

# Modélisation de la combustion turbulente des mélanges hétérogènes en richesse : Des flammes de prémélange aux flammes de diffusion

Vincent Robin <sup>a</sup>, Arnaud Mura <sup>a,\*</sup>, Michel Champion <sup>a</sup>, Pierre Plion <sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Laboratoire de combustion et de détonique, UPR 9028 CNRS, Poitiers, 86961 Futuroscope Chasseneuil, France*

<sup>b</sup> *Département MFEE, groupe EDF, 78401 Chatou cedex, France*

Reçu le 2 février 2009 ; accepté après révision le 10 juillet 2009

Disponible sur Internet le 3 septembre 2009

Présenté par Sébastien Candel

---

## Résumé

La simulation numérique d'écoulements turbulents réactifs de configurations pratiques nécessite, pour être réaliste, l'utilisation d'un modèle physique s'appliquant à des milieux hétérogènes en richesse et tenant compte des temps caractéristiques chimiques finis. Ce modèle doit également respecter le cas limite où les flammes peuvent être considérées infiniment minces. L'objectif de cette note est de démontrer et d'analyser les relations algébriques exactes existant entre dissipation scalaire et réaction chimique dans ce cas limite lorsque la richesse du mélange est variable. **Pour citer cet article :** *V. Robin et al., C. R. Mecanique 337 (2009)*. © 2009 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

## Abstract

**Turbulent combustion modeling with inhomogeneous equivalence ratio: From premixed to diffusion flames.** To be general, numerical simulation of turbulent reactive flows must be based on a model which can take into account inhomogeneous fuel–air mixture as well as finite values of the chemical times. Moreover, this kind of model must be consistent with the limiting situation where the flame fronts can be considered as infinitely thin. With the objective of proposing such a model, we derive and analyse the exact algebraic relations that exist between the chemical production rate and scalar dissipation functions in this limiting case and when the equivalence ratio of the mixture is variable. **To cite this article:** *V. Robin et al., C. R. Mecanique 337 (2009)*. © 2009 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

**Mots-clés :** Combustion ; Modélisation de la combustion turbulente ; Dissipation scalaire ; Combustion partiellement prémélangée ; Régime de flammelettes

**Keywords:** Combustion; Turbulent combustion modeling; Scalar dissipation; Partially premixed combustion; Flamelet regime

---

\* Auteur correspondant.

Adresses e-mail : [vincent.robin@lcd.ensma.fr](mailto:vincent.robin@lcd.ensma.fr) (V. Robin), [arnaud.mura@lcd.ensma.fr](mailto:arnaud.mura@lcd.ensma.fr) (A. Mura), [michel.champion@lcd.ensma.fr](mailto:michel.champion@lcd.ensma.fr) (M. Champion), [pierre.plion@edf.fr](mailto:pierre.plion@edf.fr) (P. Plion).

## Nomenclature

$c$	variable d'avancement normalisée	$\omega$	taux de réaction de la variable $Y$
$D$	diffusivité moléculaire	<i>Indices</i>	
$Da$	nombre de Damköhler	$f$	fait référence aux gaz frais
$\mathcal{D}$	domaine de définition	$b$	fait référence aux gaz brûlés
$\tilde{P}$	PDF au sens de Favre	<i>Opérateurs</i>	
$P_i^j$	termes de production	$\nabla$	gradient
$\mathbf{u}$	vecteur vitesse	$L$	accumulation et transport
$Y$	variable d'avancement, fraction massique	$\mathcal{O}$	ordre de grandeur
$\delta$	distribution de Dirac	$—$	moyenne au sens de Reynolds
$\tilde{\epsilon}_i$	taux de dissipation de la variance de $i$	$\sim$	moyenne au sens de Favre
$\lambda$	degré d'avancement moyen	$''$	fluctuation au sens de Favre
$\xi$	variable passive, fraction de mélange		
$\rho$	masse volumique		

## Abridged English version

To describe the local thermochemistry of inhomogeneous mixtures of fuel and air, two scalar variables are used: a progress variable  $Y$  and a passive variable  $\xi$ . The progress variable  $Y$  represents the mass fraction of one or several reactive species and the passive variable  $\xi$  is defined in such a manner that  $\xi = 0$  in pure air and  $\xi = 1$  in pure fuel. Fig. 1 shows two examples of the possible domain of definition for couples  $(\xi, Y)$  in the case of methane–air mixtures. The corresponding domain  $\mathcal{D}$  is bounded by the pure mixing line  $Y = Y_f(\xi)$  which represents fresh reactants and by the burned products curve  $Y = Y_b(\xi)$ .

