

Etude numérique du mélange de scalaires passifs et réactifs dans un PaSR et dans une Turbulence Homogène Isotrope

Nicolas Canton, Cécile Losier & Arnaud Mura

Centre National de la Recherche Scientifique
LCD UPR 9028 du CNRS, ENSMA Poitiers
Téléport 2, 1 Avenue Clément Ader, BP 40109
86961 Futuroscope Chasseneuil Cedex FRANCE
arnaud.mura@lcd.ensma.fr

Résumé :

L'équation de transport de la PDF (Probability Density Function) du scalaire est introduite pour le cas simplifié d'un écoulement homogène du point de vue statistique. Les différents termes qui régissent son évolution sont décrits puis le terme non fermé de diffusion conditionnelle, appelé aussi terme de "micromélange" ou de mélange à petites échelles, est discuté plus précisément. Les difficultés, et les contraintes, associées à sa modélisation sont brièvement présentées. Elles sont illustrées en rappelant certaines différences significatives qui ont déjà été observées en utilisant plusieurs propositions de modélisation. Compte tenu de cette disparité de comportement, la seconde partie de cette étude se concentre ensuite sur ce terme de micromélange pour le scalaire passif. La dynamique du mélange scalaire non réactif et incompressible est étudiée dans une Turbulence Homogène Isotrope (THI) en décroissance. L'objectif est d'aider à la compréhension et aux développements de modèles pour représenter le mélange turbulent de scalaires passifs ou réactifs. Les gradients scalaires et la diffusion moléculaire sont évalués en termes de moyennes conditionnelles à partir des résultats des simulations. Ces quantités jouent un rôle crucial dans l'évolution de la statistique scalaire et pilotent l'évolution de la PDF correspondante dans l'espace des compositions. Dans la continuité de nos précédents travaux, des fermetures classiques ou plus élaborées proposées pour ces termes sont comparées aux résultats issus de nos simulations numériques.

Abstract :

Scalar PDF transport equations are studied using both Monte Carlo simulation in a PaSR-like configuration and Direct Numerical Simulation.

Mots-clefs :

Micromélange, PDF (Probability Density Function), DNS (Direct Numerical Simulation)

1 Introduction

Le calcul des écoulements turbulents réactifs du point de vue le plus général repose sur l'estimation de la PDF scalaire jointe des différents réactifs mis en jeu, en un point et à instant, notée \tilde{P} . La connaissance de cette PDF permet bien évidemment d'évaluer la valeur moyenne de toute quantité qui ne dépend que de ces seuls scalaires, et en particulier les taux de production moyens :

$$\tilde{\omega}_i = \int_{Y_i^*} \omega_i(Y_i^*) \tilde{P}(Y_i^*) dY_i^*$$

où ω_i est une fonction de Y_i seulement pour simplifier les notations.

La méthode la plus couramment utilisée pour estimer \tilde{P} consiste à en présumer la forme à partir de ses premiers moments. Cette méthode est essentiellement applicable au cas où la PDF d'une seule variable est considérée. Son extension à des PDFs multivariées, sans recourir à des hypothèses trop restrictives d'indépendance statistique entre les différents scalaires considérés,

est particulièrement délicate. Néanmoins, une méthode de PDFs partielles limitant l'emploi de cette hypothèse à des portions réduites de l'espace des compositions a été récemment introduite par Mura et Borghi (2004); ce qui peut permettre de la rendre moins restrictive.

Dans cette étude, on s'intéresse plutôt aux méthodes permettant d'évaluer cette PDF sans recourir à aucune hypothèse *a priori* concernant sa forme. Celle-ci est déterminée directement à partir de son équation de transport. La résolution numérique directe de cette équation par une méthode usuelle de type différences finies devenant rapidement inadaptée lorsque le nombre d'espèces augmente, on utilise plutôt une technique de Monte Carlo. Cette méthode consiste à considérer l'évolution d'un nombre N_t d'échantillons statistiques, appelés particules stochastiques dans la suite, qui présentent certaines similitudes avec des particules fluides, Fox (2002). Ces particules sont affectées par des processus stochastiques représentatifs de l'évolution de la PDF qu'elles permettent de simuler.

