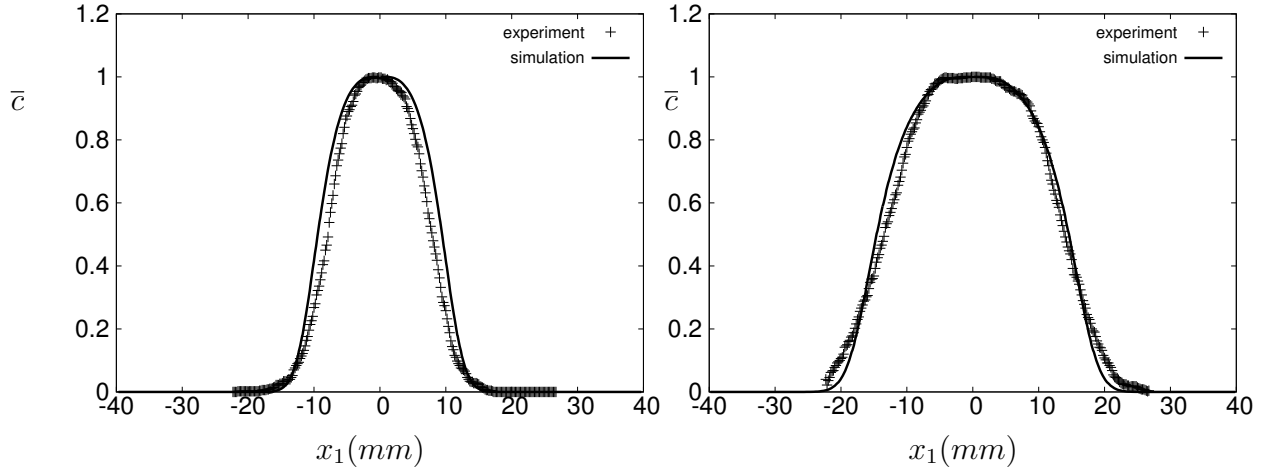


FIGURE 5.8 – Profils de la variable d’avancement obtenus expérimentalement et par simulations numériques à deux distances différentes du fil chaud $x_3 = 42.5mm$ (gauche) and $x_3 = 70mm$ (droite) avec $\bar{\omega}_{BRG}$ donné par l’Eq. (5.1) et S donné par l’Eq. (5.3) avec $C_2 = 0.4$.

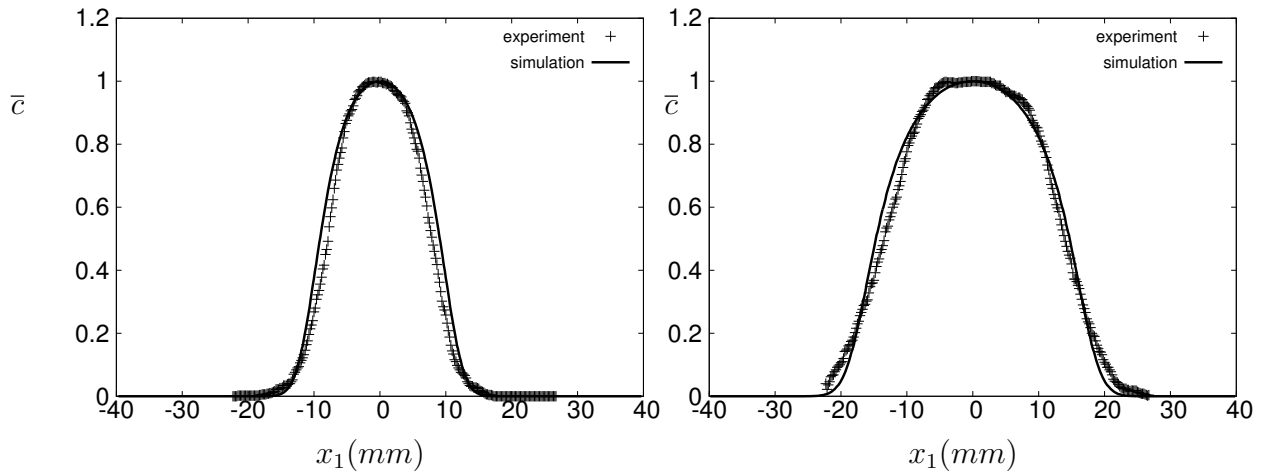


FIGURE 5.9 – Profils de la variable d’avancement obtenus expérimentalement et par simulations numériques à deux distances différentes du fil chaud $x_3 = 42.5mm$ (gauche) and $x_3 = 70mm$ (droite) avec $\bar{\omega}_{BRG}$ donné par l’Eq. (5.1) et S donné par l’Eq. (5.5) avec $C_3 = 0.07$.

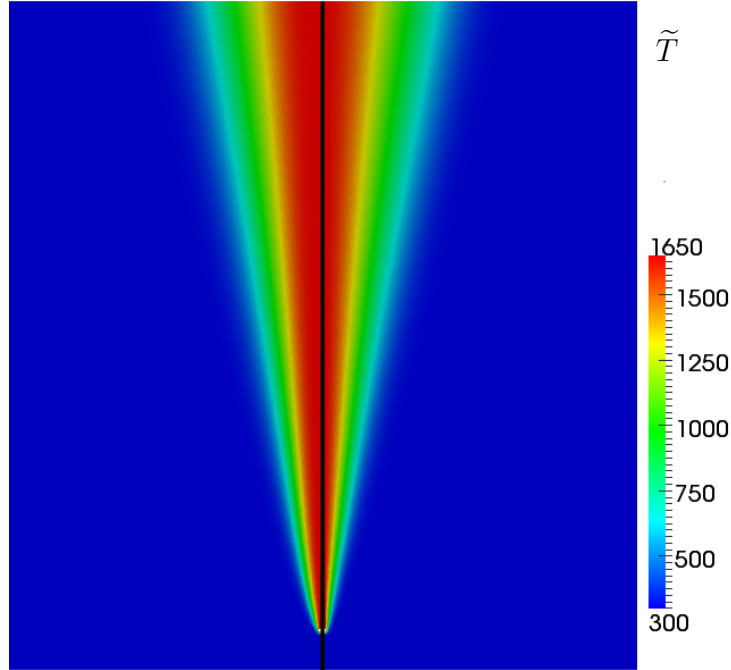


FIGURE 5.10 – Champ de température obtenu avec $\bar{\omega}_{\text{BRG}}$ donné par l'Eq. (5.1) et S donné par l'Eq. (5.3) avec $C_2 = 0.4$ (gauche) et par l'Eq. (5.5) avec $C_3 = 0.07$ (droite).

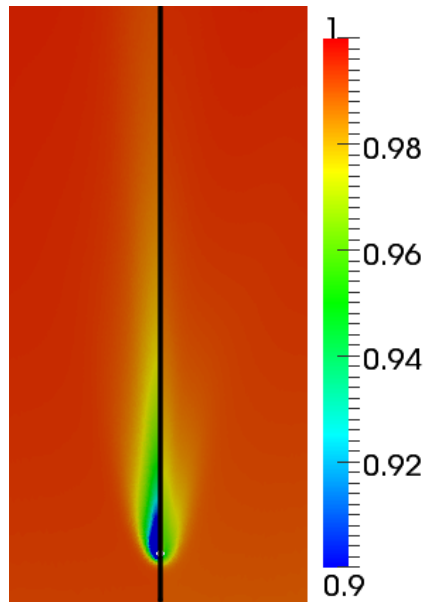


FIGURE 5.11 – Champ de taux de ségrégation obtenu avec $\bar{\omega}_{\text{BRG}}$ donné par l'Eq. (5.1) et S donné par l'Eq. (5.3) avec $C_2 = 0.4$ (gauche) et par l'Eq. (5.5) avec $C_3 = 0.07$ (droite).

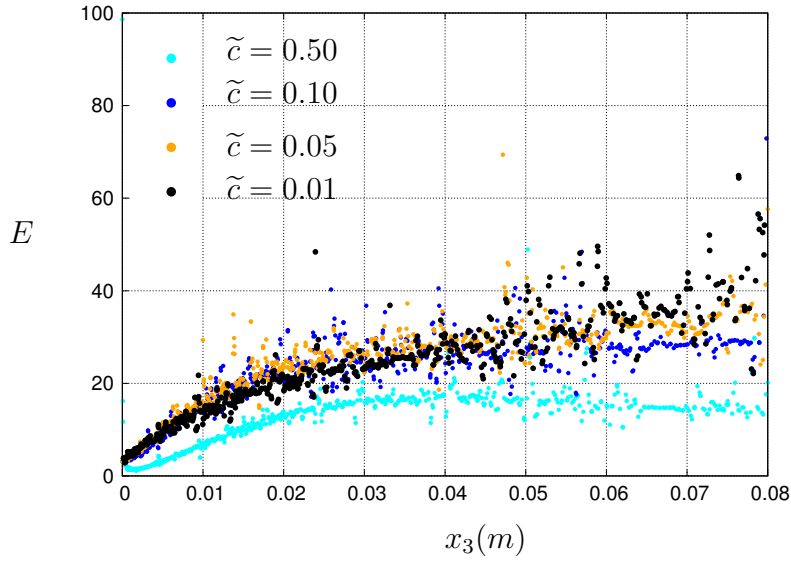


FIGURE 5.12 – Valeurs propres non-dimensionnelles E obtenues long de différentes iso-lignes de la variable d’avancement moyenne ($\tilde{c} = 0.01, 0.05, 0.10$ and 0.50) issues de la simulation numérique utilisant le modèle *bridging* $\bar{\omega}_{\text{BRG}}$. La vitesse de propagation S_t est déduite de la projection du champ de vitesse.

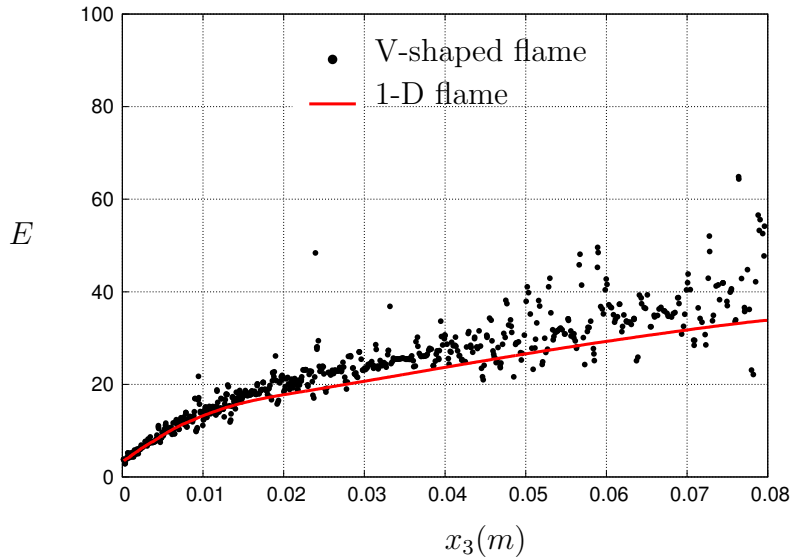


FIGURE 5.13 – Comparaison entre les valeurs propres non-dimensionnelles E obtenues long de iso-lignes de $\bar{c} = 0.01$ et la valeur déduite à partir de l’analyse monodimensionnelle. La vitesse de propagation S_t est évaluée par le biais de l’Eq. (5.6).

5.6 Conclusion

Deux fermetures algébriques du taux de réaction chimique moyen confirment la passage continue de régimes de combustion turbulente prémélangée qui restitue la propagation ZFK, pour les valeurs faibles du taux de ségrégation S , et la propagation KPP pour les grandes valeurs de S . Chacune de ces fermetures implique un seul paramètre de modélisation (C_2 ou C_3). Ainsi, les modèles de combustion turbulente associés sont très simple à mettre en œuvre. L'application de ces modèles à une flamme en V homogène stabilisée par un fil chaud a donné un très bon accord entre mesure et simulation numérique. Les simulations numériques ont montré que le comportement de flamme en V est contrôlé par les processus qui se déroulent loin du fil chaud où le taux de ségrégation est près de l'unité. De plus, les modèles correspondants sont utilisés pour caractériser la propagation de flamme turbulente prémélangée monodimensionnelle. Les résultats numériques issus de calculs de flamme en V sont en bon accord avec les études de la propagation de flamme monodimensionnelle présentée dans le chapitre 3.