In this Note, we demonstrate the exact algebraic relations (19) and (23) existing, in the limit case of infinitely thin flames, between the dissipation terms and the chemical terms which appear in the mean transport equations for the first and second scalar moments of  $\xi$  and  $Y$ , Eqs. (1)–(5). These relations are derived by replacing the limit values of  $\widetilde{Y''^2}$ ,  $\widetilde{Y''\xi''}$ ,  $\widetilde{\mathbf{u}''Y''^2}$  and  $\widetilde{\mathbf{u}''Y''\xi''}$  in the transport equations for the reactive scalar variance (4) and cross scalar correlation (5). These limit values, Eqs. (12), (13), (17) and (18), are obtained in the case of infinitely thin flames considering the joint scalar and joint scalar-velocity Favre averaged PDF (8) and (14).

The general formulation obtained, associated with Eqs. (19) and (23), is valid from perfectly premixed to diffusion flames and allows to recover the usual relations that apply to perfectly premixed flames, Eq. (26), and to diffusion flames, Eq. (29). This result should be very useful for turbulent combustion modeling in the context of RANS, URANS or LES approaches. A turbulent combustion model based on this formulation and its application to a practical reactive flow will be the purposes of a forthcoming note.

## 1. Introduction

Dans de nombreux systèmes de combustion industriels air et combustible sont injectés séparément dans la chambre de combustion et l'amont de celle-ci est le siège d'une compétition entre mélange turbulent et réactions chimiques. Dans le cas général, les flammes se propagent et se stabilisent dans un mélange réactif dont la richesse varie avec le temps et l'espace. Suivant la position dans la chambre, le régime de combustion est différent, allant de la flamme parfaitement prémélangée pour laquelle le mélange frais air-combustible est homogène, jusqu'à la flamme de diffusion pour laquelle le mélange contrôle complètement le mécanisme de combustion. On en déduit que la modélisation numérique de ces écoulements réactifs turbulents doit être suffisamment générale pour représenter correctement l'ensemble des phénomènes en présence et les différents régimes évoqués ci-dessus. Dans cette Note, nous présentons une formulation générale permettant de décrire un écoulement réactif turbulent dans lequel la richesse du mélange frais est hétérogène. Cette formulation s'appuie sur deux grandeurs scalaires caractéristiques : une variable  $Y$  qui est une fraction massique d'une ou plusieurs espèces réactives, et la fraction de mélange  $\xi$  telle que  $\xi = 0$  lorsque seul l'air est présent et  $\xi = 1$  lorsque seul le combustible est présent. En l'absence de pertes thermiques, remarquons que

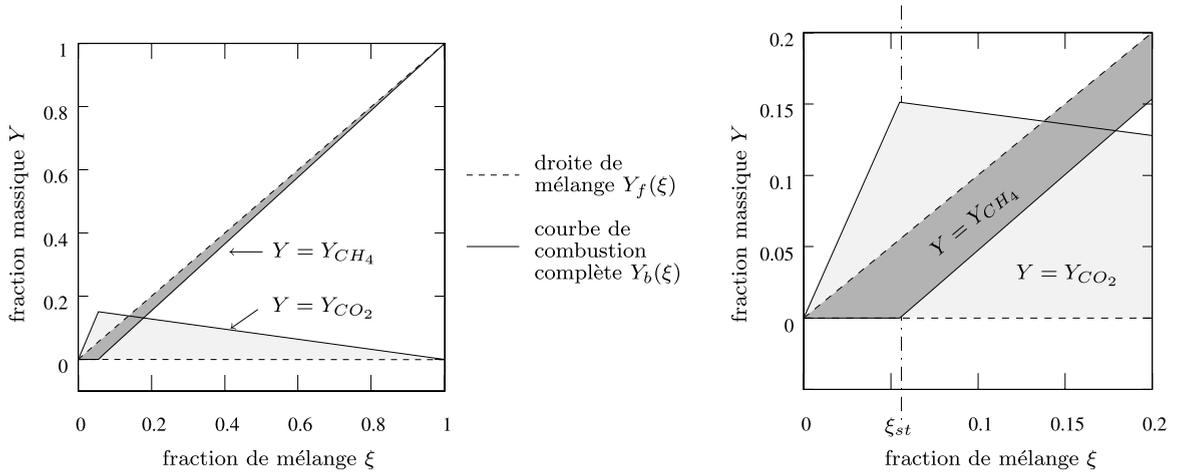


Fig. 1. Exemple de domaine  $\mathcal{D}$  de définition des couples  $(\xi, Y)$  pour  $Y = Y_{\text{CH}_4}$  et  $Y = Y_{\text{CO}_2}$  (figure de droite : zoom).