Dans ce qui suit, nous allons considérer une équation de transport de ce type pour le cas simplifié d'un réacteur homogène du point de vue statistique *id est* sans considérer les éventuels gradients de \tilde{P} . Dans cette situation, la PDF évolue dans l'espace des compositions sous l'effet de trois types de processus physiques distincts.

2 Réacteur Imparfaitement Mélangé ou PaSR

On considère la PDF scalaire \tilde{P} dans le cas simplifié d'un réacteur statistiquement homogène ou PaSR (Partially Stirred Reactor), c'est-à-dire que la PDF est supposée être la même en tout point. Avec les hypothèses usuelles, Mura *et al.* (2005), on montre que son équation de transport peut se mettre sous la forme :

$$\frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} = -\frac{(\tilde{P} - \tilde{P}_e)}{\tau_s} - \sum_i^N \frac{\partial}{\partial Y_i^*} \left(\langle \omega_i | Y_i^* \rangle \tilde{P} \right) - \sum_i^N \frac{\partial}{\partial Y_i^*} \left(\left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) \middle| Y_i^* \right\rangle \tilde{P} \right) \quad (1)$$

Le premier terme résulte des entrées-sorties du réacteur, lorsque le temps de séjour τ_s devient très faible, il devient dominant et la PDF \tilde{P} s'identifie à la PDF en entrée \tilde{P}_e . Le second terme correspond à la production chimique, il ne dépend que de la composition locale si bien que : $\langle \omega_i | Y_i^* \rangle = \omega_i(Y_i^*)$. Le terme de production peut donc être traité de manière exacte et c'est l'un des principaux attraits de cette méthode. Enfin, le dernier terme représente les effets non résolus de la diffusion moléculaire se produisant aux petites échelles. En fait, la difficulté de modélisation est reportée sur la fermeture de ce terme de micromélange qui repose sur une information en deux points : les gradients scalaires instantanés.

Chacun des termes de l'Eq.(1) fait intervenir (explicitement ou non) un temps caractéristique associé respectivement au séjour dans le réacteur τ_s , au mélange turbulent scalaire τ_{Y_i} , à la cinétique chimique τ_{chem} . Les valeurs relatives de ces différents temps caractéristiques fixent la prédominance des différents termes de l'équation de transport considérée et par là-même la PDF au sein du réacteur.

3 Modélisation du Mélange aux Petites Echelles

Les termes de production chimique étant traités de manière exacte dans l'équation de transport de PDF, les seuls termes nécessitant une hypothèse de fermeture sont ceux associés à la diffusion moléculaire conditionnelle i.e. au mélange scalaire à petites échelles ou micromélange dans le PaSR.

Pour un scalaire passif Z dans un "réacteur" homogène fermé, c'est même le seul terme qui fait

évoluer la PDF :

$$\frac{\partial \tilde{P}(Z^*)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial Z^*} \left(\left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \middle| Z^* \right\rangle \tilde{P}(Z^*) \right) = -\frac{\partial^2}{\partial Z^{*2}} \left(\left\langle D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \middle| Z^* \right\rangle \tilde{P}(Z^*) \right)$$

Cette égalité met en évidence le caractère antidiffusif de cette équation de transport parabolique avec un coefficient de diffusion strictement négatif et égal à $-\langle \epsilon_Z \mid Z^* \rangle$.

Sous cette forme, qui fait intervenir la dissipation conditionnelle, on voit que le terme de micromélange va assurer, par la destruction des fluctuations scalaires, la "relaxation" de la PDF vers la composition moyenne : $\tilde{P}_{t \rightarrow \infty}(Z^*) = \delta(Z^* - \tilde{Z})$. La fermeture de ce terme est effectuée en s'efforçant de satisfaire un certain nombre de propriétés rappelées ci-dessous.

3.1 Propriétés des Modèles de Micromélange

Les deux premières propriétés sont généralement intrinsèques aux fermetures proposées, les suivantes, quoique recherchées, ne sont par contre pas toujours respectées (Fox, 2002).

1. Conservation de la moyenne du scalaire passif.
2. Décroissance des fluctuations scalaires.
3. Relaxation de la PDF vers une forme Gaussienne.
4. Maintien de la PDF dans le domaine permis.
5. Micromélange local dans l'espace des compositions.
6. Conservation de la linéarité entre les scalaires.
7. Dépendance du micromélange aux échelles caractéristiques du scalaire.
8. Prise en compte de la dépendance au nombre de Reynolds lorsque celui-ci n'est pas infiniment grand.