Chapitre 6

Simulation d'une flamme prémélangée stabilisée dans un écoulement divergent

6.1 Introduction

La configuration expérimentale retenue pour les simulations numériques présentées dans ce chapitre correspond au cas d'une flamme stabilisée dans un écoulement divergent. Cette géométrie a été étudiée par Cho et al. [22, 23]. Un écoulement turbulent des réactifs à la température ambiante est formé par l'impact d'un jet axisymétrique contre une paroi plane permettant de stabiliser une flamme turbulente prémélangée. Depuis de nombreuses années, ces flammes “impactantes”¹ fournissent un cas de référence pour la validation des modèles de combustion turbulente prémélangée (voir par exemple Bray et al. [13, 14, 18] ; Dong et al. [32] ; Lee et Huh [52], Sabelnikov et Lipatnikov [84]). Suite à notre discussion de la variabilité des régimes de combustion turbulente, on choisit pour cette analyse un modèle pour le taux de réaction chimique moyen qui, malgré sa simplicité, peut changer sa forme dans le domaine de calcul. Ce modèle est basé sur la description de l'épaisseur finie des flammelettes discutée dans le chapitre 4. Les résultats présentés dans ce chapitre

1. Malgré son incorrection, ce terme, issu de l'anglicisme “impinging flames” est ici librement employé par souci de concision.

sont détaillés dans l'article de Mura et al. (2016) [63] qui a fait suite au workshop “Recent Advances in Turbulent Premixed Combustion Modelling” organisé à Cambridge en Juin 2015, voir l'annexe E.

En prenant en compte l'épaisseur finie des flammelettes la probabilité γ_c de se trouver dans la structure de flamme est proportionnelle au facteur d'intermittence entre les gaz frais et gaz brûlés $\tilde{c}(1-\tilde{c})$ et à l'écart à la valeur maximale du taux de ségrégation $S_{max}-S$:

$$\gamma_c = (S_{max} - S) \frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c})}{I_1 - I_2} \quad (6.1)$$

où le taux de ségrégation S approche sa valeur maximale S_{max} (4.26), dans la limite des grandes valeurs du nombre de Reynolds. On rappelle que l'expression de S_{max} est donnée par :

$$S_{max} = \frac{(\tilde{c} - c_{min})(c_{max} - \tilde{c})}{\tilde{c}(1 - \tilde{c})} \quad (6.2)$$

si bien que le taux de réaction chimique peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\bar{\omega} = \bar{\rho} \gamma_c I_\omega = \bar{\rho} (S_{max} - S) \frac{\tilde{c}(1 - \tilde{c}) I_\omega}{I_1 - I_2} \quad (6.3)$$

où I_ω est le taux de réaction chimique moyen conditionné dans la structure de flammelette tel qu'obtenu par des calculs de flamme laminaire (4.28) :

$$I_\omega = \int_{c_{min}}^{c_{max}} \frac{\omega_c(c)}{\rho} \tilde{f}(c) dc \quad (6.4)$$

6.2 Prise en compte de l'épaisseur finie des flammelettes dans la simulation numérique

La structure de *flame brush* turbulent a été analysée dans la section 4.3 du quatrième chapitre. Le *flame brush* turbulent, limité par $c_{min} < c < c_{max}$, voir la figure 4.5, comporte donc différentes sous-couches :

- La zone de préchauffage turbulente localisée en amont du *flame brush* turbulent ($\tilde{c} < c_{min}$) ; Les réactions chimiques y sont très faibles et peuvent être considérées comme négligeables.
- La sous-couche suivante est le *leading edge* où la première flammelette apparaît. Elle correspond à $c_{min} < \tilde{c} < c_{le}$. La valeur limite supérieure c_{le} (4.30) s'écrit $c_{le} = c_{min} + \gamma_{le}(I_1 - c_{min})$.

- La couche intermittente principale correspond à $c_{le} < \tilde{c} < c_{te}$. Le taux de réaction chimique moyen peut y être évalué par l'Eq. (6.3).
- Le *trailing edge* du *flame brush* ($c_{te} < \tilde{c} < c_{max}$) est associé à la disparition de la dernière flammelette. La valeur limite inférieure c_{te} (4.31) s'écrit $c_{te} = c_{max} - \gamma_{te}(c_{max} - I_1)$.
- La dernière sous-couche, située en aval du *flame brush* ($\tilde{c} > c_{te}$), est la zone de réaction lente. Les réactions chimiques y deviennent de plus en plus faibles.

Les probabilités de se situer dans la structure de flammelette au sein des deux sous-couches *leading edge* et *trailing edge* sont considérées égales. On fait l'hypothèse que ces probabilités sont proportionnelles au rapport de leur épaisseur $l_x = l_\eta$ à la plus grande échelle de la turbulence l_t :

$$\gamma_{le} = \gamma_{te} = (\kappa Re_t)^{-3/4} = \kappa^* Re_t^{-3/4} \quad (6.5)$$

où l'impact du paramètre κ sur les résultats numériques sera évalué dans ce qui suit.

Considérant la dépendance des différentes limites sur les nombres de Reynolds et Karlovitz, les quantités moyennes peuvent être tabulées en fonction de ces deux paramètres. La méthodologie de tabulation est basée sur le calcul de flammes laminaires prémélangées monodimensionnelles qui ont été présentés dans le chapitre 3. Les tabulations comportent non seulement les limites des sous-couches mais également incorporent les fractions massiques des espèces moyennes, ainsi que tous autres quantités nécessaires pour évaluer le taux de réaction chimique moyen, en particulier I_1 , I_2 et I_ω .

Les expressions du taux de réaction chimique s'écrivent donc de la façon suivante :

$$\bar{\omega}(\tilde{c})/\bar{\rho} = \begin{cases} \omega_c(\tilde{c}) \approx 0 & \tilde{c} \in [0; c_{min}] \\ (1 - \gamma_c)\omega_c(c_{min}) + \gamma_c I_\omega^* & \tilde{c} \in [c_{min}; c_{le}] \\ (S_{max} - S)\tilde{c}(1 - \tilde{c})I_\omega/(I_1 - I_2) & \tilde{c} \in [c_{le}; c_{te}] \\ (1 - \gamma_c)\omega_c(c_{max}) + \gamma_c I_\omega^{**} & \tilde{c} \in [c_{te}; c_{max}] \\ \omega_c(\tilde{c}) & \tilde{c} \in [c_{max}; 1] \end{cases} \quad (6.6)$$

où I_ω^* et I_ω^{**} sont définies par $I_\omega^* = \int_{c_{min}}^{c^*(\tilde{c})} \omega_c(c)/\rho \tilde{f}(c)dc$ et $I_\omega^{**} = \int_{c^{**}(\tilde{c})}^{c_{max}} \omega_c(c)/\rho \tilde{f}(c)dc$. Cependant, le *leading edge* et *trailing edge* sont difficiles à distinguer au sein des zones de préchauffage turbulente et de réaction lente. Il est donc difficile de capturer ces couches

minces sur le maillage de calcul. Ainsi, un modèle réduit à trois couches pour le taux de réaction chimique est introduit pour conduire les simulations numériques :

$$\bar{\omega}(\tilde{c})/\bar{\rho} = \begin{cases} \omega_c(\tilde{c}) \approx 0 & \tilde{c} \in [0; c_{le}] \\ \gamma_c I_\omega & \tilde{c} \in [c_{le}; c_{te}] \\ \omega_c(\tilde{c}) & \tilde{c} \in [c_{te}; 1] \end{cases} \quad (6.7)$$

La fermeture du taux de réaction chimique proposée ci-dessus (6.7) est maintenant évaluée par son application à une géométrie de laboratoire.

6.3 Cas de référence

Un écoulement axisymétrique uniforme de méthane et d'air est issu d'un injecteur de 50 mm de diamètre. Ce jet de réactifs est entouré par un écoulement cocourant d'air de diamètre extérieur de 100 mm. Les flammes turbulentes sont stabilisées au voisinage d'une paroi située à la distance de 75 mm au-dessus de la sortie du jet. La vitesse du jet est fixée à 5.0 m/s et la turbulence initiale est générée par une grille. L'échelle caractéristique intégrale de la turbulence l_t est évaluée entre un et deux millimètres [32]. Les fluctuations de vitesse ou RMS v_{RMS} est environ égale à 0.3 m/s. La richesse du mélange de méthane et d'air est unitaire ($\Phi = 1.0$).

Le maillage bidimensionnel retenu comporte environ 15900 cellules, il représente une petite partie du domaine physique (voir la figure 6.1). La condition d'entrée située dans la partie inférieure du domaine physique est imposée en utilisant les données expérimentales tandis qu'une condition aux limites de sortie est appliquée en haut du maillage. Le côté gauche du maillage représente la symétrie de l'écoulement et le côté droit représente la sortie. Le modèle de turbulence associé est le modèle $k - \epsilon$ classique. L'énergie cinétique turbulente k et le taux de dissipation ϵ en entrée du domaine de calcul sont respectivement $k_0 = 3(v_{RMS})^2/2$ et $\epsilon_0 = C_\mu k_0^{3/2}/l_t$ avec $C_\mu = 0.09$. Un scalaire (fraction de mélange Z) est considéré pour suivre le mélange entre le jet de réactifs et le co-flow de l'air. Les simulations numériques sont effectuées avec le logiciel *Code-Saturne*.

Les résultats de référence sont obtenus avec le taux de réaction chimique représenté par la fermeture discutée dans la section précédente, voir l'Eq. (6.7). On utilise la loi de diffusion gradient pour caractériser le flux turbulent $\overline{\rho v_i'' c''} = -\bar{\rho} D_T (\partial \tilde{c} / \partial x_i)$ avec

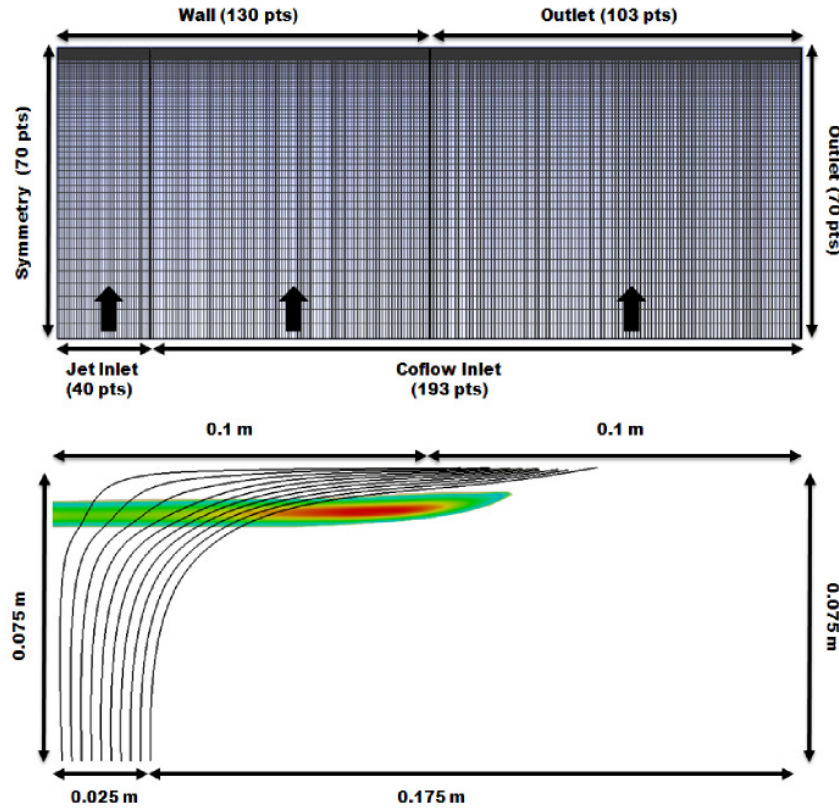


FIGURE 6.1 – Croquis du domaine de calcul pour les simulations numériques de flammes impactantes. En haut : description du maillage et des conditions aux limites. En bas : lignes de courant de l'écoulement à travers le *flame brush*.