dans le cas où le temps chimique est petit devant le temps de mélange, la composition du mélange et la température en n'importe quel instant et position dans l'écoulement peuvent être entièrement déterminées à partir de la donnée d'un couple  $(Y, \xi)$ , dans la mesure où l'on se fixe un mode de représentation de cinétique chimique du mélange réactif considéré, soit une ou plusieurs réactions globales, un schéma réduit, ou encore une tabulation à partir d'un schéma détaillé [1,2]. Une fois fixé le mode de représentation des réactions chimiques, le choix de  $Y$  doit bien sûr être tel que cette variable varie de façon monotone à travers le front de flamme et ne s'annule qu'à l'une de ses limites. A titre d'exemple, dans le cas de la combustion d'un mélange méthane–air, la Fig. 1 donne deux définitions possibles du domaine d'existence  $\mathcal{D}$  des couples  $(Y, \xi)$  suivant que l'on choisit  $Y$  comme étant la fraction massique du méthane ou celle du dioxyde de carbone. Ce domaine est limité par une droite de mélange  $Y = Y_f(\xi)$ , représentant l'ensemble des points où le mélange s'effectue sans combustion, et une courbe de réaction complète  $Y = Y_b(\xi)$  constituée ici de deux segments de droite de part et d'autre de la stœchiométrie. Rappelons ici que le taux de production  $\omega_i(Y, \xi)$  d'une espèce  $i$  ne sera non nul que sur une partie du domaine  $\mathcal{D}$  fixée par les limites d'inflammation du mélange considéré.

La formulation que nous présentons est basée sur l'existence d'une fonction densité de probabilité au sens de Favre  $\tilde{P}(Y, \xi)$ , définie dans  $\mathcal{D}$ . La forme de cette PDF est choisie pour être représentative des flammes infiniment minces et permet ainsi d'établir un certain nombre de relations existant entre les taux de dissipation scalaire et les taux de production chimique pour les milieux partiellement prémélangés. Les expressions correspondantes présentent un intérêt particulier pour améliorer la représentation des taux de dissipations scalaires non résolus que ce soit pour des approches de types RANS [3,4] ou bien LES [5]. Nous montrons qu'elles sont valides pour l'ensemble des régimes de combustion « partiellement prémélangés », de la flamme de prémélange en milieu homogène à la flamme de diffusion.

## 2. Equations de transport moyennes

Les équations de transport que nous considérons ici pour représenter le champ scalaire  $(Y, \xi)$  caractéristique d'un écoulement turbulent réactif sont celles pour les premiers et seconds moments de  $Y$  et de  $\xi$ . En utilisant les moyennes de Favre, c'est-à-dire pondérées par la masse  $\tilde{g} = \overline{\rho g} / \bar{\rho}$ , on obtient :

$$L(\tilde{\xi}) = 0 \quad (1)$$

$$L(\tilde{Y}) = \tilde{\omega} \quad (2)$$

$$L(\tilde{\xi}''^2) = -2\tilde{\rho}\tilde{\epsilon}_\xi - 2\overline{\rho\mathbf{u}''\xi''} \cdot \nabla\tilde{\xi} \quad (3)$$

$$L(\tilde{Y}''^2) = -2\tilde{\rho}\tilde{\epsilon}_Y - 2\overline{\rho\mathbf{u}''Y''} \cdot \nabla\tilde{Y} + 2\overline{Y''\omega} \quad (4)$$

$$L(\tilde{Y}''\xi'') = -2\tilde{\rho}\tilde{\epsilon}_{Y\xi} - \overline{\rho\mathbf{u}''Y''} \cdot \nabla\tilde{\xi} - \overline{\rho\mathbf{u}''\xi''} \cdot \nabla\tilde{Y} + \overline{\xi''\omega} \quad (5)$$

où l'opérateur  $L$  est défini par :

$$L(\tilde{g}) \equiv \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{g}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{g}) - \nabla \cdot (\overline{\rho D\nabla g} - \overline{\rho\mathbf{u}''g''}) \quad (6)$$

Les équations (3)–(5) introduisent trois termes de dissipation des fluctuations scalaires par diffusion moléculaire :

$$\bar{\rho}\tilde{\epsilon}_\xi = \overline{\rho D\nabla\xi'' \cdot \nabla\xi''}, \quad \bar{\rho}\tilde{\epsilon}_Y = \overline{\rho D\nabla Y'' \cdot \nabla Y''}, \quad \bar{\rho}\tilde{\epsilon}_{Y\xi} = \overline{\rho D\nabla Y'' \cdot \nabla\xi''} \quad (7)$$

La recherche d'expressions fermées pour ces taux de dissipation fait l'objet du paragraphe suivant.