Ces critères ne considèrent pas explicitement le possible couplage entre réaction chimique et diffusion moléculaire. Ce type de couplage est pourtant susceptible d'exister et rend difficile la vérification des propriétés précédentes. En particulier, pour un scalaire réactif, la seule estimation du taux de destruction des fluctuations d'espèce réactive :

$$\frac{\partial \widetilde{Y_i''^2}}{\partial t} = -2\widetilde{\epsilon_{Y_i}} \quad \text{avec} \quad \widetilde{\epsilon_{Y_i}} = D \frac{\partial \widetilde{Y_i''}}{\partial x_j} \frac{\partial \widetilde{Y_i''}}{\partial x_j} \geq 0$$

i.e. du taux de dissipation moyen $\widetilde{\epsilon_{Y_i}}$ n'est un problème que partiellement résolu à ce jour, voir les travaux récents de Mura et Borghi (2003), Mura *et al.* (2007).

Enfin, si l'on excepte les travaux de Anand et Pope (1987) ou ceux plus récents de Mura *et al.* (2003), il n'existe pratiquement pas de modélisation du mélange à petites échelles permettant de prendre en compte l'existence possible de structures réactives, appelées communément "flammelettes", au sein desquelles le couplage entre les processus de diffusion moléculaire et de réaction chimique ne peut pas être ignoré. Dans les travaux qui viennent d'être cités, une certaine proportion de l'épaisseur du front de flamme moyen ("flame brush") est traitée en évaluant directement micromélange et réaction chimique à partir d'une bibliothèque de flammelettes laminaires. Néanmoins, le traitement i) du micromélange dans les directions tangentielles aux flammelettes ii) ainsi que dans la proportion résiduelle du front moyen reste effectué avec un modèle de micromélange passif. En conséquence, nous allons dans un premier temps limiter nos investigations à l'étude de modèles proposés pour ce type de situation.

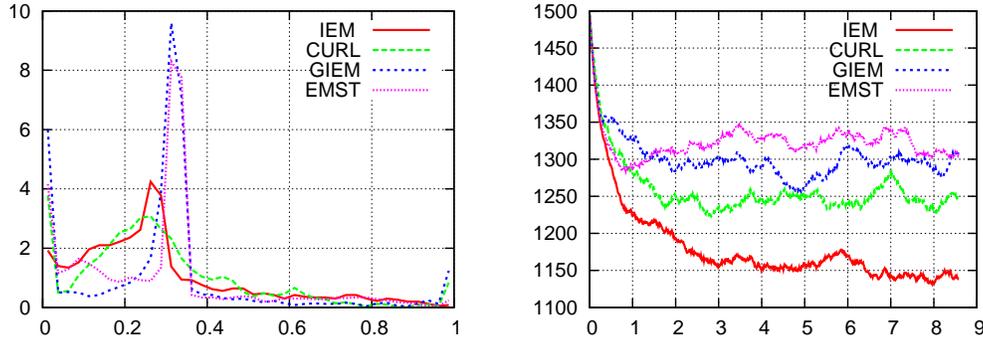


FIG. 1 – Sensibilité au modèle de micromélange : PDF du scalaire passif à l'état stationnaire pour quatre modèles de micromélange différents dans un PaSR ouvert. Température moyenne correspondante en fonction du temps dans le réacteur alimenté par un mélange réactif H₂-N₂-air, Mura *et al.* (2005).

3.2 Modèle IEM-LMSE

Ce modèle traduit deux caractéristiques essentielles du mélange à petites échelles. La première est reliée à l'influence de la turbulence : le mélange est d'autant plus efficace que l'intensité turbulente est élevée. La seconde concerne la diffusion elle-même, d'autant plus importante qu'on est éloigné de la valeur moyenne locale. L'évolution de la PDF est donnée par :

$$\frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial Z^*} \Omega(\tilde{Z} - Z^*) P(Z^*) \quad \text{avec } \Omega = 1/\tau_Z \text{ la fréquence de mélange.} \quad (2)$$

Par construction, ce modèle conserve la moyenne et diminue les fluctuations scalaires. Néanmoins, il ne respecte pas l'ensemble des autres propriétés énoncées précédemment. En particulier, puisqu'il ne modifie pas la forme de la PDF, il ne peut pas assurer la relaxation vers une Gaussienne à partir de conditions initialement séparées.