$D_T = \nu_T / Sc_T$. La valeur du nombre de Schmidt turbulent est fixée à $Sc_T = 0.7$. Les résultats présentés ici ont été obtenus avec $l_t = 1 \text{ mm}$ et une valeur de la constante κ fixée à 0.05, voir l'Eq. (6.5).

Le taux de réaction chimique est mis à zero dès que la fraction de mélange diffère significativement de sa valeur dans la sortie. On peut les observer sur les figures 6.2 et 6.3 le champ de la fraction de mélange $\tilde{Z}$ superposé avec les iso-lignes de la variable de progrès et le champ de la variable de progrès moyenne $\tilde{c}$ superposé avec les iso-lignes du taux de réaction chimique. Sur la figure 6.3, nous comparons aussi le champ moyen de la variable progrès obtenue par le biais d'une équation transport à une autre expression de la variable progrès qui peut être évaluée via la chimie détaillée tabulée :

$$\tilde{c}_{Y_{CO}+Y_{CO_2}} = \frac{\tilde{Y}_{CO} + \tilde{Y}_{CO_2}}{Y_{CO}^{eq} + Y_{CO_2}^{eq}} \quad (6.8)$$

où Y_{CO}^{eq} et $Y_{CO_2}^{eq}$ représentent les fractions massiques de CO et de CO₂ à l'équilibre.

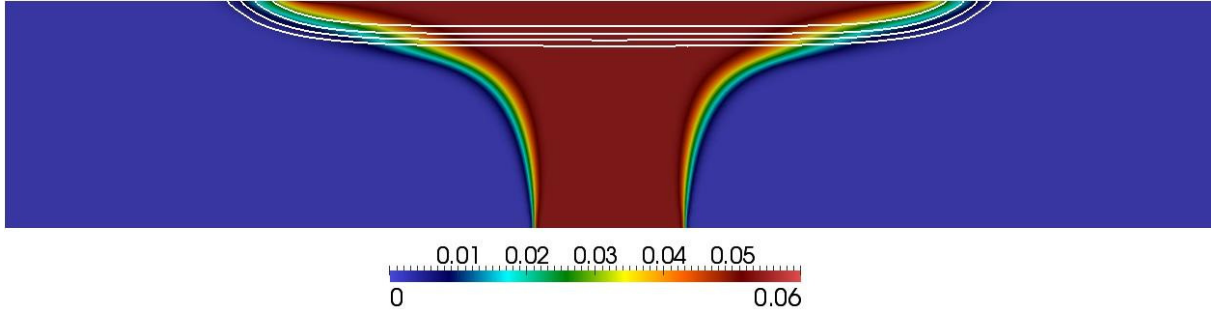


FIGURE 6.2 – Champ de la fraction de mélange moyenne superposé avec les iso-lignes de la variable progrès moyenne.

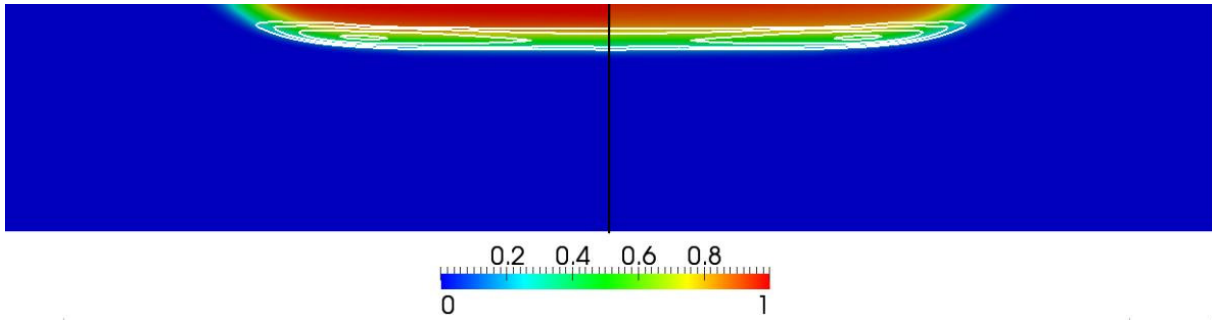


FIGURE 6.3 – Champ de la variable progrès obtenu par son équation transport (côté droit) ou déduit de la tabulation utilisant l'Eq. (6.8) (côté gauche) superposé avec les iso-lignes du taux de réaction chimique.

Les profils de la vitesse moyenne axiale et de la variable d'avancement moyenne sont présentés ensemble avec les données expérimentales sur la figure 6.4. Un accord quantitatif satisfaisant est obtenu entre les résultats de simulation numérique et les données expérimentales. La sensibilité des résultats numériques pour une modification de la richesse Φ du jet de réactifs est considérée. Les résultats obtenus pour $\Phi = 0.8$ sont comparés avec ceux obtenus pour la condition stoechiométrique, i.e. $\Phi = 1.0$, qui correspondent aux conditions expérimentales. On voit que les résultats présentés sur la figure 6.5 confirment que le modèle est bien sensible aux variations de la composition du mélange.

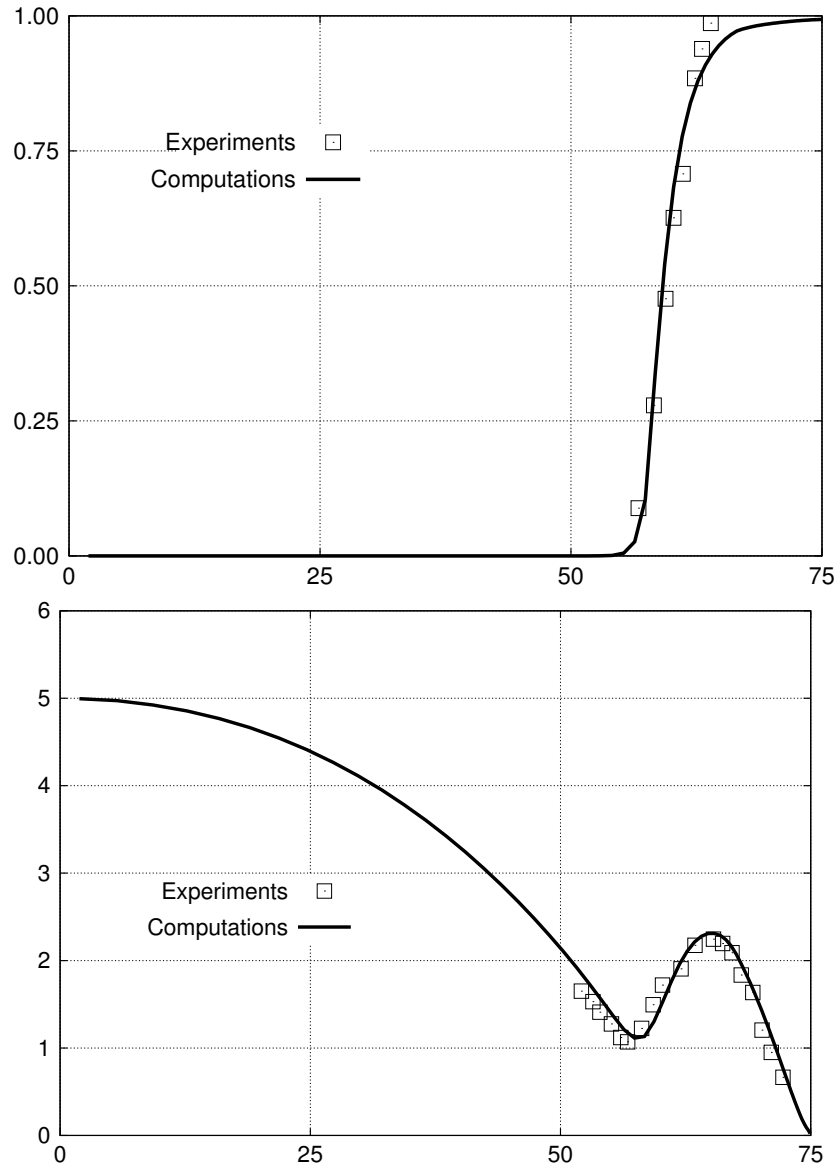


FIGURE 6.4 – En haut : comparaison du profil axial de la variable progrès moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23]. En bas : comparaison du profil axial de la vitesse moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23].

6.4 Impact de l'épaisseur de *leading edge*

Avant de considérer l'influence de l'épaisseur du *leading edge* sur les résultats numériques, on considère la figure 6.6 qui représente une comparaison des résultats de référence (voir figure 6.4) avec les résultats issus d'un calcul conduit avec $c_{le} = 0$ et $c_{te} = 0$. Il met en évidence l'influence du *leading edge* et du *trailing edge* sur les résultats numériques.

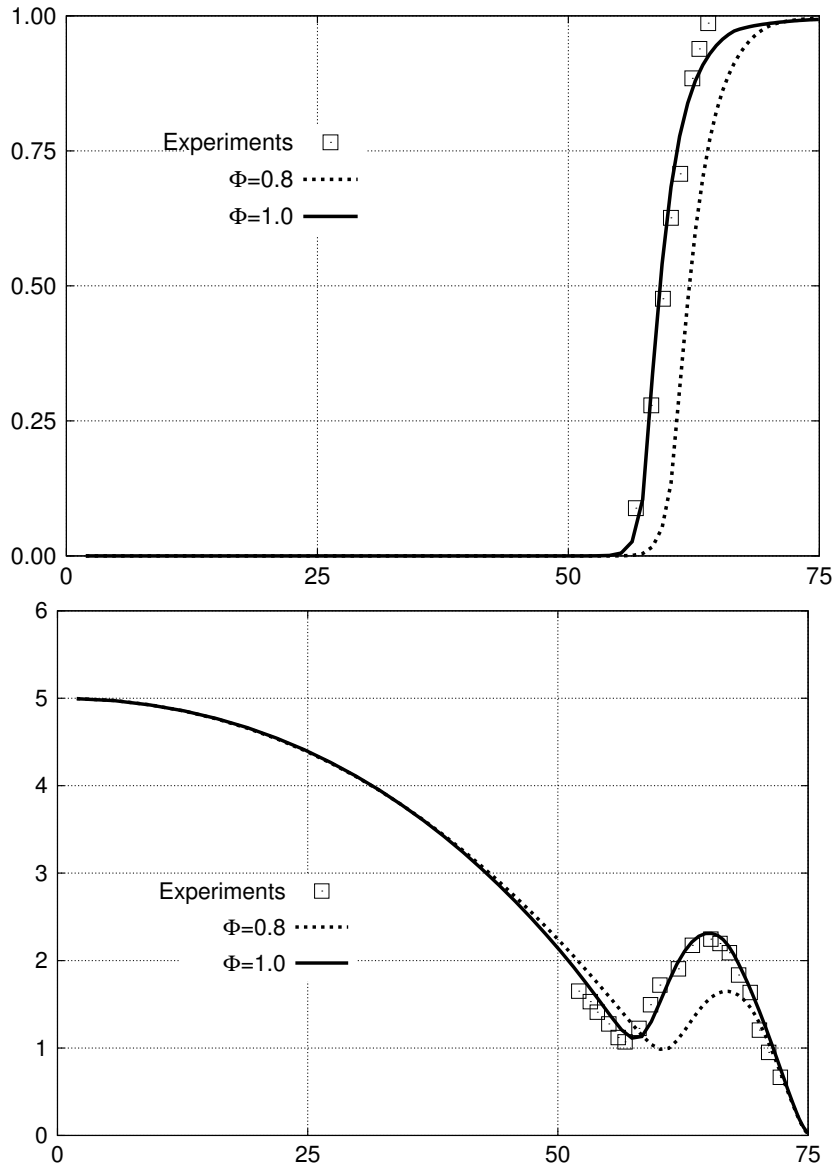


FIGURE 6.5 – En haut : comparaison du profil axial de la variable progrès moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23]. En bas : comparaison du profil axial de la vitesse moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23].