### 3. Relations algébriques dans l'hypothèse de flammes infiniment minces

#### 3.1. Moyennes, variances et flux turbulents des scalaires

Dans le cas limite des flammes infiniment minces, qui sont d'un grand intérêt sur le plan des applications, la distribution de la variable d'avancement de la réaction est quasi bimodale. En conséquence, dans ce cas limite, la PDF jointe de fraction massique  $Y$  et fraction de mélange  $\xi$  s'écrit [6] :

$$\tilde{P}(Y, \xi) = \lambda\tilde{P}_f(\xi)\delta(Y - Y_f) + (1 - \lambda)\tilde{P}_b(\xi)\delta(Y - Y_b) + \mathcal{O}(1/Da) \quad (8)$$

où  $\tilde{P}_f(\xi)$  et  $\tilde{P}_b(\xi)$  sont les PDF de fraction de mélange conditionnées respectivement dans les gaz frais et dans les gaz brûlés. Toutefois, comme les zones réactives sont considérées infiniment minces, la variable d'avancement de la réaction  $c$  et la variable non réactive  $\xi$  (fraction de mélange) sont indépendantes : le mélange scalaire passif est figé pendant la durée infiniment courte durant laquelle la réaction chimique s'opère et les PDF conditionnelles des variables correspondantes s'identifient à leurs PDF marginales. En particulier,  $P(\xi | c) = P(\xi) = P_f(\xi) = P_b(\xi)$ , la PDF de la fraction de mélange conditionnée dans les gaz frais  $P_f(\xi)$  est donc identique à celle conditionnée dans les gaz brûlés  $P_b(\xi)$ , ce qui revient à considérer que les variables  $c$  et  $\xi$  sont statistiquement indépendantes à la traversée du front de flamme, soit  $c''\xi'' = 0$ .

En utilisant l'expression (8), la fraction massique moyenne est donnée par :

$$\tilde{Y} = \iint_{\mathcal{D}} Y \tilde{P}(Y, \xi) dY d\xi = \lambda\tilde{Y}_f + (1 - \lambda)\tilde{Y}_b \quad (9)$$

$$\text{où } \tilde{Y}_i = \int_0^1 Y_i \tilde{P}(\xi) d\xi \quad \text{avec } i = f, b \quad (10)$$

Le coefficient  $\lambda$ , égal à  $(\tilde{Y} - \tilde{Y}_b)/(\tilde{Y}_f - \tilde{Y}_b)$ , introduit dans les relations (8) et (9) caractérise le degré d'avancement de la réaction défini au sens moyen soit  $\lambda = 1$  dans les gaz frais et  $\lambda = 0$  dans les gaz brûlés et peut être relié à la variable  $c$  souvent utilisée pour la modélisation de la combustion turbulente [7] via :

$$c = (Y_f - Y)/(Y_f - Y_b) \quad \text{et} \quad \tilde{c} = \overline{(Y_f - Y)/(Y_f - Y_b)} / \bar{\rho} \quad (11)$$

C'est uniquement dans le cas d'une hypothèse d'indépendance entre  $c$  et  $\xi$  ( $c''\xi'' = 0$ ) que la relation directe  $\tilde{c} = 1 - \lambda$  peut s'appliquer. Les avantages et les inconvénients associés à l'emploi de la variable d'avancement normalisée  $c$  ont été largement discutés par Bray et al. [7]. Toutefois, l'utilisation de cette variable introduit des termes non fermés dans les équations de transport de  $\tilde{c}$  et  $\tilde{c}''^2$ , c'est pourquoi nous préférons utiliser ici la variable  $Y$ .

L'utilisation de l'expression (8) conduit aussi à :

$$\tilde{Y}''^2 = (\tilde{Y}_f - \tilde{Y})(\tilde{Y} - \tilde{Y}_b) + \lambda\tilde{Y}_f''^2 + (1 - \lambda)\tilde{Y}_b''^2 \quad (12)$$

$$\widetilde{Y''\xi''} = \lambda\widetilde{Y_f''\xi''} + (1 - \lambda)\widetilde{Y_b''\xi''} \quad (13)$$