3.3 Modèle BMC-GIEM

Avec cette généralisation du modèle IEM-LMSE, le terme de micromélange ou de diffusion conditionnelle du scalaire passif de référence Z s'exprime de la façon suivante.

$$\left\langle D \frac{\partial^2 Z}{\partial x_j^2} \mid Z^* \right\rangle = \frac{1}{\tilde{P}(Z^*)} \frac{\partial}{\partial Z^*} \left(\left\langle D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \mid Z^* \right\rangle \tilde{P}(Z^*) \right) = \Omega(Z^*, t) [Z(t) - Z^*] \quad (3)$$

$Z(t)$ désigne les points pour lesquels le flux de diffusion s'annule et la fréquence de mélange $\Omega(Z^*, t)$ est une propriété locale dans l'espace des compositions telle que :

$$\Omega(Z^*, t) = \frac{1}{[Z(t) - Z^*] \tilde{P}(Z^*)} \frac{\partial}{\partial Z^*} \left(\left\langle D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \mid Z^* \right\rangle \tilde{P}(Z^*) \right) \quad (4)$$

En utilisant le concept de Mapping Closure introduit par Chen *et al.* (1989), l'expression suivante peut être employée, Tsai et Fox (1998) :

$$\Omega(Z^*, t) = \frac{1}{[Z(t) - Z^*] \beta(Z^*; a, b)} \frac{\partial}{\partial t} I_\beta(Z^*; a, b) \quad (5)$$

β est la PDF bêta du champ statistique de référence et I_β est la cumulative associée.

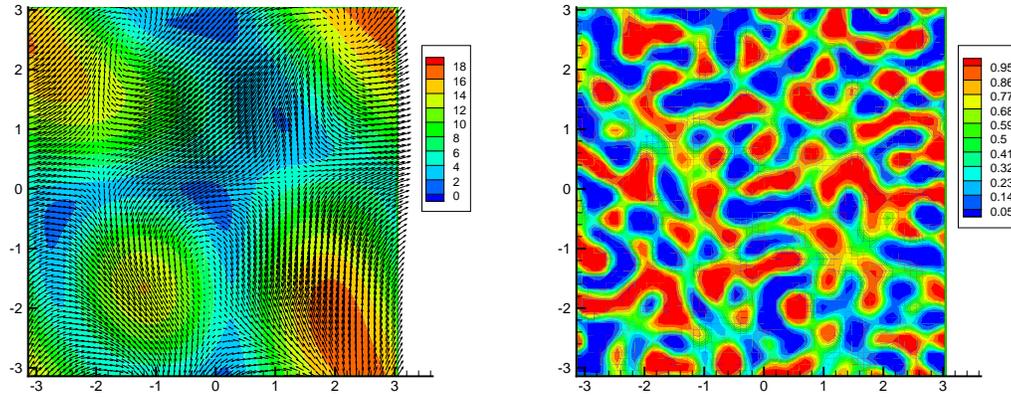


FIG. 2 – Champs de vitesse (et vorticité) et de scalaire obtenus dans un plan médian du domaine de calcul en utilisant les méthodes d’initialisation proposées par Rogallo (1981) et par Réveillon (1996). Le niveau de ségrégation initial du champ scalaire a été fixé à 0.8.

Ces deux modèles, ainsi que ceux de Curl et EMST (dont la description sort du cadre de cette communication), ont été testés dans un PaSR. La figure 1 met en évidence la forte disparité des résultats obtenus avec l’un ou l’autre d’entre eux. En conséquence, nous allons nous appuyer sur la simulation numérique directe pour nous intéresser plus en détails à la dynamique du mélange scalaire à petites échelles.