Un paramètre susceptible d'être critique pour la fermeture proposée pour le taux de réaction chimique est la valeur de constante κ qui apparaît dans l'expression (6.5). La dépendance explicite de l'épaisseur du *leading edge* à la valeur de κ est mise en évidence dans l'expression de c_{le} (voir l'équation (6.5)). La figure 6.7 représente les profils de la variable progrès moyenne et la vitesse moyenne axiale respectivement. Ces résultats sont

obtenus en utilisant trois valeurs distinctes de κ qui sont $\kappa = 0.05, 0.5$ et 5 . Cela donne une grande gamme de variations pour ce paramètre car la valeur maximale est 100 fois plus grande que la minimale. Les résultats obtenus montrent une certaine dépendance à la valeur utilisée pour la simulation numérique mais il faut reconnaître que le niveau de sensibilité n'est pas aussi critique qu'escompté.

6.5 Conclusion

L'application du modèle généralisé de combustion turbulente qui prend en compte l'épaisseur finie des flammelettes (présenté dans le chapitre 4) à une flamme stabilisée dans un écoulement divergent a démontré la capacité de ce formalisme à calculer un écoulement turbulent réactif prémélangé. Une nouvelle fermeture pour le taux de réaction chimique moyen associée à la description détaillée des différentes sous-couches du *flame brush* turbulent est donc appliquée dans les simulations numériques. Les résultats numériques obtenus avec les paramètres fixés sont en très bon accord avec les données expérimentales de Cho et al. [22]. Une analyse de sensibilité des paramètres principaux a été réalisée pour tester leur possible influence sur le comportement du calcul numérique. Enfin, il serait souhaitable de procéder à d'autres comparaisons avec des données expérimentales pour confirmer de façon plus définitive le bon comportement du modèle proposé.

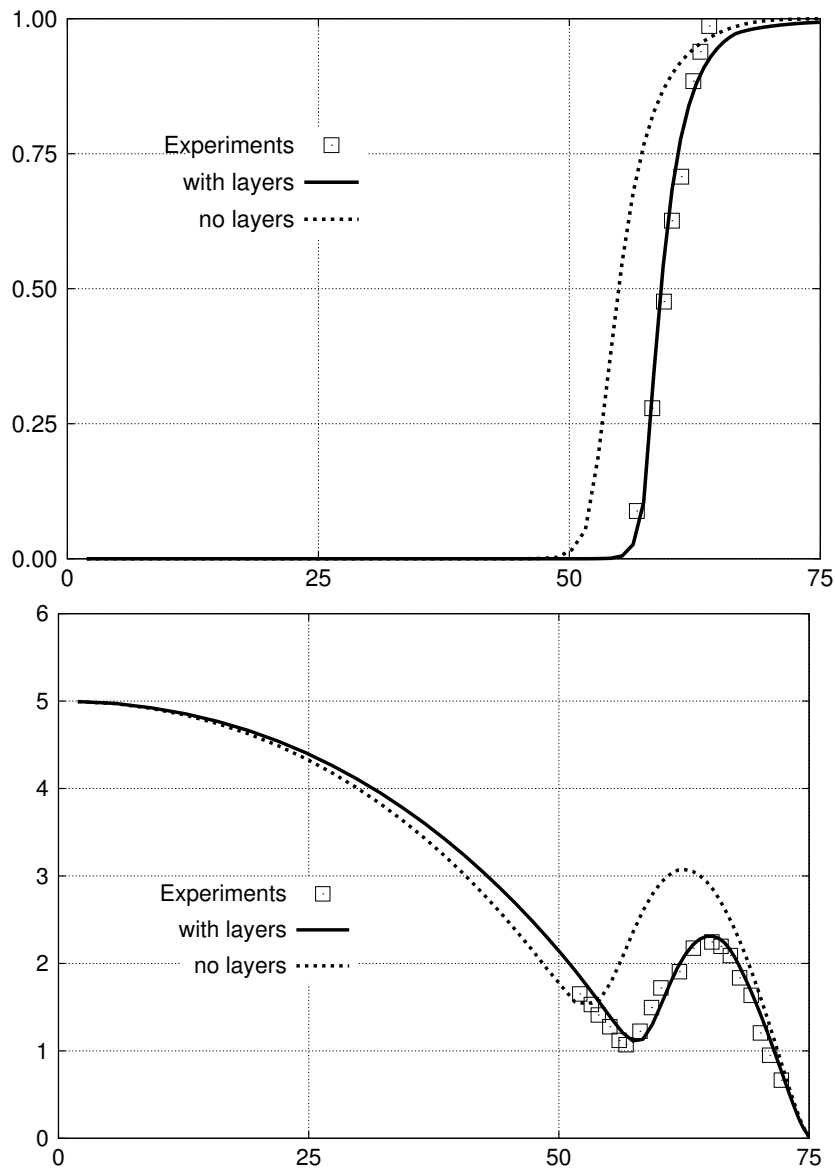


FIGURE 6.6 – En haut : comparaison du profil axial de la variable progrès moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23]. En bas : comparaison du profil axial de la vitesse moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23]. Les calculs ont été effectués par considérant la description de *flame brush* multicouche (ligne continue) ou en forçant c_{le} et c_{te} à zero et l'unité respectivement (ligne pointillé)

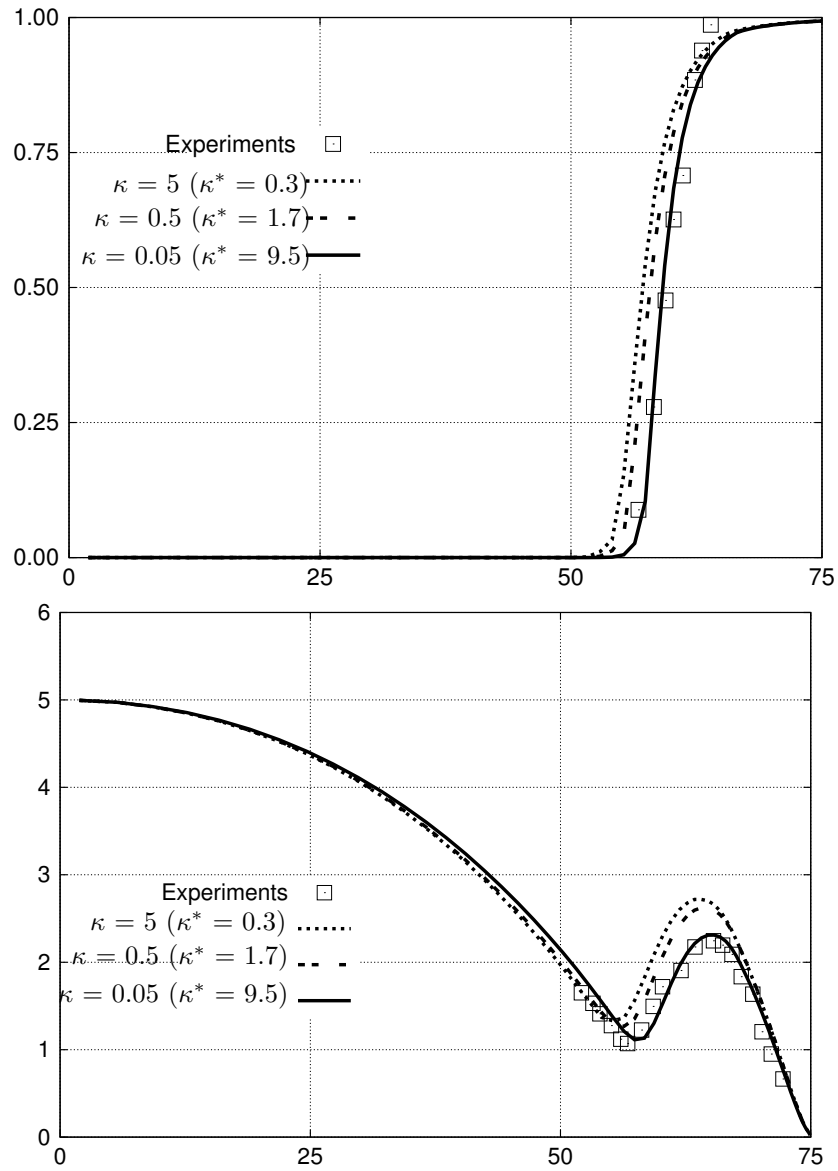


FIGURE 6.7 – Sensibilité des résultats numériques aux variations du paramètre κ . En haut : comparaison du profil axial de la variable progrès moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23]. En bas : comparaison du profil axial de la vitesse moyenne avec les données expérimentales de Cho et al. [23].

Conclusion et Perspectives

Les travaux présentés dans ce manuscrit de thèse sont consacrés à la modélisation et simulation numérique de la combustion turbulente prémélangée. Le modèle généralisé proposé dans cette étude est basé sur une PDF présumée de la variable d'avancement qui prend en compte l'épaisseur finie des flammelettes. Ce modèle a permis d'étendre l'analyse théorique des structures de flamme turbulente. Une description détaillée de la structure de flamme turbulente, qui comporte différentes sous-couches avec leurs épaisseurs dans l'espace des compositions, a été présentée. Ces épaisseurs ne dépendent que des valeurs du nombre de Reynolds turbulent et du nombre de Karlovitz. Le profil d'évolution du taux de ségrégation obtenu à la traversée du *flame brush* est en bon accord qualitatif avec celui issu de bases de données DNS [60, 69]. Pour des valeurs infiniment grandes du nombre de Zeldovich, l'introduction d'une fonction de Lambert permet d'obtenir analytiquement une transition continue entre le *leading edge* et la couche intermittente du taux de ségrégation.

Compte tenu de la description de la structure de flamme turbulente et du concept de flammelette d'épaisseur finie, l'évolution du flux turbulent est bien évaluée au *leading edge* où un changement de signe se produit. Nous pouvons conclure que (i) le flux turbulent adimensionné est relié au taux de ségrégation et (ii) ce flux change de signe à une distance du bord de gaz frais qui dépend du nombre de Bray. Pour une valeur suffisamment grande de N_B , la zone de diffusion gradient n'existe plus. Il est important aussi de noter qu'on peut déterminer l'évolution du flux à partir de la seule connaissance des nombres sans dimension de Reynolds, de Karlovitz et de Bray

Dans les cas des études de flammes monodimensionnelles, nous avons retenu une approche théorique pour analyser les propriétés propagatives du front de flamme. Cette approche est validée par la résolution de l'équation de transport de la variable d'avance-

ment en utilisant un changement de variable conduisant à un système d'équations de type BVP. Dans le cas de la diffusion gradient et d'un taux de réaction chimique associé à un modèle de type $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$, la flamme se propage à une vitesse constante qui est uniquement fonction de la valeur du coefficient de diffusion turbulente et de la pente en point d'origine du taux de réaction chimique. Dès que la diffusion à contre-gradient est pris en compte, la vitesse de propagation dépend aussi du nombre de Bray.

Deux expressions du taux de réaction chimique moyen sont proposées. Elles permettent de restituer le passage d'une zone de réaction laminaire à une zone des flammelettes via l'évolution du taux de ségrégation. Elles sont validées par le calcul numérique de la flamme en V. Le taux de ségrégation est modélisé par deux expressions algébriques simples. La deuxième résulte du concept des flammelettes d'épaisseur finie. Nous avons montré que la vitesse de propagation obtenue du côté des gaz frais de la flamme en V est en bon accord avec celle issue de l'analyse des flammes monodimensionnelles.

Les calculs numériques d'une flamme impactante s'appuient quant à eux sur l'expression du taux de réaction chimique moyen modélisée par la description des différentes sous-couches de la structure de flamme turbulente. Nous pouvons conclure que l'utilisation du modèle de fermeture généralisée a notablement amélioré l'adaptation du calcul numérique dans la zone de flamme.