Concernant maintenant les flux scalaires turbulents, des expressions comparables à (12) et (13) sont obtenues en généralisant la PDF définie par l'expression (8) au champ de vitesse :

$$\tilde{P}(Y, \xi, \mathbf{u}) = \lambda\tilde{P}_f(\xi, \mathbf{u})\delta(Y - Y_f) + (1 - \lambda)\tilde{P}_b(\xi, \mathbf{u})\delta(Y - Y_b) + \mathcal{O}(1/Da) \quad (14)$$

Ce qui conduit à l'expression suivante pour le flux turbulent de la fraction massique :

$$\widetilde{\mathbf{u}''\bar{Y}''} = \lambda(1-\lambda)(\widetilde{Y}_f - \widetilde{Y}_b)(\widetilde{\mathbf{u}}_f - \widetilde{\mathbf{u}}_b) + \lambda\widetilde{\mathbf{u}}_f''\bar{Y}_f'' + (1-\lambda)\widetilde{\mathbf{u}}_b''\bar{Y}_b'' \quad (15)$$

où vitesses moyennes et flux turbulents conditionnés dans les gaz frais et dans les gaz brûlés sont définis de la façon suivante :

$$\widetilde{\mathbf{u}}_i = \iint_{\mathbf{u} 0}^1 \mathbf{u} \widetilde{P}_i(\xi, \mathbf{u}) d\xi d\mathbf{u} \quad \text{et} \quad \widetilde{\mathbf{u}}_i''\bar{Y}_i'' = \iint_{\mathbf{u} 0}^1 \mathbf{u}'' Y_i'' \widetilde{P}_i(\xi, \mathbf{u}) d\xi d\mathbf{u} \quad \text{avec } i = f, b \quad (16)$$

La relation (15) est maintenant utilisée pour obtenir des expressions des flux turbulents de variance et de covariance qui ne dépendent pas explicitement des vitesses moyennes conditionnées dans les gaz frais et dans les gaz brûlés :

$$\begin{aligned} \widetilde{\mathbf{u}''\bar{Y}''^2} &= \widetilde{\mathbf{u}''\bar{Y}''}(\widetilde{Y}_f - 2\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_b) + \widetilde{\mathbf{u}}_f''\bar{Y}_f''(\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_b) + \widetilde{\mathbf{u}}_b''\bar{Y}_b''(\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_f) + \lambda\widetilde{\mathbf{u}}_f''\bar{Y}_f''^2 + (1-\lambda)\widetilde{\mathbf{u}}_b''\bar{Y}_b''^2 \\ &+ (\widetilde{\mathbf{u}''\bar{Y}''} - \lambda\widetilde{\mathbf{u}}_f''\bar{Y}_f'' - (1-\lambda)\widetilde{\mathbf{u}}_b''\bar{Y}_b'')((\widetilde{Y}_f''^2 - \widetilde{Y}_b''^2)/(\widetilde{Y}_f - \widetilde{Y}_b)) \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \widetilde{\mathbf{u}''\bar{Y}''\xi''} &= \lambda\widetilde{\mathbf{u}}_f''\bar{Y}_f''\xi'' + (1-\lambda)\widetilde{\mathbf{u}}_b''\bar{Y}_b''\xi'' \\ &+ (\widetilde{\mathbf{u}''\bar{Y}''} - \lambda\widetilde{\mathbf{u}}_f''\bar{Y}_f'' - (1-\lambda)\widetilde{\mathbf{u}}_b''\bar{Y}_b'')((\widetilde{Y}_f''\xi'' - \widetilde{Y}_b''\xi'')/(\widetilde{Y}_f - \widetilde{Y}_b)) \end{aligned} \quad (18)$$

En conclusion, dans le cadre des flammes infiniment minces, les relations (12) et (13) permettent de déterminer variance de fraction massique et covariance à partir des autres quantités transportées. Les quantités conditionnées dans les gaz frais et brûlés  $\widetilde{Y}_i$ ,  $\widetilde{Y}_i''^2$  et  $\widetilde{Y}_i''\xi''$  ( $i = f, b$ ) étant facilement déterminables à partir de la relation (10) et après s'être fixé la forme de la PDF  $\widetilde{P}(\xi)$ . Le degré d'avancement moyen  $\lambda$  est quant à lui obtenu par la résolution de l'équation de transport de la fraction massique moyenne. Si l'hypothèse des flammes infiniment minces n'est plus applicable, il devient nécessaire de résoudre les équations de transport pour les seconds moments du scalaire réactif [3,4]. Néanmoins, la cohérence impose alors que dans ces équations le modèle utilisé pour fermer les termes de dissipation permette aussi de retrouver correctement cette limite [5,6]. C'est pourquoi dans un premier temps nous nous attachons à exprimer les taux de dissipation dans ce cas limite. Pour cela, les équations de transport des deuxièmes moments  $\widetilde{Y}''^2$  et  $\widetilde{Y}''\xi''$  sont réécrites en considérant ces différentes expressions (12), (13), (17), (18).