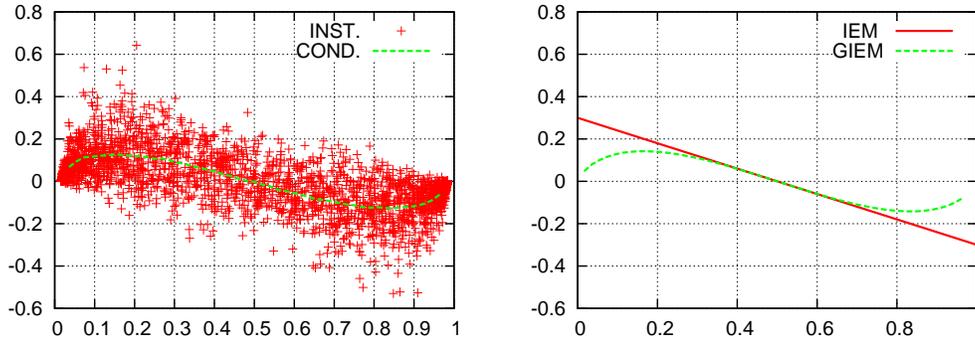


FIG. 3 – Figure de gauche : termes de diffusion instantané et conditionnel issus des DNS. Figure de droite : modélisations IEM et BMC-GIEM dans les mêmes conditions.

4 Simulation Numérique Directe du Mélange Scalaire

Les conditions initiales sont fixées en utilisant la méthode proposée par Rogallo (1981) qui permet d’imposer la forme du spectre des échelles spatiales de fluctuations de vitesse. En ce qui concerne le champ scalaire initial, une méthode similaire, proposée par Réveillon (1996), est utilisée pour fixer à la fois le spectre scalaire mais aussi la forme de la PDF correspondante dans le domaine de calcul (un "cube" tri périodique dans notre cas), voir Fig. 2. La méthode numérique employée repose sur un schéma *Low Mach Number* avec séparation d’opérateurs (ou méthode de pas fractionnaires) avec projection pour la pression, Yanenko (1986). Le pro-

blème de Poisson résultant est résolu dans l'espace de Fourier et l'emploi d'une technique de factorisation permet de réduire considérablement les coûts numériques associés. L'intégration temporelle est réalisée par le biais d'un schéma de Runge-Kutta précis au troisième ordre, Verzicco et Orlandi (1996).

La figure 3 présente les termes de diffusion instantané et conditionnel (i.e. de micromélange) obtenus à partir des bases de données issues de nos simulations numériques. Ils présentent certaines similarités avec la représentation obtenue par le biais du modèle GIEM. Des post-traitements sont en cours pour confronter de façon plus quantitative ces bases de données aux différents modèles déjà étudiés.

Arnaud Mura remercie l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) pour son soutien financier.

Références

- Anand M.S., Pope S.B. 1987, Calculations of premixed turbulent flames by PDF methods. *Combust. Flame* **67** :127-142
- Fox R. 2002, Computational models for turbulent reacting flows. Cambridge University Press.
- Chen H., Chen S., Kraichnan R. 1989, Probability distribution of a stochastically advected scalar field. *Phys. Rev. Letters*. **63**(24) :2657-2660
- Mura A., Borghi R. 2003, Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion. *Combust. Flame* **133**(1-2) :193-196
- Mura A., Galzin F., Borghi R. 2003, A unified PDF-flamelet model for turbulent premixed combustion. *Combust. Sci. Technol.* **175**(9) :1573-1609
- Mura A., Borghi R. 2004, Introducing a new partial PDF approach for turbulent combustion modeling. *Combust. Flame* **136**(3) :377-382
- Mura A., Losier C., Strozzi C. 2005, Numerical study of the strong interplays between micro-mixing, chemistry and residence inside a stochastic reactor. *Proceedings of the First Baltic Combustion Meeting*, Warsaw (Poland), November 27-29 2005, pp. 121-124
- Mura A., Robin V., Champion M. 2007, Modeling of scalar dissipation in partially premixed turbulent flames. *Combust. Flame*, à paraître.
- Réveillon J. 1996, Simulation numérique des grandes structures appliquée aux flammes turbulentes non-prémélangées. *Thèse de Doctorat de l'Université de Rouen*.
- Rogallo R.S. 1981, Numerical experiments in homogeneous turbulence. *NASA Report TM81315*.
- Tsai K., Fox R. 1998, The BMC/GIEM model for micromixing in non premixed turbulent reacting flows. *Ind. Eng. Chem. Res.* **37** :2131-2141
- Verzicco R., Orlandi P. 1996, A finite difference scheme for three dimensional incompressible flows in cylindrical coordinates. *J. Comp. Phys.* **123** :402-414
- Yanenko N.N. 1986, Méthode à pas fractionnaires, traduit par P.A. Nepomiastchy. *Collection Intersciences*. Ed. Armand Colin.