En ce qui concerne les perspectives, dans la continuité de l'analyse consacré au flux turbulent scalaire, le flux de la quantité de mouvement pourrait être modélisé de la même manière en utilisant le modèle généralisé de la PDF. Il y a un certain nombre d'hypothèses retenues pour analyser et implanter ce modèle dans des calculs numériques, e.g. $\gamma_c \sim \gamma_{le} \sim \gamma_{te}$. Une réduction de ces hypothèses pour les futurs travaux est nécessaire. On peut aussi considérer une autre échelle, plus cohérent, retenue l'échelle caractéristique des "flammelettes turbulentes" l_x . Rappelons que cette échelle correspond à l'échelle de Kolmogorov dans ce manuscrit. Une étude sur l'évolution de la variance et du flux turbulent au *trailing edge* doit aussi être considérée pour mener à bien la description complète de la structure du *flame brush*. Ce modèle peut encore être validé sur des configurations expérimentales de référence différentes (bec Bunsen, flammes stabilisées derrière un obstacle). Enfin, les modèles obtenus pour le taux de réaction chimique moyen et le flux turbulent scalaire peuvent aussi être utilisés pour étudier la propriété propagative des

flammes turbulentes monodimensionnelles.

Bibliographie

- [1] ALDUSHIN, A.P., S.I. KHUDYAEV, Y.B. ZELDOVICH (1981), "Flame propagation in the reacting gaseous mixture", *Archivum Combustion*, 1 :9-21
- [2] ARCHAMBEAU, F., N. NEHITOUA, M. SAKIZ (2004), "Code saturne : A finite volume code for turbulent flows", *Int. J. Finite Volumes*, vol 1 voir aussi : [http ://rd.edf.com/72494i/Accueil-fr/Recherche-et-Developpement/Pour-la-communaute-scientifique/Telechargements/Code-Saturne.html](http://rd.edf.com/72494i/Accueil-fr/Recherche-et-Developpement/Pour-la-communaute-scientifique/Telechargements/Code-Saturne.html)
- [3] BAILLY, C., G. COMTE-BELLOT (2003), "Turbulence", *CNRS Editions*
- [4] BARRÈRE, M. (1974), "Modèles de combustion", *Revue générale de thermique*, 148 :295-308
- [5] BORGHI, R. (1984), "Mise au point sur la structure des flammes turbulentes", *J. Chimie Phys.*, 81(6) :361-370
- [6] BORGHI, R. (1985), "On the structure and morphology of turbulent premixed flames", *Recent Advances in Aerospace Sci.*, C. Casci, Ed., Plenum Publishing Corporation
- [7] BORGHI, R., M. DESTRIAU (1998), "Combustion and flames, chemical and physical principles", *Editions TECHNIP*
- [8] BORGHI, R., M. CHAMPION (2000), "Modélisation et théorie des flammes", *Editions TECHNIP*
- [9] BOUSSINESQ, J. (1877), "Essai sur la théorie des eaux courantes", *Mémoire, Académie des Siences, Paris*, 23(1) :252-260
- [10] BOWMAN, C. T., R.K. HANSON, W.C. GARDINER, V. FRENKLACH, M. LIS-
SIANSKI, M. GOLDENBERG, G.P. SMITH, D.R. CROSLEY, D.M. GOLDEN

- (1877), "An optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion and no formation and reburning", *Tech. Rep. GRI-97/0020*, Gas Research Institute, Chicago IL.
- [11] BRAY, K.N.C. (1980), "Turbulent flows with premixed reactants in turbulent reacting flows", *Topics in applied physics*, Springer Verlag, p.115
- [12] BRAY, K.N.C (1995), "Turbulent Reactive Flows", 2^e éd. (P.A. Libby et F.A. Williams, Eds) Academic Press
- [13] BRAY, K.N.C., M. CHAMPION, P.A. LIBBY (1991), "Premixed flames in stagnating turbulence. Part I : The general formulaiton for counterflowing streams and gradient models for turbulent transport", *Combustion and Flame*, 84 :391-410
- [14] BRAY, K.N.C., P.A. LIBBY (1994), "Recent developments in the BML model of premixed turbulent combustion", *Turbulent Reactive Flows*, éd. (P.A. Libby et F.A. Williams, Eds) Academic Press, 115-147
- [15] BRAY, K.N.C., J.B. MOSS (1977), "A unified statistical model of the premixed turbulent flames", *Acta Astronautica*, 4 :291-319
- [16] BRAY, K.N.C, P.A. LIBBY, G. MASUYA, J.B. MOSS (1981), "Turbulence production in premixed turbulent flames", *Combust. Sci. Technol*, 25 :127-140
- [17] BRAY, K.N.C, P.A. LIBBY, J.B. MOSS (1985), "Unified modeling approach for premixed turbulent combustion part I : General formulation", *Combust. Flame*, 61 :87-102
- [18] BRAY, K.N.C., M. CHAMPION, P.A. LIBBY (2000), "Premixed flames in stagnating turbulence. Part IV : A new theory for Reynolds stresses and Reynolds fluxes applied to impinging flows", *Combustion and Flame*, 120 :1-18
- [19] BRAY, K.N.C., M. CHAMPION, P.A. LIBBY, N. SWAMINATHAN (2006), "Finite rate chemistry and presumed PDF models for premixed turbulent combustion", *Combustion and Flame*, 146 :665-673
- [20] BUCKMASTER, J.D., G.S.S. LUDFORD (1982), "Theory of Laminar Flames (1st ed.)", *Cambridge University Press*
-

-
- [21] CHAKRABORTY, N., A.N. LIPATNIKOV (2011), "Statistics of conditional fluid velocity in the corrugated flamelets regime of turbulent premixed combustion : A Direct Numerical Simulation Study", *Journal of Combustion*, vol 2011
- [22] CHO, P., C. LAW, R.K. CHENG, I. SHEPHERD (1989), "Velocity and scalar fields of turbulent premixed flames in a stagnation flow", *Proc. Combust. Inst.*, 22 :739-745
- [23] CHO, P., C. LAW, J.R. HERTZBERG, R.K. CHENG (1988), "Structure and propagation of turbulent premixed flames stabilized in a stagnation flow", *Proc. Combust. Inst.*, 21 :1493-1499
- [24] CLAVIN, P., A. LIÑÁN (1984), "Theory of gaseous combustion", *Nonequilibrium Cooperative Phenomena in Physics and Related Fields*, vol 16, series B :291-338
- [25] CORLESS, R.M., G.H. GONNET, D.E.G. HARE, D.J. JEFFREY, D.E. KNUTH (1996), "On the Lambert W function", *Adv. Comput. Math.*, 5 :329-359
- [26] CORVELLEC, C. (1998), "Etude numérique et analytique des caractéristiques propagatives d'une zone de combustion se développant au sein d'un écoulement turbulent prémélangé modélisée par une approche de type "flammelette"", *Thèse de Doctorat*, Université de Poitiers
- [27] CORVELLEC, C., P. BRUEL, V.A. SABEL'NIKOV (2000), "Turbulent premixed flames in the flamelet regime : burning velocity spectral properties in the presence of countergradient diffusion", *Combustion and Flame*, 120 :585-588
- [28] DALY, B.J., F.H. HARLOW (1970), "Transport equations in turbulence", *Phys. Fluids*, 13 :2634-2649
- [29] DAMKÖHLER, G. (1940), "Influence of turbulence on flame velocity in gaseous mixtures" *ZH Elektrochem.*, 46 :601
- [30] DEGARDIN, O., B. RENOU, A.M. BOUKHALFA (2006), "Simultaneous measurement of temperature and fuel mole fraction using acetone planar induced fluorescence and rayleigh scattering in stratified flames" *Experiments in Fluids*, 40 :452-463
- [31] DJENIDI, L., R.A. ANTONIA (1997), "Modeling of the Reynolds stress transport equation", *AIAA J.*, 35(3) :450-455
-

-
- [32] DONG, H.Q., V. ROBIN, A. MURA, M. CHAMPION (2013), "Analysis of algebraic closures of the mean scalar dissipation rate of the progress variable applied to stagnating turbulent flames", *Flow Turbul. Combust.*, 90 :301-323
- [33] EBERT, U., W.V. SARLOOS (2000), "Front propagation into unstable states : Universal algebraic convergence towards uniformly pulled fronts", *Physica D*, 146 :1-99
- [34] FAVRE, A., L.S.G. KOVASZNAY, R. DUMAS, M. COANTIC (1976), "La turbulence en mécanique des fluides", *Gauthier- Villars*
- [35] GALIZZI, C. (2003), "Etude expérimentale du développement d'une flamme oblique prémélangée dans un écoulement stratifié", *Thèse de Doctorat*, Université de Lyon
- [36] GUO, H., B. TAYEBI, C. GALIZZI, D. ESCUDIÉ (2010), "Burning rates and surface characteristics of hydrogen-enriched turbulent lean premixed methane-air flames", *International Journal of Hydrogen Energy*, 35 :11342-11348
- [37] HAKIM, V. (1998), "Asymptotic techniques in nonlinear problems : some illustrative examples", *Hydronamics and nonlinear instabilities*, editors C. Godrèche et P. Manneville; ed. Cambridge University Press, pp.295-386
- [38] HALLBACK, M., A.V. JOHANSSON, A.D. BURDEN (1996), "The basic of turbulence modelling", *Turbulence and Transition Modelling*, Kluwer Academic Publishers 81-154
- [39] HINZE, J.O. (1975), "Turbulence", *McGraw-Hill*
- [40] IM, J.H., K.J. HUH, S. NISHIKI, T. HASEGAWA (2004), "Zone conditional assessment of flame-generated turbulence with DNS database of a turbulent premixed flame", *Combustion and Flame*, 137 :478-488
- [41] JONES, W.P., B.E. LAUNDER (1972), "The prediction of laminarization with a two equations model of turbulence", *International Journal of Heat Mass Transfer*, 15 :301-314
- [42] JOULIN, G., P. VIDAL (1998), "An introduction to the instability of flames, shocks, and detonations", *Hydronamics and nonlinear instabilities*, editors C. Godrèche et P. Manneville; ed. Cambridge University Press, pp.493-673
- [43] KHA, K.Q.N., C. LOSIER, V. ROBIN, A. MURA, M. CHAMPION (2016), "Relevance of two basic turbulent premixed combustion models for the numerical simula-
-

- tions of V-shaped flames”, *Combustion Science and Technology*, accepté à paraître 2016
- [44] KHA, K.Q.N., V. ROBIN, A. MURA, M. CHAMPION (2016), “Implications of laminar flame finite thickness on the structure of turbulent premixed flames”, *Journal of Fluid Mechanics*, 787 : 116-147
- [45] KLIMOV, A.M. (1963), *Zhur. Prikl. Mekh. i Tekhn. Fiz.*, 3 :49-58
- [46] KOLMOGOROV, A.N. (1941), “Dissipation of energy in a locally isotropic turbulence”, *Doklady Akad. Nauk SSSR*, 32, 141 (Traduction anglaise dans : *Am. Math. Soc. Translations* 1958, Series 2, Vol 8, p. 87, Providence R.I)
- [47] KOLMOGOROV, A.N., I. PETROVSKII et N. PISKUNOV (1937), “Study of the diffusion equation with growth of the quantity of matter and its application to a biology problem”, *Bull.MGU, Moscow State University, USSR*, Section A, Vol 1, n° 6
- [48] KUO, K.K. (1986), “Principles of combustion”, *John Wiley and sons*
- [49] LAUNDER, B.E. (1996), “Advanced turbulence models for industrial applications”, *Turbulence and Transition Modelling*, Kluwer Academic Publishers 193-231
- [50] LAUNDER, B.E., D.B. SPALDING (1974), “The numerical computation of turbulent flows”, *Comp. Meth. in Applied Mech. Eng.*, 3 :269-289
- [51] LAUNDER, B.E., G.J. REECE, W. RODI (1975), “Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure” *J. Fluid Mech.*, 68 :537-566
- [52] LEE, E., K.Y. HUH (2004), “Zone conditional modeling of premixed turbulent flames at high Damköhler number” *Combustion and Flame*, 138 :211-224
- [53] LIBBY, P.A., K.N.C. BRAY (1981), “Counter-gradient diffusion in premixed turbulent flames”, *AIAA Journal*, 19 :205-213
- [54] LIBBY, P.A., F.A. WILLIAMS (2000), “Presumed PDF analysis of partially premixed turbulent combustion”, *Combust. Sci. Technol.*, 161 :351-390
- [55] LIPATNIKOV, A.N., V.A. SABELNIKOV (2013), “Scalar flux at the leading edge of premixed turbulent flame brush”, *8th Mediterranean Combustion Symposium (MCS)*, Sep 2013, IZMIR, Turkey
-