### 3.2. Dégénérescence des équations de transport pour la variance et la covariance

Lorsque les expressions de la variance et des flux turbulents de  $Y$ , obtenues via les équations (12) et (17), sont introduites dans le premier membre de l'équation de transport (4), on obtient l'expression suivante pour le taux de dissipation  $\bar{\epsilon}_Y$  :

$$\begin{aligned} 2\bar{\rho}\bar{\epsilon}_Y &= 2\overline{Y''\omega} - (\widetilde{Y}_f - 2\widetilde{Y} + \widetilde{Y}_b)\bar{\omega} + ((\widetilde{Y}_f''^2 - \widetilde{Y}_b''^2)/(\widetilde{Y}_f - \widetilde{Y}_b))(-\bar{\omega} + \lambda L(\widetilde{Y}_f) + (1-\lambda)L(\widetilde{Y}_b)) \\ &- (\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_b)L(\widetilde{Y}_f) - (\widetilde{Y} - \widetilde{Y}_f)L(\widetilde{Y}_b) - \lambda L(\widetilde{Y}_f''^2) - (1-\lambda)L(\widetilde{Y}_b''^2) + P_Y^1 + P_Y^2 \end{aligned} \quad (19)$$

L'équation (19) fournit une relation algébrique exacte entre le terme de dissipation  $\bar{\epsilon}_Y$  et les termes de production chimique  $\overline{Y''\omega}$  et  $\bar{\omega}$  dans le cas des flammes infiniment minces. Les moyennes et variances de fraction massique conditionnées dans les gaz frais et les gaz brûlés  $\widetilde{Y}_i$  et  $\widetilde{Y}_i''^2$  ( $i = f, b$ ) sont déterminées à partir de la PDF de fraction de mélange et de la forme du domaine de définition. Notons que les termes  $L(\widetilde{Y}_f)$  et  $L(\widetilde{Y}_b)$  peuvent également s'écrire en fonction de la dissipation de fraction de mélange et de la courbure des limites du domaine de définition [8] soit :

$$L(\widetilde{Y}_i) = -\rho D \nabla \xi \cdot \nabla \xi \frac{d^2 Y_i}{d\xi^2} \quad \text{avec } i = f, b \quad (20)$$

Comme  $Y_f(\xi)$  est une droite, sa courbure  $d^2 Y_f/d\xi^2$  est nulle et donc le terme  $L(\widetilde{Y}_f)$  est nul. En revanche, la courbure  $d^2 Y_b/d\xi^2$  n'est pas nulle. Le terme  $L(\widetilde{Y}_b)$  peut être calculé directement si la moyenne  $\widetilde{Y}_b$  est connue (déterminée à partir de la PDF de fraction de mélange) et que les flux turbulents conditionnés  $\widetilde{\rho\mathbf{u}}_b''\bar{Y}_b''$  sont modélisés. De la même manière, les termes  $L(\widetilde{Y}_f''^2)$  et  $L(\widetilde{Y}_b''^2)$  peuvent être calculés.

Les termes de production  $P_Y^1$  et  $P_Y^2$  du second membre de l'équation (19) sont définis par :

$$P_Y^1 = -\overline{\rho \mathbf{u}'' Y''} \cdot (\nabla \tilde{Y}_f + \nabla \tilde{Y}_b) - \overline{\rho \mathbf{u}_f'' Y_f''} \cdot (\nabla \tilde{Y} - \nabla \tilde{Y}_b) - \overline{\rho \mathbf{u}_b'' Y_b''} \cdot (\nabla \tilde{Y} - \nabla \tilde{Y}_f) \tag{21}$$

$$P_Y^2 = -(\overline{\rho \mathbf{u}_f'' Y_f''^2} - \overline{\rho \mathbf{u}_b'' Y_b''^2}) \cdot \nabla \lambda + ((\widetilde{Y_f''^2} - \widetilde{Y_b''^2}) / (\tilde{Y}_f - \tilde{Y}_b)) (\overline{\rho \mathbf{u}_f'' Y_f''} - \overline{\rho \mathbf{u}_b'' Y_b''}) \cdot \nabla \lambda - (\overline{\rho \mathbf{u}'' Y''} - \lambda \overline{\rho \mathbf{u}_f'' Y_f''} - (1 - \lambda) \overline{\rho \mathbf{u}_b'' Y_b''}) \cdot \nabla ((\widetilde{Y_f''^2} - \widetilde{Y_b''^2}) / (\tilde{Y}_f - \tilde{Y}_b)) \tag{22}$$

en supposant grande la valeur du nombre de Reynolds. La fermeture de ces termes nécessite l'introduction de modèles spécifiques pour représenter les flux turbulents scalaires.