-
- [56] MANTEL, T., R. BORCHI (1994), "A new model of premixed wrinkled flame based on a scalar dissipation equation" *Combustion and Flame*, 96 :443-457
- [57] MASUYA, G., P.A. LIBBY (1981), "Non gradient theory for oblique turbulent flame with premixed reactants", *AIAA J.*, 19 :1590-1599
- [58] MOSS, J.B., K.N.C. BRAY (1977), "A unified statistical model of the premixed turbulent flames", *Acta Astronautica*, 4 :291-319
- [59] MURA, A., V. ROBIN, M. CHAMPION (2007), "Modeling of scalar dissipation in partially premixed turbulent flames. Combustion and Flame" *Combustion and Flame*, 149 :217-224
- [60] MURA, A., K. TSUBOI, T. HASEGAWA (2008), "Modelling of the correlation between velocity and reactive scalar gradients in turbulent premixed flames based on DNS data" *Combustion Theory and Modelling*, 12 :4, 671-698
- [61] MURA, A., R. BORCHI (2003), "Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion" *Combustion and Flame*, 133 :193-196
- [62] MURA, A., F. GALZIN, R. BORCHI (2003), "A unified pdf-flamelet model for turbulent premixed combustion" *Combustion Science Technology*, 175 :1573-1609
- [63] MURA, A., V. ROBIN, K.Q.N. KHA, M. CHAMPION (2016), "A layered description of a premixed flame stabilized in stagnating turbulence" *Combustion Science and Technology*, 188(9) :1592-1618
- [64] MURRAY, J.D. (2002), "Mathematical Biology. 1. An Introduction (3rd ed." *Springer*, Berlin
- [65] NA, T.Y. (1979), "Computational methods in engineering : boundary value problems" *Academic Press*
- [66] NAOT, D., A. SHAVIT, M. WOLFSHTEIN (1970), "Interactions between components of the turbulent velocity correlation tensor due to pressure fluctuations", *Israel J. Technol.*, 8 :259-269
- [67] NAOT, D., A. SHAVIT, M. WOLFSHTEIN (1973), "Two point correlation model and the redistribution of Reynolds stress", *Phys. Fluids*, 16 :738-743
-

-
- [68] NICOLI, C., P. CLAVIN, A. LINÁN (1990), "Travelling waves in the cool flame regime", *Spatial inhomogeneities and transient behaviour in chemical kinetics*, editors Gray P., Nicolis G., Baras F., Borckmans P., Scott S.K; ed. Manchester University Press, pp. 317-334
- [69] NISHIKI, S. (2003), "DNS and modeling of turbulent premixed combustion", *Thèse de Doctorat*, Nagoya Institute of Technology (Japan)
- [70] PETERS, N. (1986), "Laminar flamelet concepts in turbulent combustion", 21st *Symp. (Int.) on Combust.*, 1231-1250, The Combustion Institute, Pittsburgh
- [71] PETERS, N. (1992), "A spectral closure for premixed turbulent combustion in the flamelet regime", *Journal of Fluid Mechanics*, 242 :611-629
- [72] POINSOT, T. (1996), "Using direct numerical simulation to understand premixed turbulent combustion", *In Twenty-sixth Symposium (International) on Combustion-The Combustion Institute*, 219-232
- [73] POINSOT, T., S. CANDEL, A. TROUVÉ (1996), "Direct numerical simulation of premixed turbulent combustion", *Prog. Energy Combust. Sci.*, 12 :531-576
- [74] POINSOT, T., D. VEYNANTE (2001), "Theoretical and numerical combustion", *R. T. Edwards, Inc.*
- [75] POPE, S.B., M.S. ANAND (1984), "Flamelet and distributed combustion in premixed turbulent flames", *Proc. Combust. Inst.*, 20 :403-410
- [76] PRANDTL, L. (1925), "Investigations on turbulent flow", *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik*, 5 :136
- [77] RIBERT, G., M. CHAMPION, O. GICQUEL, N. DARABIHA, D. VEYNANTE (2005), "Modeling nonadiabatic turbulent premixed reactive flows including tabulated chemistry" *Combustion and Flame*, 141(3) :271-280
- [78] ROBIN, V., A. MURA, M. CHAMPION, P. PILON (2006), "A multi Dirac presumed PDF model for turbulent reactive flows with variable equivalence ratio" *Combustion Science and Technology*, 178 :1843-1870
- [79] ROBIN, V., A. MURA, M. CHAMPION, O. DEGARDIN, B. RENOU, M. BOUKHALFA (2008), "Experimental and numerical analysis of stratified turbulent V-shaped flames" *Combustion and Flame*, 153 :288-315
-

-
- [80] ROBIN, V., A. MURA, M. CHAMPION (2011), "Direct and indirect thermal expansion effects in turbulent premixed flames" *Journal of Fluid Mechanics*, 689 :149-182
- [81] ROTTA, J. (1951), "Statistische theorie nichthomogener turbulenz", *Zeitschrift für physik*, 129(1) :547-572, 131(2) :51 :77
- [82] RUTLAND, C., R.S. CANT (1994), "Turbulent transport in premixed flame", *In : P. Moin, W.C. Reynolds editors. Studying turbulence using numerical databases*, Stanford CTR 75-94
- [83] SABELNIKOV, V.A., C. CORVELLEC, P. BRUEL (1998), "Analysis of the influence of cold front quenching on the turbulent burning velocity associated with an Eddy-Break-Up model", *Combustion and Flame*, 113 :492-497
- [84] SABELNIKOV, V.A., A.N. LIPATNIKOV (2011), "A simple model for evaluating conditioned velocities in premixed turbulent flames", *Combustion Science and Technology*, 183 :588-613
- [85] SABELNIKOV, V.A., P. BRUEL (2011), "Determination of the burning velocity domain of a statistically stationary turbulent premixed flame in presence of counter-gradient transport", *Journal of Combustion*, vol 2011 :1-7
- [86] SABELNIKOV, V.A., A.N. LIPATNIKOV (2013), "Transition from pulled to pushed premixed turbulent flames due to countergradient transport", *Combustion Theory and Modelling*, 17(6) :1154-1175
- [87] SABELNIKOV, V.A., A.N. LIPATNIKOV (2015), "Transition from pulled to pushed fronts in premixed turbulent combustion : Theoretical and numerical study", *Combustion and Flame*, 162 :2893-2903
- [88] SCHIESTEL, R. (1998), "Les écoulements turbulents", *modélisation et simulation*, 2^e éd., Hermes
- [89] SCHIESSER, W. (1991), "The numerical method of lines", *Academic Press*
- [90] SPHEPHERD, I.G., J.B. MOSS, K.N.C. BRAY (1982), "Turbulent transport in confined premixed flames", 19th *Symp. (Int.) on Combust.*, 423-431, The Combustion Institute, Pittsburgh
-

-
- [91] SPALDING, D.B. (1971), "Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames", 13th *Symp. (Int.) on Combust.*, 649-657, The Combustion Institute, Pittsburgh
- [92] TENNEKES, H., J.L. LUMLEY (1972), "A first course on turbulence", *MIT Press*, Cambridge MA
- [93] TROUVE, A., D. VEYNANTE, K.N.C. BRAY, T. MANTEL (1994), "The coupling between flame surface dynamics and species mass conservation in premixed turbulent combustion", *In : Center for Turbulence Research*, editor. Proceedings of the summer program, Stanford CTR 95-124
- [94] VEYNANTE, D., T. POINSOT (1997), "Reynolds averaged and large eddy simulation modeling for turbulent combustion", *Les Editions de Physique - Springer Verlag*, 5 :105-140
- [95] VEYNANTE, D., A. TROUVE, K.N.C. BRAY, T. MANTEL (1997), "Gradient and counter-gradient scalar transport in turbulent premixed flames", *Journal of Fluid Mechanics*, 332 :263-293
- [96] VEYNANTE, D., L. VERVISCH (2002), "Turbulent combustion modeling", *Prog. Energy Combust. Sci.*, 28 :193-266
- [97] WILLIAMS, F.A. (1985), "Combustion Theory (2nd ed.)", *Benjamin Cummings*
- [98] ZELDOVICH, Y.B., G.I. BARENBLATT, V.B. LIBROVICH, G.M. MAKHVILADZE (1985), "The Mathematical Theory of Combustion and Explosion", *Consultant Bureau*
- [99] ZELDOVICH, Y.B., D.A. FRANK-KAMENETSKII (1938), "A theory of thermal propagation of flame", *Acta Physicochimica U.R.S.S.*, 9 (2)
- [100] ZIMONT, V.L. (1979), "Theory of turbulent combustion of a homogeneous mixture at high Reynolds numbers", *Fiz Goreniya Vzryva*, 15(3) :23-32
-

Annexes

Annexe A

L'influence des paramètres initiaux sur la solution d'un *Boundary Value Problem* dans le calcul de *Mathematica*

Dans cette annexe, nous présentons les influences de paramètres initiaux sur la solution d'un *Boundary Value Problem* (BVP) ce que nous avons présenté dans la partie 3.2.2. Le système d'équations à résoudre est exprimé de la manière suivante :

$$\frac{dY}{d\tilde{c}} = 1 + \tau RY - E \frac{\tilde{\Omega}^*}{Y} \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{dE}{d\tilde{c}} = 0 \quad (\text{A.2})$$

où $Y = d\tilde{c}/d\xi$ et $E = D_t K / S_t^2$ sont deux variables à déterminer, E désigne la valeur propre (constante), le terme source $\tilde{\Omega}^* = \tilde{c}(1 - \tilde{c})$. Les deux conditions limites sont $Y(\tilde{c} = 0) = Y(\tilde{c} = 1) = 0$. Cependant, ce système d'équations est résolu numériquement dans un domaine $\tilde{c} \in [\tilde{c}^*, 1 - \tilde{c}^*]$ en utilisant le logiciel *Mathematica*. La quantité très faible $\tilde{c}^*$ a été introduit aussi dans la partie 3.2.2. Ainsi, les deux conditions limites sont ré-écrites correspondant la zone de calcul $[\tilde{c}^*, 1 - \tilde{c}^*]$ de la façon suivante :

$$Y(\tilde{c} = \tilde{c}^*) = 0.5 \tilde{c}^* \quad (\text{A.3})$$

$$Y(\tilde{c} = 1 - \tilde{c}^*) = \frac{1}{2}[-1 + (1 + 4E)^{1/2}](1 - \tilde{c}^*) \quad (\text{A.4})$$

La détermination des coefficients de la pente des valeurs limites fait par utilisant l'analyse linéaire du côté des gaz frais et du côté des gaz brûlés a été présentée dans la partie 3.2.1. Parce que la valeur propre E se présente dans la condition limite du côté des gaz brûlés, on a besoin donc d'une valeur initiale de E notant E_{ini} pour fonctionner le calcul. Alors, l'objectif de cette annexe est de considérer les influences de $\tilde{c}^*$ et E_{ini} sur la solution numérique.

A.1 Influence de la coupure $\tilde{c}^*$ sur la solution numérique

Selon la discussion dans la partie 3.2.2, la vitesse de propagation va converger la vitesse minimale du spectre de vitesse obtenu par l'analyse linéaire du côté des gaz frais. Cette vitesse minimale désigné la vitesse de régime KPP S_{KPP} , correspond de la valeur propre E_{KPP} qui égale à 0.25. Pour considérer l'influence de la coupure $\tilde{c}^*$, on fixe la valeur propre initiale égale à 0.25. Le taux d'expansion est choisi égale à 6.5. Nous allons effectuer maintenant avec les valeurs de coupure sont respectivement $\tilde{c}^* = 10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-6}, 10^{-7}, 10^{-8}, 10^{-10}, 10^{-11}$. Si la borne inférieure du domaine de calcul est de $\tilde{c}^* = 10^{-11}$ la valeur propre obtenue $E = 0.2501$ qui est très proche de la valeur critère 0.25. La solution obtenue avec la coupure $\tilde{c}^* = 10^{-11}$ est donc considérée comme la solution critère obtenue avec $\tilde{c}^* = 0$. Les différents profils tracés sur la figure A.1 montrent que la fonction $Y(\tilde{c})$ tend vers la forme critère (la courbe discontinue) lorsque $\tilde{c}^*$ tend vers zero. Ainsi, tous les calculs dans l'espace $(\tilde{c}, Y(\tilde{c}))$ dans ce mémoire sont calculés avec la coupure $\tilde{c}^* = 10^{-11}$.

L'évolution de la valeur propre en fonction de la coupure est présentée sur la figure A.2. La vitesse de propagation tend vers donc $2\sqrt{D_t K}$ lorsque E tend vers 0.25.

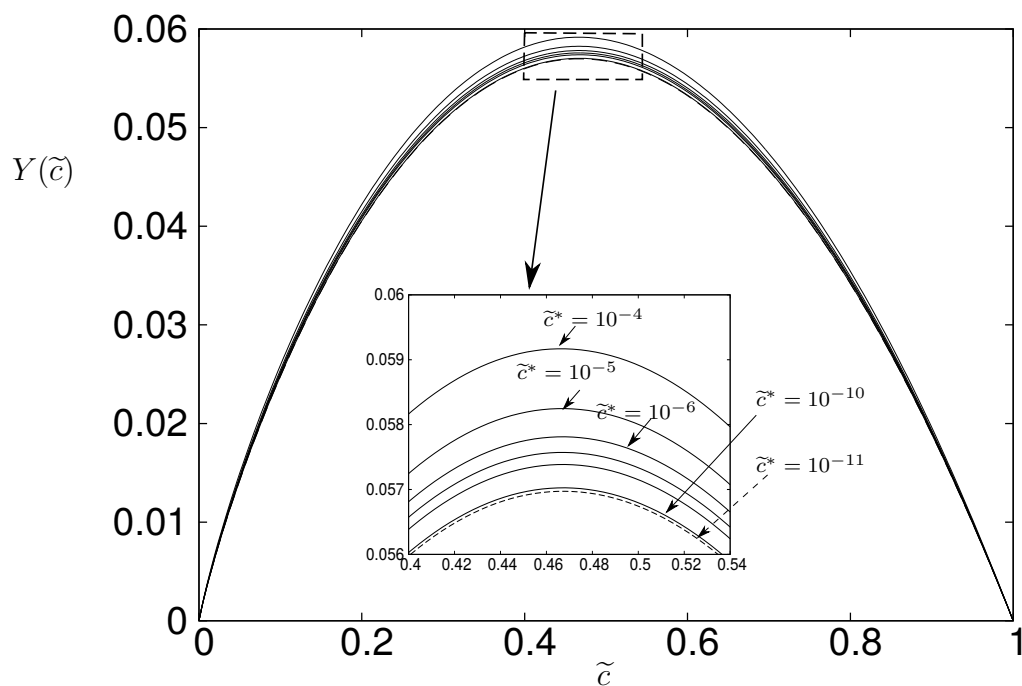


FIGURE A.1 – Evolution des profils $Y(\tilde{c})$ obtenus numériquement pour un terme source $\tilde{c}(1 - \tilde{c})$ en fonction de la coupure $\tilde{c}^*$. La courbe discontinue correspond de la coupure $\tilde{c}^* = 10^{-11}$

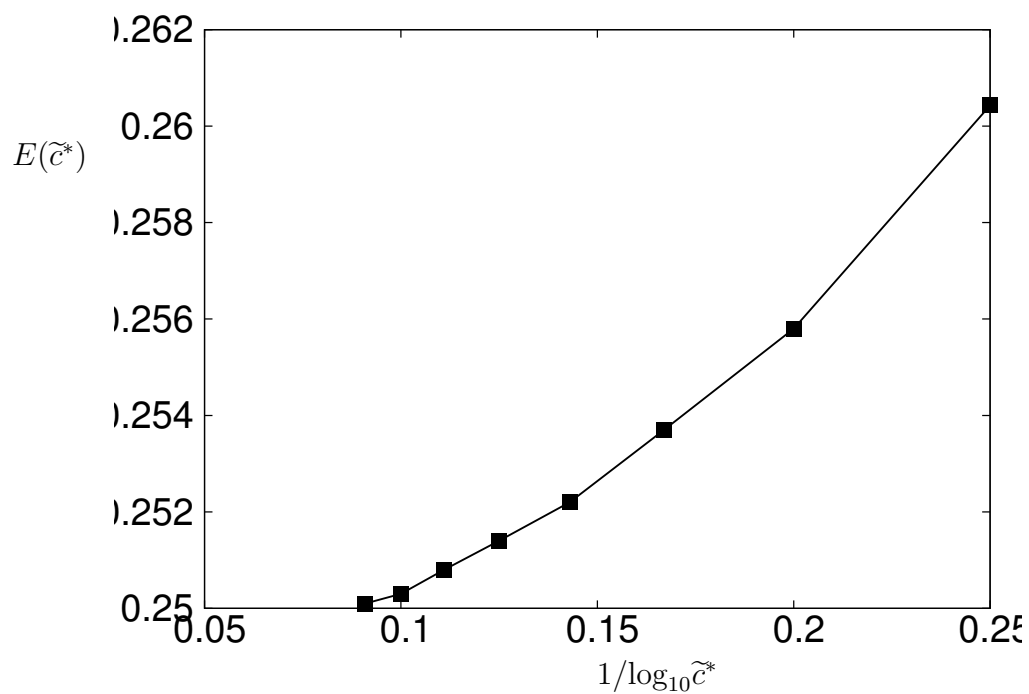


FIGURE A.2 – Variation de la valeur propre E en fonction de la coupure $\tilde{c}^*$.

A.2 Influence de la valeur propre initiale E_{ini} sur la solution numérique

La coupure est maintenant fixée à $\tilde{c}^* = 10^{-11}$. Les calculs sont effectués dans le domaine $[\tilde{c}^*, 1 - \tilde{c}^*]$ avec la valeur initiale E_{ini} sont données autour la valeur critère 0.25, les valeurs propres obtenues numériquement sont présentées dans le tableau suivant.

E_{ini}	0.2	0.24	0.245	0.25	0.255	0.26	0.3	0.5	1
E	0.198	0.239	0.245	0.2501	0.254	0.257	0.257	0.257	0,257

TABLE A.1 – Valeur propre E obtenue numériquement avec sa valeur initiale E_{ini} .

Nous voyons que lorsque $E_{ini} < 0.26$, la valeur numérique tend vers la valeur initiale et lorsque $E_{ini} > 0.26$ la valeur numérique tend vers toujours 0.257. Si E_{ini} est plus grande que la valeur critère, e.g., $E_{ini} = 5$, le calcul n'est pas fonctionné. La meilleure valeur initiale est donc choisie égale à 0.25 pour donner la valeur numérique plus proche la valeur analytique.

En conclusion, la valeur de coupure et la valeur propre initiale sont choisis égale à $\tilde{c}^* = 10^{-11}$ et $E_{ini} = 0.25$ respectivement pour tous les calculs du système d'équations (A.1) et (A.2).

Annexe B

Détail de la simplification du flux turbulent

Cette annexe est consacrée à la simplification détaillée des expressions du flux turbulent présenté dans la section 4.4. On considère le flux turbulent au *leading edge* et la couche intermittente.

B.1 Au *leading edge* : $0 < \chi < 1$

L'expression (4.91) peut s'exprimer de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
 \widetilde{v''c''} &= \widetilde{vc} - \widetilde{v}\widetilde{c} = (1 - \gamma_{le})\bar{v}_u c_{min} - (1 - \gamma_{le})^2 \bar{v}_u c_{min} + \gamma_{le} \hat{I}_f^{vc} - \gamma_{le}^2 \hat{I}_f^v \hat{I}_1 \\
 &\quad - \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})\bar{v}_u \hat{I}_f^v - \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})\hat{I}_f^v c_{min} \\
 &= \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})\bar{v}_u c_{min} + \gamma_{le} \hat{I}_f^v \hat{I}_1 + \gamma_{le} \tau S_L (\hat{I}_2 - \hat{I}_1^2) - \gamma_{le}^2 \hat{I}_f^v \hat{I}_1 \\
 &\quad - \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})\bar{v}_u \hat{I}_f^v - \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})\hat{I}_f^v c_{min} \\
 &= \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})(\bar{v}_u c_{min} + \hat{I}_f^v \hat{I}_1 - \bar{v}_u \hat{I}_f^v - \hat{I}_f^v c_{min}) + \gamma_{le} \tau S_L (\hat{I}_2 - \hat{I}_1^2) \\
 &= \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})(\hat{I}_f^v - \bar{v}_u)(\hat{I}_1 - c_{min}) + \gamma_{le} \tau S_L (\hat{I}_2 - \hat{I}_1^2) \\
 &= \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})(\bar{v}_{su} - \bar{v}_u)(\hat{I}_1 - c_{min}) + \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})\tau S_L (\hat{I}_1 - c_{min})^2 \\
 &\quad + \gamma_{le} \tau S_L (\hat{I}_2 - \hat{I}_1^2)
 \end{aligned} \tag{B.1}$$

L'expression (4.92) s'écrit de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
\widetilde{c''^2} &= (1 - \gamma_{le})c_{min}^2 + \gamma_{le}\hat{I}_2 - \widetilde{c}^2 \\
&= (1 - \gamma_{le})c_{min}^2 + \gamma_{le}\hat{I}_2 - (1 - \gamma_{le})^2c_{min}^2 - \gamma_{le}^2\hat{I}_1^2 - 2\gamma_{le}(1 - \gamma_{le})c_{min}\hat{I}_1 \\
&= \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})c_{min}^2 - 2\gamma_{le}(1 - \gamma_{le})c_{min}\hat{I}_1 + \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})\hat{I}_1^2 + \gamma_{le}(\hat{I}_2 - \hat{I}_1^2) \\
&= \gamma_{le}(1 - \gamma_{le})(\hat{I}_1 - c_{min})^2 + \gamma_{le}(\hat{I}_2 - \hat{I}_1^2)
\end{aligned} \tag{B.2}$$