La même technique est appliquée à la dissipation de la covariance  $\tilde{\epsilon}_{Y\xi}$  dans l'équation (5). Après quelques calculs, on obtient la forme suivante :

$$2\bar{\rho}\tilde{\epsilon}_{Y\xi} = \overline{\xi''\omega} + ((\widetilde{Y_f''\xi''} - \widetilde{Y_b''\xi''}) / (\tilde{Y}_f - \tilde{Y}_b)) (-\bar{\omega} + \lambda L(\tilde{Y}_f) + (1 - \lambda)L(\tilde{Y}_b)) - \lambda L(\widetilde{Y_f''\xi''}) - (1 - \lambda)L(\widetilde{Y_b''\xi''}) + P_{Y\xi}^1 + P_{Y\xi}^2 \tag{23}$$

Cette expression fournit une relation algébrique exacte entre le terme de dissipation de la covariance  $\tilde{\epsilon}_{Y\xi}$  et les termes chimiques  $\overline{\xi''\omega}$  et  $\bar{\omega}$  dans le cas où les flammes sont infiniment minces. Les termes de production  $P_{Y\xi}^1$  et  $P_{Y\xi}^2$  introduits dans le second membre de cette équation sont les suivants :

$$P_{Y\xi}^1 = -\overline{\rho \mathbf{u}'' Y''} \cdot \nabla \tilde{\xi} - \overline{\rho \mathbf{u}'' \xi''} \cdot \nabla \tilde{Y} \tag{24}$$

$$P_{Y\xi}^2 = -(\overline{\rho \mathbf{u}_f'' Y_f'' \xi''} - \overline{\rho \mathbf{u}_b'' Y_b'' \xi''}) \cdot \nabla \lambda + ((\widetilde{Y_f''\xi''} - \widetilde{Y_b''\xi''}) / (\tilde{Y}_f - \tilde{Y}_b)) (\overline{\rho \mathbf{u}_f'' Y_f''} - \overline{\rho \mathbf{u}_b'' Y_b''}) \cdot \nabla \lambda - (\overline{\rho \mathbf{u}'' Y''} - \lambda \overline{\rho \mathbf{u}_f'' Y_f''} - (1 - \lambda) \overline{\rho \mathbf{u}_b'' Y_b''}) \cdot \nabla ((\widetilde{Y_f''\xi''} - \widetilde{Y_b''\xi''}) / (\tilde{Y}_f - \tilde{Y}_b)) \tag{25}$$

Nous montrons maintenant que les relations (19) et (23) dégénèrent correctement dans les deux cas limites bien connus des flammes de prémélange en milieu homogène et des flammes de diffusion.

### 3.3. Cas limites : flammes de prémélange et flammes de diffusion

Dans les flammes de prémélange en milieu homogène, le domaine de définition  $\mathcal{D}$  donné par la Fig. 1 se réduit à une droite verticale  $\xi = \text{cst}$ . La fraction de mélange est constante et de ce fait les valeurs des fractions massiques dans les gaz frais  $Y_f$  et dans les gaz brûlés  $Y_b$  sont également constantes. Dans ce cas, l'équation (19) conduit à la relation bien connue entre dissipation et taux de production moyen [9,10] :

$$2\bar{\rho}\tilde{\epsilon}_Y = -(Y_f - 2\tilde{Y} + Y_b)\bar{\omega} + 2\overline{Y''\omega} \tag{26}$$

Concernant maintenant l'équation (23), tous ses termes s'annulent puisque les fluctuations de fraction de mélange sont maintenant nulles. Nous concluons que la seule équation à résoudre dans ce cas limite est celle pour la fraction massique moyenne.

Traitant maintenant le cas des flammes de diffusion, les seuls états possibles  $(Y, \xi)$  se situent sur la courbe de fin de réaction  $Y_b(\xi)$ . En effet, suivant l'hypothèse des flammes minces, mélange entre combustible et oxydant et réaction chimique sont simultanés. Cette caractéristique se traduit par la relation suivante :  $Y = Y_b$ . On peut donc écrire  $\tilde{Y} = \tilde{Y}_b$  et  $\lambda = 0$ .