B.2 A la couche intermittente : $1 < \chi < \infty$

L'expression (4.96) s'exprime :

$$\begin{aligned}
\widetilde{v''c''} &= \widetilde{v}\widetilde{c} - \widetilde{v}\widetilde{c} = \alpha_c\bar{v}_uc_{min} + \beta_c\bar{v}_bc_{max} + \gamma_cI_f^{vc} - (\alpha_c\bar{v}_u + \beta_c\bar{v}_b + \gamma_cI_f^v)\widetilde{c} \\
&= -\alpha_c\bar{v}_u(\widetilde{c} - c_{min}) + \beta_c\bar{v}_b(c_{max} - \widetilde{c}) + \gamma_cI_f^{vc} - \gamma_cI_f^v\widetilde{c} \\
&= -\alpha_c\bar{v}_u(\widetilde{c} - c_{min}) + \beta_c\bar{v}_b(c_{max} - \widetilde{c}) + \gamma_c[I_f^vI_1 + \tau S_L(I_2 - I_1^2)] - \gamma_cI_f^v\widetilde{c} \\
&= -\alpha_c\bar{v}_u(\widetilde{c} - c_{min}) + \beta_c\bar{v}_b(c_{max} - \widetilde{c}) + I_f^v(\gamma_cI_1 - \gamma_c\widetilde{c}) + \gamma_c\tau S_L(I_2 - I_1^2) \\
&= -\alpha_c\bar{v}_u(\widetilde{c} - c_{min}) + \beta_c\bar{v}_b(c_{max} - \widetilde{c}) + I_f^v(\widetilde{c} - \alpha_cc_{min} - \beta_cc_{max} - \gamma_c\widetilde{c}) \\
&\quad + \gamma_c\tau S_L(I_2 - I_1^2) \\
&= -\alpha_c\bar{v}_u(\widetilde{c} - c_{min}) + \beta_c\bar{v}_b(c_{max} - \widetilde{c}) + I_f^v(\alpha_c\widetilde{c} + \beta_c\widetilde{c} - \alpha_cc_{min} - \beta_cc_{max}) \\
&\quad + \gamma_c\tau S_L(I_2 - I_1^2) \\
&= \alpha_c(\widetilde{c} - c_{min})(I_f^v - \bar{v}_u) + \beta_c(c_{max} - \widetilde{c})(\bar{v}_b - I_f^v) + \gamma_c\tau S_L(I_2 - I_1^2) \\
&= \alpha_c(\widetilde{c} - c_{min})[\bar{v}_{su} - \bar{v}_u + \tau S_L(I_1 - c_{min})] + \beta_c(c_{max} - \widetilde{c})\tau S_L(c_{max} - I_1) \\
&\quad + \gamma_c\tau S_L(I_2 - I_1^2) \\
&= \tau S_L[\alpha_c(\widetilde{c} - c_{min})(-1/N_B + I_1 - c_{min}) + \beta_c(c_{max} - \widetilde{c})(c_{max} - I_1) + \gamma_c(I_2 - I_1^2)]
\end{aligned} \tag{B.3}$$

Finalement, l'expression (4.99) s'écrit :

$$\begin{aligned}
\widetilde{c''^2} &= \alpha_c c_{min}^2 + \beta_c c_{max}^2 + \gamma_c I_2 - \widetilde{c}^2 \\
&= \alpha_c c_{min}^2 + \beta_c c_{max}^2 + \gamma_c I_2 - \alpha_c^2 c_{min}^2 - \beta_c^2 c_{max}^2 - \gamma_c^2 I_1^2 \\
&\quad - 2\alpha_c \beta_c c_{min} c_{max} - 2\alpha_c \gamma_c c_{min} I_1 - 2\beta_c \gamma_c c_{max} I_1 \\
&= \alpha_c (\beta_c + \gamma_c) c_{min}^2 + \beta_c (\alpha_c + \gamma_c) c_{max}^2 + \gamma_c (\alpha_c + \beta_c) I_1^2 + \gamma_c (I_2 - I_1^2) \\
&\quad - 2\alpha_c \beta_c c_{min} c_{max} - 2\alpha_c \gamma_c c_{min} I_1 - 2\beta_c \gamma_c c_{max} I_1 \\
&= \alpha_c \beta_c (c_{max} - c_{min})^2 + \alpha_c \gamma_c (I_1 - c_{min})^2 + \beta_c \gamma_c (c_{max} - I_1)^2 + \gamma_c (I_2 - I_1^2) \quad (B.4)
\end{aligned}$$

Annexe C

Implications of laminar flame finite
thickness on the structure of
turbulent premixed flames

J. Fluid Mech. (2016), vol. 787, pp. 116–147. © Cambridge University Press 2015
doi:10.1017/jfm.2015.660

116

Implications of laminar flame finite thickness on the structure of turbulent premixed flames

Kim Q. N. Kha¹, Vincent Robin¹, Arnaud Mura^{1,†} and Michel Champion¹

¹Institut Pprime UPR 3346 CNRS - ENSMA - 86961 Futuroscope, France

(Received 11 April 2015; revised 11 September 2015; accepted 3 November 2015)

A layered description of the structure of turbulent flame brushes is provided for situations featuring large but finite values of the Damköhler number, which correspond to the wrinkled flame regime of turbulent premixed combustion. One special focus of this study is placed on the description of the leading edge of the turbulent flame brush, the role of which is known to be essential with respect to propagation, transport and stabilization issues. On the basis of rather simple and well-identified working hypotheses, the influence of slight increases in the Karlovitz number values is revealed. The phenomenology and associated statistics are also investigated analytically, which leads to a mathematical description of the leading edge internal structure. With respect to the progress variable statistics, i.e. probability density function, this leading edge can indeed be thought of as the inner part of a boundary layer where the influence of the finite thickness of laminar flamelets can no longer be neglected. From the proposed description, standard fast-chemistry closures, which are currently used to perform the numerical simulation of turbulent combustion, may easily be generalized to account for the finite-rate chemistry effects occurring in this sublayer, thus emphasizing the interest of the present analysis for turbulent combustion theory and modelling.

Key words: combustion, flames, reacting flows

1. Introduction

The theory of laminar flames and associated activation-energy asymptotics (Buckmaster & Ludford 1982; Williams 1985; Zel'dovich *et al.* 1985), which provides a precise description of premixed flame structures, is based on the strong nonlinearity of chemical reactions. As a result of this highly nonlinear behaviour, the flame structure features two distinct zones with markedly different characteristic scales: a preheat zone, corresponding to an equilibrium between convection and diffusion of chemical species and heat, and a reaction zone characterized by an equilibrium between molecular diffusion and reaction processes. An essential characteristic of activation-energy asymptotics (AEA) is to restrict the dimensions of the region in which chemical reaction is significant.

This flame theory cannot be readily extended to the consideration of turbulent reactive flows (Liñán & Williams 1993). The complexity of the physical mechanisms

[†] Email address for correspondence: arnaud.mura@ensma.fr

Annexe D

Relevance of two basic turbulent
premixed combustion models for the
numerical simulations of V-shaped
flames

COMBUSTION SCIENCE AND TECHNOLOGY
2016, VOL. 188, NOS. 11–12, 1878–1903
<http://dx.doi.org/10.1080/00102202.2016.1211866>



Relevance of Two Basic Turbulent Premixed Combustion Models for the Numerical Simulations of V-Shaped Flames

Kim Q. N. Kha, Cécile Losier, Vincent Robin, Arnaud Mura, and Michel Champion

Institut Pprime, UPR3346 CNRS, ISAE-ENSMA and University of Poitiers, Futuroscope, France

ABSTRACT

The present study is devoted to the analysis of basic turbulent premixed combustion closures applied to the numerical simulations of V-shaped flames. It is well known that an important parameter for the numerical simulation of such premixed turbulent flames is the description of the departure from the bimodal limit (thin flame limit), which is associated to the maximum value of the progress variable segregation rate, i.e., $S = 1$. The evolution of this segregation rate is often deduced from a modeled transport equation written for the progress variable variance. However, the closure of such a transport equation does involve many additional sub-models, which are related to the mean and variance progress variable fluxes and mean scalar dissipation rate of the progress variable variance. In the present work two original closures for the mean chemical rate are considered. Special emphasis is also placed on algebraic closures for S that circumvent the difficulty associated to the modeling of the second moment of the progress variable. In the first step of the analysis these closures are analyzed in the case of the propagation of a one-dimensional turbulent premixed flame brush. They are subsequently applied to the numerical simulation of premixed V-shaped flames that have been studied experimentally by Galizzi (2003) and by Degardin et al. (2006). It is found that these closures provide a satisfactory representation of the turbulent premixed flames.

ARTICLE HISTORY

Received 30 October 2015
Revised 11 April 2016
Accepted 11 April 2016

KEYWORDS

Algebraic closures; Flamelet regime; Premixed flame; Turbulent combustion; V-shaped flame

Introduction

There are many industrial devices in which energy conversion takes place through turbulent premixed flames. Gas turbines, turbojet engines, and spark-ignited (SI) reciprocating engines indeed offer standard examples of premixed turbulent combustion. Therefore, the understanding of premixed turbulent combustion has concentrated a large amount of research efforts over the years since the early works in the field, which date back to the 1940s (Damköhler, 1947; Shchelkin, 1943). The development of computational fluid dynamics (CFD) tools over the last decades allows their application to the numerical simulations of various industrial turbulent flows featuring realistic conditions and complex geometries, such as those discussed above. However, the physical phenomena involved in turbulent reactive flows display such a wide range of characteristic scales that the statistical, i.e., Reynolds Averaged Navier–Stokes (RANS), representation or the filtered, i.e., large eddy simulations (LES), description of these flows are still required to proceed with their numerical simulations.

CONTACT Vincent Robin Vincent.robin@ensma.fr ENSMA, Téléport 2, 1 Avenue Clément Ader, BP40109, Futuroscope Chasseneuil Cedex 86961, France.

Color versions of one or more of the figures in the article can be found online at www.tandfonline.com/gcst.

© 2016 Taylor & Francis

Combustion Science and Technology (2016)

DOI : <http://dx.doi.org/10.1080/00102202.2016.1211866>

Annexe E

A layered description of a premixed
flame stabilized in stagnating
turbulence

A Layered Description of a Premixed Flame Stabilized in Stagnating Turbulence

Arnaud Mura, Vincent Robin, Kim Q. N. Kha, and Michel Champion

Institut Pprime - UPR 3346 - CNRS - ISAE-ENSMA - Université de Poitiers, Futuroscope, France

ABSTRACT

In the thin-flame regime of turbulent premixed combustion, instantaneous progress variable gradients are essentially fixed by propagating flamelets. The laminar flamelet internal structure thus imposes, at least to some extent, the progress variable one-point one-time statistics, i.e., the progress variable PDF $P(c; x, t)$. In the present study a generalized presumed probability density function (PDF) shape is considered to account for possible departures from the thin-flame limit. The parameters that characterize this PDF shape depend on the ratio of the Kolmogorov length scale to laminar flame width. The corresponding framework may be associated to a layered description of the turbulent flame brush (TFB) with the thicknesses of the different sub-layers determined from the knowledge of both the Reynolds and Karlovitz numbers, Re_T and Ka . It incorporates boundary layers on both sides of the TFB, which are associated to the finite thickness of the local flamelets, i.e., small but finite values of the Karlovitz number. This description leads to a modeling proposal for premixed turbulent combustion. A tabulation is constructed based on canonical one-dimensional planar unstrained laminar premixed flame computations and the different quantities are tabulated as functions of Re_T and Ka . The final closure is applied to the numerical simulations of premixed flames stabilized in stagnating turbulence.

ARTICLE HISTORY

Received 13 October 2015
Revised 7 January 2016
Accepted 19 February 2016

KEYWORDS

Flame brush; Flamelet regime; Leading edge; Premixed flame; Stagnating turbulence; Turbulent combustion

Introduction

The development of computational fluid dynamics (CFD) tools over the last decades has allowed their current applications to the numerical simulations of various industrial turbulent flows featuring complex geometries and realistic conditions. However, the physical phenomena involved in turbulent reactive flows display such a wide range of characteristic scales that the statistical, i.e., Reynolds Averaged Navier–Stokes (RANS), representation or the filtered, i.e., large eddy simulations (LES), description of these flows are still required to proceed with their numerical simulations. The direct numerical simulation (DNS) of such reactive flows in complex geometry remains indeed unlikely in the foreseeable future. The use of LES may provide a satisfactory description of the large-scale turbulent dynamics at the price of important computational efforts and costs so that its practical use for engineering purposes still remains limited. Accordingly, RANS and U-RANS approaches remain the reference tools to proceed with the industrial design

CONTACT Arnaud Mura  arnaud.mura@ensma.fr  Institut Pprime, UPR 3346 CNRS, Université de Poitiers, ENSMA, Téléport 2-1, Avenue Clément Ader, Futuroscope 86961, France.

Color versions of one or more of the figures in the article can be found online at www.tandfonline.com/gcst.

Published with license by Taylor & Francis Group, LLC © Arnaud Mura, Vincent Robin, Kim Q. N. Kha, and Michel Champion

This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (<http://creativecommons.org/licenses/by/3.0/>), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Combustion Science and Technology (2016)

DOI : <http://dx.doi.org/10.1080/00102202.2016.1195822>