Finalement, les relations (19) et (23) dégénèrent naturellement vers les équations pour les seconds moments :

$$2\bar{\rho}\tilde{\epsilon}_Y = -L(\widetilde{Y_b''^2}) + 2\overline{Y_b''\omega} - 2\overline{\rho \mathbf{u}_b'' Y_b''} \cdot \nabla \tilde{Y}_b \tag{27}$$

$$2\bar{\rho}\tilde{\epsilon}_{Y\xi} = -L(\widetilde{Y_b''\xi''}) - \overline{\rho \mathbf{u}_b'' Y_b''} \cdot \nabla \tilde{\xi} - \overline{\rho \mathbf{u}_b'' \xi''} \cdot \nabla \tilde{Y}_b + \overline{\xi''\omega} \tag{28}$$

Dans ce cas limite des flammes de diffusion, les seules équations à résoudre sont celles pour la fraction de mélange moyenne et la variance de fraction de mélange. La connaissance de la PDF de fraction de mélange permet ensuite de déterminer  $\tilde{Y}_b$ ,  $\widetilde{Y_b''^2}$  et  $\widetilde{Y_b''\xi''}$  puis le taux de réaction chimique moyen suivant la relation [8] :

$$\bar{\omega} = L(\tilde{Y}_b) = -\rho D \nabla \xi \cdot \nabla \xi \frac{d^2 Y_b}{d\xi^2} \tag{29}$$

Il est clair que la forme de la courbe d'équilibre  $Y_b = f(\xi)$  joue un rôle crucial dans la représentation d'une telle flamme.

#### 4. Conclusions

Dans le cadre du régime des flammes minces, nous avons proposé une formulation générale permettant de développer des modèles numériques s'appliquant à l'ensemble des régimes des écoulements réactifs « partiellement prémélangés », depuis la flamme de prémélange en milieu homogène en richesse jusqu'à la flamme de diffusion. Cette formulation se traduit par un ensemble d'expressions reliant les taux de production chimique aux mécanismes de dissipation scalaire associés à une variable d'avancement des réactions chimiques et un scalaire passif caractéristique du mélange air-combustible. Ces résultats sont utilisables soit dans le cadre des approches de type RANS ou URANS, ou bien dans celui d'une modélisation de sous maille pour la simulation des grandes structures (LES). La cohérence de l'analyse exposée est validée par une étude des limites dans laquelle nous montrons que les équations et expressions algébriques concernant les dissipations scalaires dégénèrent naturellement vers les deux limites bien connues de la flamme « parfaitement prémélangée » et de la flamme de diffusion. Un modèle construit à partir de cette formulation ainsi que son application à un écoulement réactif turbulent d'intérêt pratique feront l'objet d'une autre note.

#### Références

- [1] O. Gicquel, N. Darabiha, D. Thévenin, Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion, *Proc. Combust. Inst.* 28 (2000) 1901–1908.
- [2] B. Fiorina, R. Baron, O. Gicquel, D. Thévenin, S. Carpentier, N. Darabiha, Modeling non-adiabatic partially premixed flames using flame-prolongation of ILDM, *Combust. Theory Model.* 7 (2003) 449–470.
- [3] V. Robin, A. Mura, M. Champion, P. Plion, A multi Dirac presumed PDF model for turbulent reactive flows with variable equivalence ratio, *Combust. Sci. Technol.* 118 (10–11) (2006) 1843–1870.
- [4] V. Robin, A. Mura, M. Champion, O. Degardin, B. Renou, M. Boukhalfa, Experimental and numerical analysis of stratified turbulent V-shaped flames, *Combust. Flame* 153 (1–2) (2008) 288–315.
- [5] P. Domingo, L. Vervisch, D. Veynante, Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow, *Combust. Flame* 152 (3) (2008) 415–432.
- [6] A. Mura, V. Robin, M. Champion, Modeling of scalar dissipation in partially premixed turbulent flames, *Combust. Flame* 149 (2007) 217–224.
- [7] K.N.C. Bray, P. Domingo, L. Vervisch, Role of the progress variable in models for partially premixed turbulent combustion, *Combust. Flame* 141 (4) (2005) 431–437.
- [8] R.W. Bilger, Turbulent jet diffusion flames, *Prog. Energy Combust. Sci.* 1 (1977) 87–109.
- [9] K.N.C. Bray, P.A. Libby, J.B. Moss, Unified modeling approach for premixed turbulent combustion, part I: General formulation, *Combust. Flame* 61 (1985) 87–102.
- [10] T. Mantel, R. Borghi, A new model of premixed wrinkled flame based on a scalar dissipation equation, *Combust. Flame* 96 (1994) 443–457.